物理学名家名作译丛

粒子物理和薛定谔方程

Particle Physics and the Schrödinger Equation

哈罗德·格罗斯
安德烈·马丁 著

刘翔
贾多杰
丁亦兵 译

中国科学技术大学出版社

“十二五”国家重点图书出版规划项目

选题编辑 肖向兵 责任编辑 马 瑞 封面设计 周 全

定价：28.00 元

ISBN 978-7-312-03460-2

9 787312 034602 >

当代科学技术基础理论与前沿问题研究丛书

物理学名家名作译丛

粒子物理和薛定谔方程

Particle Physics and the Schrödinger Equation

哈罗德·格罗斯
安德烈·马丁 著

刘 翔
贾多杰 译
丁亦兵

中国科学技术大学出版社

安徽省版权局著作权合同登记号：第 121414033 号

Particle Physics and the Schrödinger Equation, First Edition was originally published in the United States of America by Cambridge University Press in 1997. This translation is published by arrangement with Cambridge University Press.
All rights reserved.
© Cambridge University Press & University of Science and Technology of China Press 2014
This book is in copyright. No reproduction of any part may take place without the written permission ofCambridge University Press and University of Science and Technology of China Press.
This edition is for sale in the People's Republic of China (excluding Hong Kong SAR, Macau SAR and Taiwan Province) only.
此版本仅限在中华人民共和国境内(不包括香港、澳门特别行政区及台湾地区)销售.

图书在版编目(CIP)数据

粒子物理和薛定谔方程/(奥)格罗斯(Grosse,H.),(法)马丁(Martin,A.)著;刘翔,贾多杰,丁亦兵译. —合肥:中国科学技术大学出版社,2014.10
(当代科学技术基础理论与前沿问题研究丛书:物理学名家名作译丛)
("十二五"国家重点图书出版规划项目)
ISBN 978-7-312-03460-2

Ⅰ.粒… Ⅱ.①格… ②马… ③刘… ④贾… ⑤丁… Ⅲ.①粒子物理学 ②薛定谔方程 Ⅳ.①O572.2 ②O175.24

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 181373 号

出版 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号,230026
http://press.ustc.edu.cn
印刷 安徽省瑞隆印务有限公司
发行 中国科学技术大学出版社
经销 全国新华书店
开本 710 mm×1000 mm 1/16
印张 9.5
字数 196 千
版次 2014 年 10 月第 1 版
印次 2014 年 10 月第 1 次印刷
定价 28.00 元

编　委　会

主　编　叶铭汉　陆　埮　张焕乔　张肇西　赵政国

编　委　（按姓氏笔画排序）

马余刚（上海应用物理研究所）　　叶沿林（北京大学）

叶铭汉（高能物理研究所）　　任中洲（南京大学）

庄鹏飞（清华大学）　　陆　埮（紫金山天文台）

李卫国（高能物理研究所）　　邹冰松（理论物理研究所）

张焕乔（中国原子能科学研究院）　　张新民（高能物理研究所）

张肇西（理论物理研究所）　　郑志鹏（高能物理研究所）

赵政国（中国科学技术大学）　　徐瑚珊（近代物理研究所）

黄　涛（高能物理研究所）　　谢去病（山东大学）

献给 Heidi 和 Schu

内容简介

本书介绍了薛定谔势理论中的束缚态问题及其在粒子物理中应用的现代发展. 薛定谔方程提供了一个处理 N 体系统能级的框架,它是20世纪20年代物理学中量子革命的基石,并于80年代作为研究介子和重子能谱与衰变性质的有力工具而重新兴起. 本书从两体问题的详细研究开始,包括关于一般性质、能级顺序问题、能级间距以及衰变性质的讨论,随后又探讨了相对论推广以及一些逆问题,最后,处理了三体问题和 N 体问题. 书中考虑了在粒子物理和原子物理中的一些应用,其中包括夸克偶素能谱. 全书的重点自始至终放在展现理论怎样用实验来检验. 书中提供了许多参考文献.

本书不仅会引起粒子物理和原子物理实验物理学家的兴趣,而且会引起相应的理论物理学家的兴趣.

序

在1975年之前，除了少数例外，薛定谔方程与现代粒子物理学几乎没有什么联系.在1974年11月以后，当人们认识到J/ψ是由一对正反重夸克对构成时，强子的势模型才重新被关注，这种情况一直持续到1977年发现b夸克.很显然，这类强子类似于电子偶素，这也正是新词“夸克偶素”的来源.然而，与以库仑势为主导的电子偶素不同，夸克间的相互作用势并不清楚，因而不可能利用特殊模型做明确的数值计算.因此，肯定需要发展一些新的理论工具来研究几大类型位势的能级、分宽度、辐射跃迁等.这使得人们发现了有关薛定谔方程的大量全新的严格结果.这不仅引起了人们对定性地理解夸克偶素和更为普遍的强子的兴趣，而且这些发现自身也很有趣，它们反过来能够用于诸如原子物理等其他领域.除了一方面由Quigg和Rosner，另一方面由本书的作者分别在《Physics Report》撰写的、目前看来内容略显陈旧的综述，以及我们稍后会提到的由本书作者中的一位(A. M.)在1986年斯拉德明*“核物理国际大学周”(Internationale Universitätswochen für Kernphysik)会议文集中的综述之外，所有相关材料都分散在各类物理学期刊中.因此，显然有必要收集这些重要的准确结论，并有序地加以整理介绍.这正是在本书中，因为不断有新定理和新应用的出现而至少到某个截止日期为止，我们所试图做到的一切.这个日期的设定看上去可能还是显得略早，因为它是1995年初；而M. Richard和本书作者之一(A. M.)关于Ω_c粒子的研究结果就没能被包括进来.

本书有两个关注的中心.一方面，我们给出了一些严格的定理.另一方面，我们讲述了在原子物理和粒子物理中的一些极其成功的应用，但绝对没有试图从根本上去证明在强子物理中运用势模型的正确性.因为我们觉得，势模型最重要的证明就在于它所取得的成功.此外，我们不可避免地要简要评述诸如在位势中束缚态的计数这类比较经典的问题，而这些问题在过去20年中已经取得了一些进展.

本书没有囊括我们之前提到的那些综述中收集的所有内容.例如，具有高量子数能级的行为就没有在本书中重述(请见Quigg和Rosner的综述以及稍后将被引

---

* Schladming，奥地利的一个小镇，著名的冬季滑雪胜地.——译者

用的 Fulton 与 Feldman 和 Devoto 的两篇文章). 读者肯定会注意到本书章与章之间的风格差异. 然而,本书有其优点,其中之一就是,本书是唯一一部可以让初学者熟悉整个主题的书. 另一个优点是它不需要任何复杂的数学预备知识. 本书大部分内容所要求的就是知道二阶微分方程是什么.

我们必须提醒读者的是,与通常的用法不同,书中的定理不单独编号,而是像方程那样放在页面的右边.

我们要感谢很多人,主要是邀请我们写这本书的 Peter Landshoff,在这些年中他一直给我们支持,直到我们开始本书的正式撰写. 还有我们两人的妻子 Schu 和 Heidi 的坚决支持,我们对此表示感谢.

我们必须感谢通过他们的工作或者直接给予帮助的方式对本书做出贡献的许多物理学家. 以姓氏的阿拉伯字母顺序排列,他们是:B. Baumgartner、M. A. B. Bég、J. S. Bell、R. Benguria、R. Bertlmann、Ph. Blanchard、K. Chadan、A. K. Common、T. Fulton、V. Glaser、A. Khare、J. D. Jackson、R. Jost、H. Lipkin、J. J. Loeffel、J. Pasupathy、C. Quigg、T. Regge、J.-M. Richard、J. Rosner、A. De Rújula、A. Salam、J. Stubbe、A. Zichichi.

我们也要感谢来自欧洲核子中心(CERN)打字室的 Isabelle Canon、Arlette Coudert、Michèle Jouhet、Susan Leech-O'Neale,尽管本书作者之一(A. M.)的笔迹潦草,但是她们还是出色地完成了打印书稿的工作.

H. Grosse　A. Martin

于维也纳和日内瓦

目　　录

序 …… (i)

第 1 章　概论 …… (1)

1.1　历史的和唯象学的方方面面 …… (1)

1.2　严格的结果 …… (9)

第 2 章　两体问题 …… (21)

2.1　一般性质 …… (21)

2.2　能级的顺序 …… (26)

2.3　能级的间距 …… (48)

2.4　零点波函数、动能、均方半径及其他 …… (57)

2.5　能级排序结果的相对论推广 …… (72)

2.6　禁闭势的逆问题 …… (81)

2.7　束缚态的计数 …… (98)

第 3 章　三体和 N 体问题的各种结果 …… (112)

附录 A　超对称量子力学 …… (121)

附录 B　关于角向激发的一些定理的证明 …… (125)

附录 C　Sobolev 不等式 …… (129)

参考文献 …… (132)

索引 …… (138)

第1章　概　　论

1.1　历史的和唯象学的方方面面

薛定谔方程是在电子、中子和质子都被看作基本粒子的时代被构思出来的.它在现在被称为原子、分子物理的领域取得了极大的成功,并被成功地应用于重子和介子,尤其是由重的夸克-反夸克对组成的那些介子.

尽管在第二次世界大战之前,一些近似方法以探索的方式发展了起来,但直到战后,人们才求得能级和波函数的严格结果,同时也证明了这些近似方法是合理的.诸如"物质稳定性"那样令人印象深刻的全局结果以及包括束缚态个数限制在内的两体哈密顿量的性质都已经得到了证明.夸克偶素的发现导致从严格的观点出发对能级顺序问题作更仔细的考察,并且与诸如库仑势和谐振子势的偶然简并情况中所发生的能级顺序作比较.这些情况的比较还导致了两体系统中纯粹角激发的一些有趣结果.

在我们中间有谁不是曾经无数次写下"薛定谔方程"或"薛定谔函数"这类词句?或许我们的下一代还会这么做,从而让他的名字永远流传下去.

——Max Born

结果证明 Born 的预言准确无误,并且还将对于原子和分子物理,甚至——正如我们即将看到的——对于粒子物理也保持这种正确性.

在薛定谔因与实验不符而放弃了其相对论版本(所谓的克莱因-高登方程)进而他发现这个方程的时候,原子物理、核物理和粒子物理之间的差别尚不存在.薛定谔方程的奇妙性质在于,可以将其推广到多粒子系统,而且当它与泡利原理结合在一起时,允许人们——至少是**在原则上**——计算任何原子、任何分子和任何晶体,而不论它们的大小如何.狄拉克方程,其美丽无与伦比,却是一个单粒子方程,任何将其推广到 N 粒子体系的尝试都会有严格的局限性,如果推广过头而超过了限制,就可能导致矛盾,除非人们同意在更为广泛的量子场论框架下做这件事.

由于薛定谔方程具有处理 N 体系统的能力,所以在"二战"前的那个时期,诸

如 Thomas-Fermi 近似、Hartree 及 Hartree-Fock 近似和 Born-Oppenheimer 近似等各种各样的近似方法均得以开发和应用，这并没什么可惊讶的.

然而，除了人们所熟知的变分试探波函数给出一个系统的基态能量上限（连同允许人们求得一个系统的第 n 个能级上限的不太出名的最小-最大原理）这一事实之外，（人们）并没有付出认真的努力来严格地研究薛定谔方程. 主要是在 Heisenberg 的推动下，人们计算了一些简单的分子和原子，使化学，至少在简单情况下，成了物理学的一个分支. 而且，正如 Gamow 曾经指出的，薛定谔方程也能用于原子核，它由 Rosenblum 使用 α 谱仪证明有着离散能级.

直到第二次世界大战后，有关薛定谔方程严格性质的系统研究才开始起步. 在 20 世纪 50 年代，Jost[1]、Jost 和 Pais[2]、Bargmann[3] 以及 Schwinger[4] 和众多学者得到了两体薛定谔方程的一些漂亮结果. N 体问题也随之被研究. 在此，我们将特别提及这方面取得的非凡成就，即由 Dyson 和 Lenard 首次给出的“物质稳定性”的证明，随后它又被 Lieb 和 Thirring[6] 以定量的方式加以简化并有了相当大的改进，但仍有待进一步的研究[7]. “物质稳定性”或许应更恰当地称为物质的能量与体积的广延特征，即这样一个事实，NZ 个电子与具有电荷 Z 的 N 个核子有一个结合能，并占有与 N 成正比的体积. 在此期间，一些由纯引力相互作用的粒子构成的其他系统的行为也得到了澄清[8-9]. 后面提到的这些系统不存在上述稳定性；此类系统结合能的绝对值以 N 的更高幂次增长.

在 20 世纪 60 年代，除了或许被用于计算 μ 原子和 π 原子的能级或者由场论得到的势来计算中能区核子-核子散射振幅外[10]，似乎薛定谔方程在粒子物理学中正在变得过时. 人们希望基本粒子的质量可通过靴绊机制（Bootstrap mechanism）[11] 或者由有局限性但却异常成功的对称性得到.

在夸克模型被首次构造出来的时候，极少有物理学家把夸克视为粒子并试图用它们计算强子谱. 在那些曾经做过这方面尝试的人中，我们可以提一下在 1965 年牛津会议上几乎是“在沙漠里传道”的 Dalitz[13]，以及 Gerasimov[14]. 在 1974 年“十月革命”之后，情况急剧改变. J/ψ[15-16] 和 ψ'[17] 一被发现，这两个粒子作为粲夸克和反粲夸克束缚态的解释就被普遍接受了，并且利用了薛定谔方程的势模型立即被提了出来[18-19].

事实上，在 De Rujula、Georgi 和 Glashow 那篇至关重要的文章[20]，以及 Zeldovitch、Sakharov 和 Sakharov[21] 与 Federman、Rubinstein 和 Talmi[21] 独立完成的文章中，整个强子谱在夸克模型和量子色动力学的框架下被重新审视. 尤其是 Stanley 和 Robson[23-24]、Karl 和 Isgur[25]、Richard 和 Taxil[21]、Ono（小野）和 Schöberl[27] 以及 Basdevant 和 Boukraa[28] 得到了令人印象深刻的关于重子谱的拟合（包括含有轻夸克的那些重子）.

我们现在回到夸克偶素，即由重的夸克-反夸克对构成的那些介子的情况. 作为重夸克，我们指的是有效质量分别约为 1.8 GeV 和 5 GeV 的 c 夸克和 b 夸克，还

有奇异夸克，对于它，有效质量被证明为 0.5 GeV. 奇异夸克正好处于边缘位置，或者可以像这里这样当作重夸克，或者像在 $SU(3)$ 味对称性中那样被当作轻夸克. 在这份清单中，我们打算将顶夸克包括进来，由 DO 实验可知[29] 顶夸克肯定比 131 GeV 还要重. 从依据标准模型并包括诸如 W 和 Z^0 粒子的质量和宽度及其分衰变宽度以及低能中微子实验（在有一个标准的 Higgs 粒子的情况下）在内的实验结果的拟合来看，预言的顶夸克的质量要大于 150 GeV[30]. 由于顶夸克的质量超过 110 GeV，顶夸克偶素的概念就成问题了，这是因为由单个顶夸克衰变，$t \to b + W$，所决定的顶夸克偶素的宽度超过了其 1S 态和 2S 态之间的质量差[31]. 事实上，顶夸克的存在目前已经获得确认，其质量为 (175 ± 9)GeV.

图 1.1 和图 1.2 分别给出了 $c\bar{c}$ 束缚态（J/ψ 等）和 $b\bar{b}$ 束缚态（ϒ 等）的实验状况的总结.

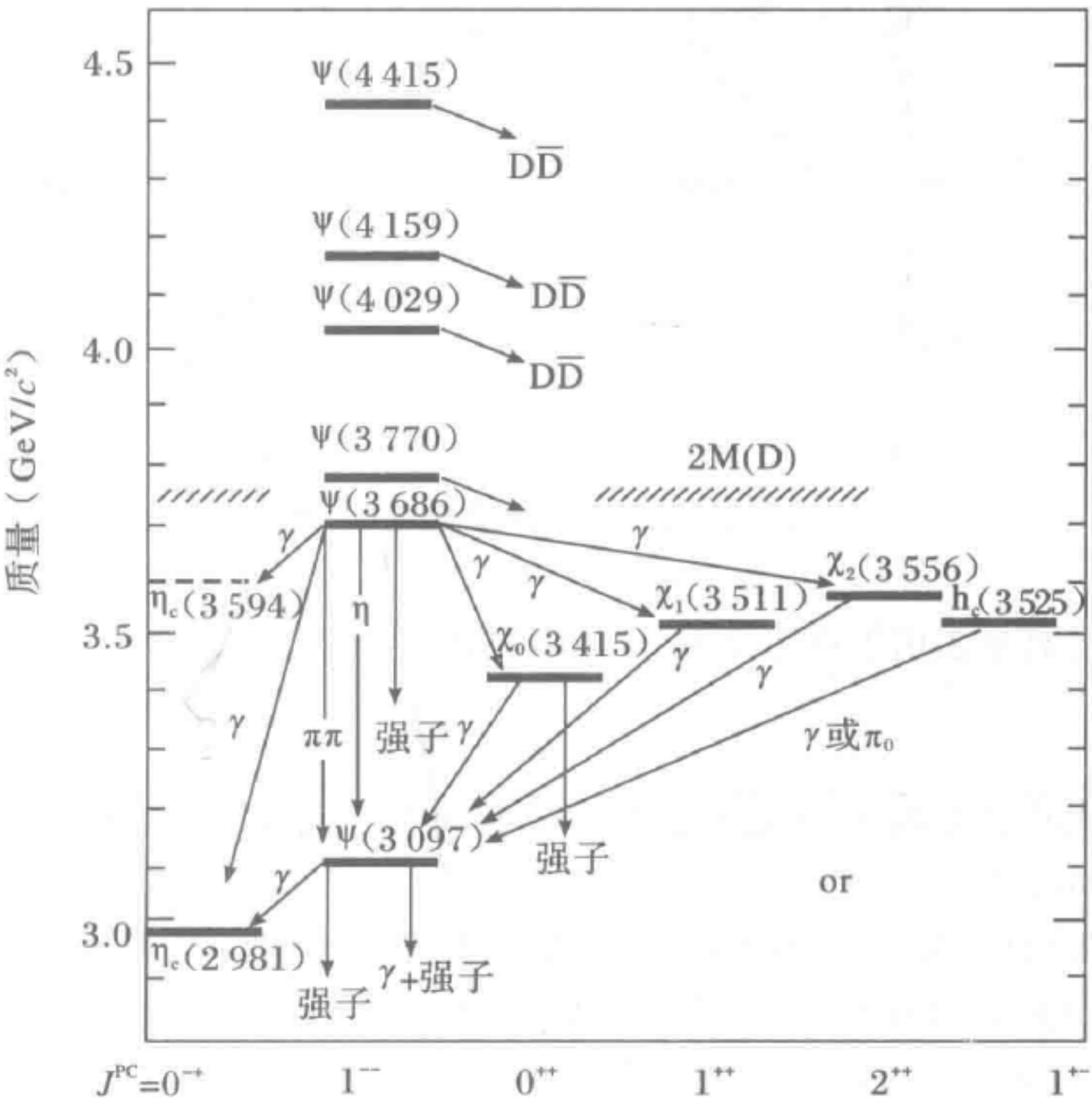

图 1.1 有关 $c\bar{c}$ 束缚态的实验数据

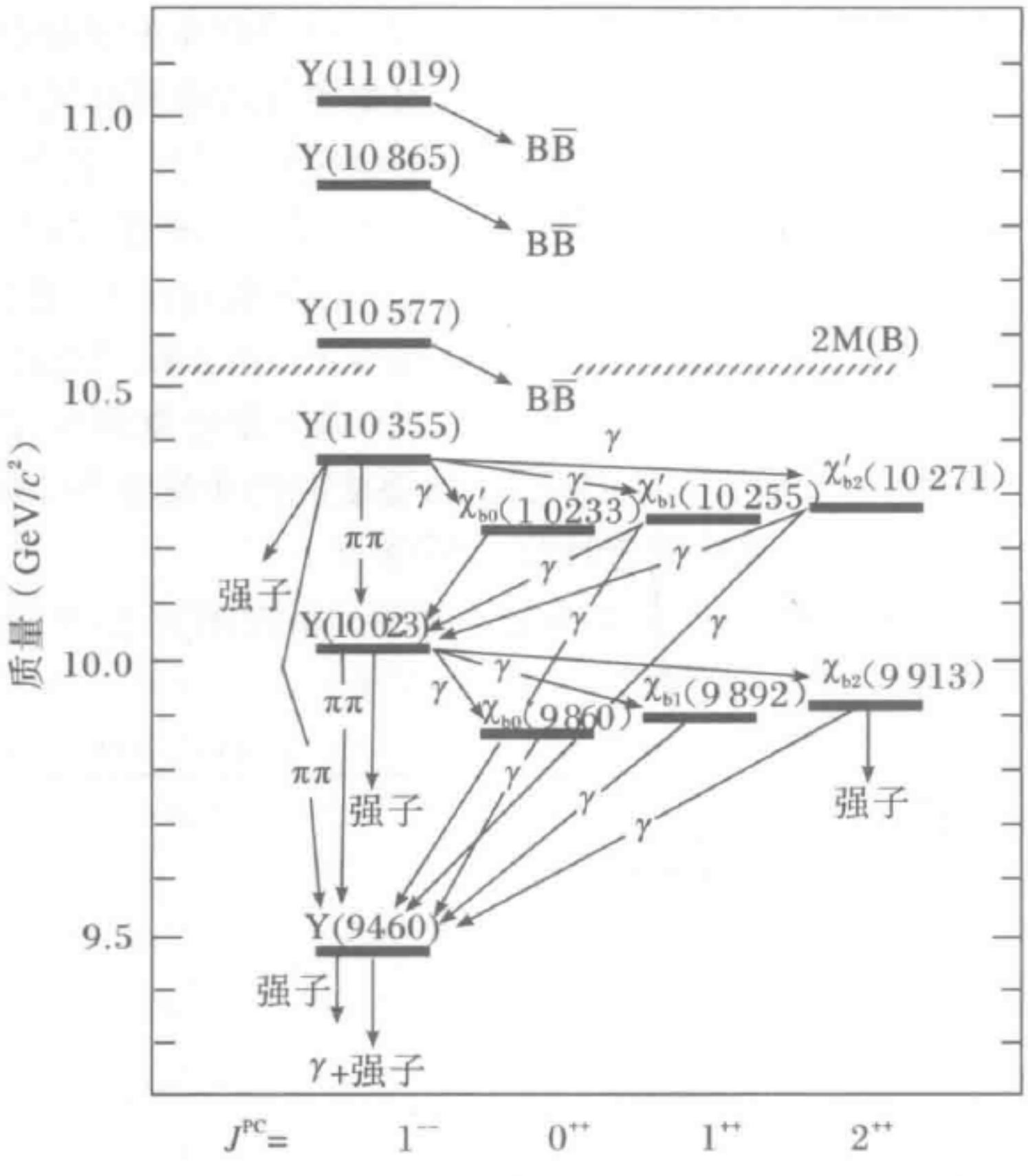

图 1.2　有关$b\bar{b}$ 束缚态的实验数据

当然，已有很多用于描述$c\bar{c}$ 和$b\bar{b}$ 能谱的势模型. 首先是位势

$$V = -\frac{a}{r} + br, \tag{1.1}$$

其中第一项表示类似于单光子交换的单胶子交换，而第二项则代表由一种弦（string）产生的禁闭.

我们将自己局限于拟合的两种极端情况中. 第一种情况是由 Buchmüller[33] 提出的一种受 QCD 启发的位势，其中位势的短程部分考虑了渐近自由；第二种情况则是由本书作者之一（A. M.）利用中心势

$$V = A + Br^{\alpha} \tag{1.2}$$

所作的一个纯粹唯象的拟合[34].

图 1.3 显示了$c\bar{c}$ 系统和$b\bar{b}$ 系统的激发态能量. 实线表示实验结果（对于 P 波三重态，我们仅给出**自旋平均**能量）. 虚线表示 Buchmüller 等人的结果，而点线是由方程式(1.2) 的位势得到的结果，对于它，添加了一个力程为零（zero-range）的自旋-自旋相互作用 $C\delta^3(x)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)/(m_1 m_2)$，其中 m_1 和 m_2 是夸克的质量，而 C 被调整到适合 $J/\psi - \eta_c$ 的间距. 这个中心势由文献[24] 给出：

$$V = -8.064 + 6.870r^{0.1}, \tag{1.3}$$

这里的单位是 GeV 的幂次，而夸克质量为 $m_b = 5.174$，$m_c = 1.8$，以及我们随后将看到的 $m_s = 0.518$. 指数上的值很小，即 $\alpha = 0.1$，意味着我们非常接近这样一种情形，即能级间隔与夸克质量无关，恰为纯对数势情况.

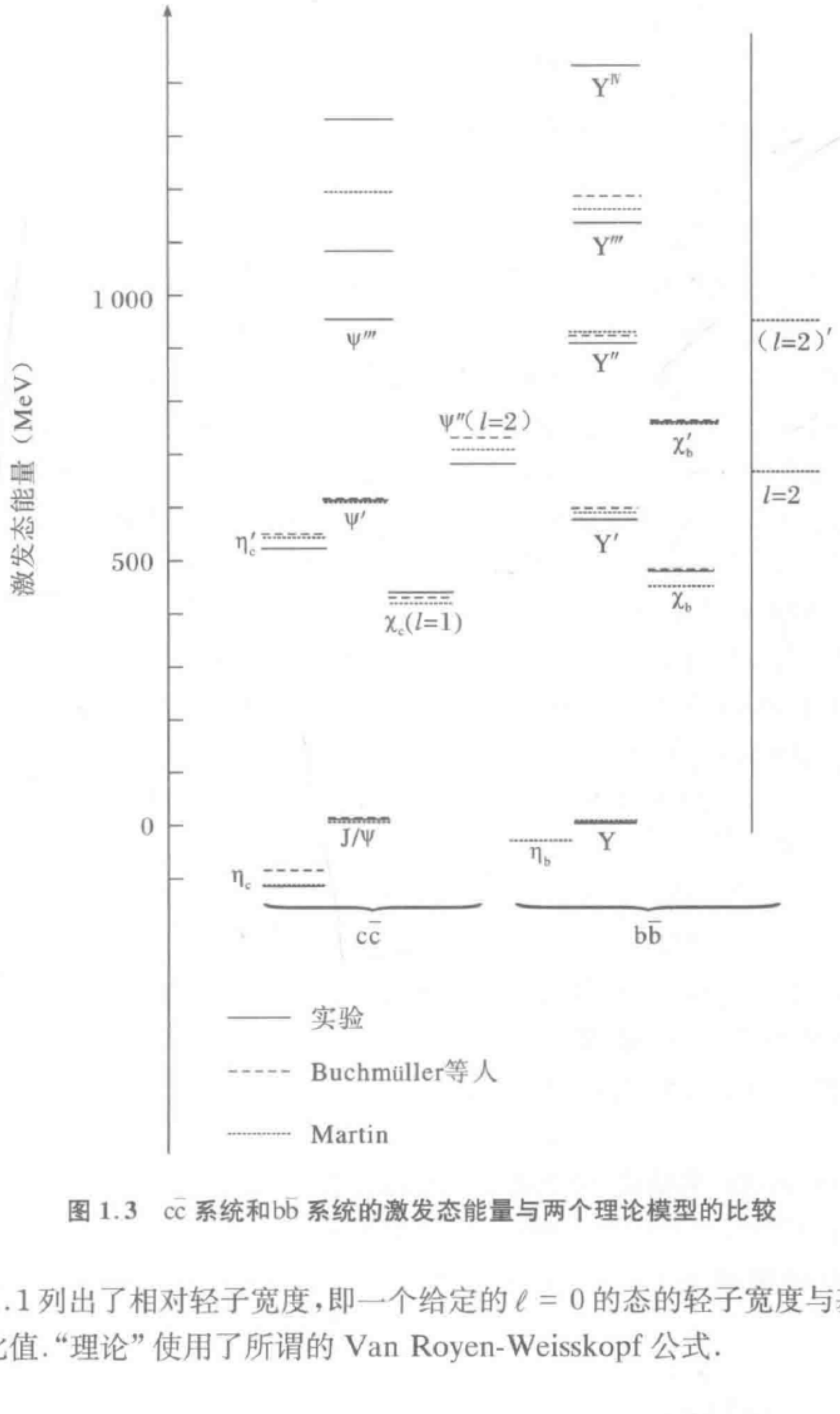

图 1.3 $c\bar{c}$ 系统和 $b\bar{b}$ 系统的激发态能量与两个理论模型的比较

表 1.1 列出了相对轻子宽度，即一个给定的 $\ell = 0$ 的态的轻子宽度与基态轻子宽度的比值.“理论”使用了所谓的 Van Royen-Weisskopf 公式.

表 1.1　相对的轻子宽度

	实　验	Buchmüller	Martin
ψ'	0.46 ± 0.6	0.46	0.40
ψ'''	0.16 ± 0.02	0.32	0.25
Υ'	0.44	0.44	0.51
Υ''	0.33	0.32	0.35
Υ'''	0.20	0.26	0.27

我们看到这两种拟合都极佳.受 QCD 启发的拟合稍微更好一点地重建了低能态,尤其是$b\bar{b}$ 系统的 $\ell = 0$ 的态与 $\ell = 1$ 的态的间隔.这大概是由于这样一个事实,即受 QCD 启发的位势具有正确的短程行为而唯象的位势却没有(存在一个 40 MeV 的差异,在 1974 年之前,人们会认为它是可以忽略的,但是在采用强子谱精度新标准的情况下,这个差异不再被忽视).另一方面,唯象势则对更高的一些激发态拟合得更好,这些激发态靠近离解为介子对 $D\bar{D}$,$B\bar{B}$ 的阈值.这可能是由于这样一件事实,即优化的 $\alpha = 0.1$ 考虑到了由于与开放道(open channel)的耦合而使禁闭道$c\bar{c}$ 和$b\bar{b}$ 的能量下降.

在唯象势参数清单中,我们已经指出了奇异-夸克的有效质量 $m_s = 0.518$ GeV.这是因为,按照 Gell-Mann 的建议,我们已将唯象模型推广到了超出其有效性的范围!值得注意的是,我们得到了许多成功的预言.虽然 $M_\phi = 1.020$ GeV 是一个输入参数,但 $M_{\phi'} = 1.634$ Gev 与实验(1.650 GeV) 相符.在 De Rujula 的要求下,一些 $c\bar{s}$ 态的质量也被算出来了.我们得到

$$M_{D_s} = 1.99 \quad (\text{实验值 } 1.97,\text{以前是 } 2.01),$$

$$M_{D_s^*} = 2.11 \quad (\text{实验值 } 2.11),$$

而在 1989 年 Argus[35] 观测到一个大概是 $\ell = 1$ 的 $c\bar{s}$ 态,它可能是质量为 2.536 GeV 的 $J^P = 1^+$ 或 $J^P = 2^+$ 的态.不用改变任何模型参数,这样的一个态的自旋平均质量可以计算出来,结果为[36]

$$M_{D_s^{**}}(\ell = 1) = 2.532.$$

我们可以得出这样的结论:由 Argus 观测到的这个态偏离质心不会超过 30 MeV.

更近些时候,一个 B_s 介子在 LEP* 和费米实验室都被观测到了,对质量的最小二乘法拟合结果是(5 369 ± 4) MeV[37],而模型的理论预言是 5 354 ～

---

* LEP 是早先位于欧洲核子中心的大型电子对撞机(Large Electron Collider) 的简称,现已停机,它的地下隧道让位于大型强子对撞机 LHC. —— 译者

5 374 MeV[38]. 我们不可能不被这些势模型的成功所打动. 但是, 它们为什么会成功呢?各种势模型适用的事实可以被理解为:在相关的距离范围内, 比如说, 从 0.1 飞米到 1 飞米, 不同的位势是彼此一致的. 然而, 相对论效应并不小; 对于$c\bar{c}$ 系统, 事后计算得到的 v^2/c^2 在 1/4 量级.

我们不得不提出的唯一的、部分的解释是, 这种位势只不过是与一个有效薛定谔方程联系在一起的有效势. 例如, 我们能够将 $\sqrt{p^2 + m^2}$, 即相对论的动能 + 质量能量, 在平均值$\langle p^2 \rangle$ 附近而不是在 0 附近展开. 对于一个纯对数势, 平均动能不依赖于其激发, 而碰巧这个位势没有远离对数行为. 无论如何, 我们必须采取势模型可用的务实态度, 并尽我们所能尝试扩展其结果.

涉及重子的讨论, 我们将更简略些. 完全由重夸克组成的重子, 例如 bbb 和 ccc, 尚未发现, 尽管它们一定存在. Bjorken[39] 主张研究 ccc, 它拥有一些显著的特征:对强相互用, 它是稳定的, 具有一个零点几乘上 10^{-13} 秒的寿命. 它的最低激发态也是稳定或几乎稳定的. 如果我们接受由文献[40] 给出的重子内部的夸克-夸克势

$$V_{QQ} = \frac{1}{2} V_{Q\bar{Q}}, \tag{1.4}$$

则由成功的$c\bar{c}$ 位势, 我们能够计算出 ccc 的所有性质. Bjorken 认为, 这个态能以不太小的观测速率产生出来.

与此同时, 我们应当记住, 奇异夸克可以被认为是重夸克. J. M. Richard 利用夸克偶素的拟合式(1.3) 和规则式(1.4), 求得的 Ω^- 重子 sss 的质量为 1.665 GeV[41], 而实验[42] 给出的是 1.673 GeV.

对于由更轻夸克组成的那些重子, 追随 Dalitz 开创性的工作, De Rujula、Georgi、Glashow[20], Zeldovitch 和 Sakharov, 以及 Sakharov[21], 还有 Federman、Rubinstein 和 Talmi[22] 等发表了一系列文章. 在这些工作中, 取中心势为零或者常数, 即纳入夸克质量和由 QCD“导出”的自旋-自旋力的主要特点, 后者曾导致一些引人注目的结果, 特别是对 $\Sigma - \Lambda$ 质量差首次给出解释. 在作为中心势零级的这种方法中, 激发态的计算被排除在外.

下一步是添加一个软的中心势, 并试图精确求解三体薛定谔方程. 许多人曾经这样做过. 这些先驱当中有 Stanley 和 Robson[24], 而 Karl、Isgur 和他们的合作者[25,43] 的工作则是最为系统的.

这里我们想把研究限制在基态, 它曾经被, 例如, 小野和 Schöberl[27] 及 Richard 和 Taxil[26] 研究过了. 例如, 我们将展示 Richard 和 Taxil 的结果, 如表1.2 所示, 他们用了一个位势 $V = A + Br^{0.1}$ 和一个自旋-自旋哈密顿量

$$C \frac{\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j}{m_i m_j} \delta(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j). \tag{1.5}$$

表 1.2　对于 $V = A + Br^{0.1}$* 的质量

	理　论	实　验
N	输入	0.939
Δ	输入	1.232
Λ^*	1.111	1.115
Σ	1.176	1.193
Ξ	1.304	1.318
Σ^*	1.392	1.383
Ξ^*	1.538	1.533
Ω^-	输入	1.672
Λ_c	输入	2.282
Σ_c	2.443	2.450
Σ_c^*	2.542	
$\Xi_c = A$	2.457	2.460
S	2.558	
S^*	2.663	

尽管这些结果很好，但是这个中心势的严格处理是否的确会导致一个真正的改善并非完全显而易见. 为了证明这点，我们已经取了一些比值，在 De Rújula、George 和 Glashow 的模型[20] 中给出了这些简单的数值，这些比值已列在了表1.3的计算值与实验值的比较当中.

也许值得注意的是，曾作为 Gell-Mann 成就的 $SU(3)$ 味十重态等间距规则(equal-spacing rule)，以一种极不寻常的方式成为这里的一部分. 当然，如果自旋-自旋力和中心势都被忽略，等间距规则是绝对正常的，因为态的质量仅仅通过把夸克质量加在一起就可得到. 因此，这个质量是奇异数(strangeness) 的**线性**函数.

然而，Richard 和 Taxil[44] 通过数值实验发现，如果我们取一个“合理”的、味无关的两体中心势，十重态的质量则是奇异数的**凹**函数(concave function). 换句

* 原著中的 τ 应该为 r，我们已做更正. —— 译者

话说：

$$M(\mathrm{ddd}) + M(\mathrm{dss}) < 2M(\mathrm{dds}). \tag{1.6}$$

表 1.3 质量差的比值(包括 Gell-Man-Okubo 的预言(G.M.O)) 同实验的比较

	De Rujula Georgi Glashow Sakharov Zeldovitch Federman Rubinstein Talmi	Richard Taxil	实验
$(M_{\Xi^*} - M_{\Xi})/(M_{\Sigma^*} - M_{\Sigma})$	1	1.08	1.12
$(2M_{\Xi^*} + M_{\Sigma} - 3M_{\Lambda})/2(M_{\Delta} - M_{\mathrm{N}})$	1	1.07	1.05
$(3M_{\Lambda} + M_{\Sigma})/(2M_{\mathrm{N}} + 2M_{\Xi})$ GMO 八重态	1	1.005	1.005
$(M_{\Sigma^*} - M_{\Delta})/(M_{\Xi^*} - M_{\Sigma^*})$ GMO	1	1.10	1.03
$(M_{\Xi^*} - M_{\Sigma^*})/(M_{\Omega^-} - M_{\Xi^*})$ 十重态	1	1.09	1.08

1.2 严格的结果

这里或许是转到本书主要部分的最适当地方，它涉及考虑了势模型的薛定谔方程的一些严格结果.

回到不等式(1.6)，我们可以陈述由 Lieb[45] 得到的定理：

如果两体势 $V(r)$ 是这样的，即

$$V' > 0, \quad V'' < 0, \quad V''' > 0,$$

则 M 是一个奇异夸克质量的凹函数. 例如，对于

$$V = -\frac{a}{r} + br, \quad V = r^{0.1}, \quad \cdots,$$

情况均为如此.(然而，对于带有大指数的幂次势，例如 $V = r^5$[44]，这个性质并不对.)

现在，让我们再回到十重态中的线性性：它源自中心势和自旋-相关势效应之间的相消.

我们刚才所看到的仅仅是一个例子：十重态能级的计算导致了对某一类位势相对于奇异-夸克质量成凹形(concavity) 性质的发现.

现在，我们将专注于两体系统. 请读者返回到图 1.1 和图 1.2 中的$c\bar{c}$ 和$b\bar{b}$ 能谱. 一个显著的性质就是，平均的P态($\ell = 1$) 质量**小于**第一径向($\ell = 0$) 激发态. 所有现有的模型满足这个性质，特别是在 P 态发现之前就指出了这一点的最初模型[18-19](在法国物理学会(Societe Frangaise de Physique)Dijon* 大会上，Gottfried 曾说，如果这些 P 态未能在这个正确的位置，他们的模型将被终结. 而知道有这些 P 态迹象的一位来自 SLAC 的实验家却保持沉默!). 作者之一(A. M.) 在洛克菲勒大学(Rockefeller University) 访问期间曾被 Bèg 问及，这些预言是否是该模型所特有的以及是否可以通过修改位势而改变?因此，问题就是要找到一个简单的判据来决定在一个给定的位势中能级的顺序. 尽管一些初步的结果在 1977 年就由本书的作者得到了，但是，直到 1984 年，这一情形才被最终澄清.

我们用 $E(n,\ell)$ 表示角动量为 ℓ 并且径向波函数具有 n 个节点的态的能量. 对于一个一般的位势，我们只有下列限制：

$$E(n+1,\ell) > E(n,\ell), \tag{1.7}$$

$$E(n,\ell+1) > E(n,\ell), \tag{1.8}$$

它们分别源自 Sturm-Liouville 理论和离心项的正定性. 我们想要的不止这些!

有两个位势，即库仑势和谐振子势，对它们而言，薛定谔方程对所有 ℓ 和 n 的解都是已知的，并显示出“偶然”简并. 事实上，通过变量代换，我们能从一个变为另一个. 库仑势可以用下式表征：

$$r^2 \Delta V(r) = 0, \tag{1.9}$$

也就是说，原点之外拉普拉斯算符作用在该位势上为 0，而谐振子势满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = 0, \tag{1.10}$$

即它对 r^2 是线性的.

现在，在夸克偶素情形下，关于位势我们能说些什么呢?首先，我们有“渐近自由”.“强”渐近自由是指当夸克之间的力为 $-\alpha(r)/r^2$ 时，满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\alpha(r) > 0, \tag{1.11}$$

这等同于

$$r^2 \Delta V(r) > 0. \tag{1.12}$$

另一方面，根据Seiler[46] 的观点，格点QCD意味着 V 是**渐增的**并且是**凹形的**，

---

* 第戎，是法国的东部城市. —— 译者

它反过来则意味着

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}<0. \tag{1.13}$$

接下来有两个主要的定理[47]，它们与这个情形相关(并且，正如我们将看到的，也和其他一些情形相关).

定理

$$E(n,\ell)\gtrless E(n-1,\ell+1),$$
$$\text{如果 } r^2\Delta V(r)\gtrless 0 \quad \forall\, r>0. \tag{1.14}$$

定理

$$E(n,\ell)\gtrless E(n-1,\ell+2),$$
$$\text{如果 } \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\gtrless 0 \quad \forall\, r>0, \tag{1.15}$$

也就是说，如果 V 对于 r^2 是凸的或者凹的.

然而，还有其他一些重要结果，从中我们选择了下列这些.

定理[48]

$$E(0,\ell)\text{ 关于 }\ell\text{ 是凸的(凹的)},$$
$$\text{如果 } V\text{ 关于 }r^2\text{ 是凸的(凹的)}. \tag{1.16}$$

$E(0,\ell)$ 在 20 世纪 60 年代曾经被称作“领头 Regge 轨迹(leading Regge trajectory)”.

定理[49] (1) $\ell=0$ 能级间的间隔随 n 增加(减小)：

$$E(n+2,0)-E(n+1,0)\gtrless E(n+1,0)-E(n,0),$$
$$\text{如果 } V=r^2+\lambda v,\lambda\text{ 小，并且 }\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^5\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}\gtrless 0\,\forall\, r; \tag{1.17}$$

(2) 如果 $V''<0$，它会**减小**(这一结果的证明尚未完成，所以它实际上只是一个猜想，我们以 99.9% 的概率相信它).

定理[50] 如果 $r^2\Delta V\gtrless 0$，并且

$$\frac{\mathrm{d}^2E(0,\ell)}{\mathrm{d}\ell^2}+\frac{3}{\ell+1}\frac{\mathrm{d}E(0,\ell)}{\mathrm{d}\ell}\gtrless 0, \tag{1.18}$$

这意味着

$$\frac{E(0,\ell+1)-E(0,\ell)}{E(0,\ell)-E(0,\ell-1)}\gtrless\frac{E_c(0,\ell+1)-E_c(0,\ell)}{E_c(0,\ell)-E_c(0,\ell-1)}, \tag{1.19}$$

其中，E_c 是库仑势的能量，且

$$E_c=-\text{常数}(\ell+1)^{-2}.$$

图 1.4 说明了式(1.14).实线表示纯库仑势的情况，虚线为 $r^2\Delta V>0$ 的情况，而点线为 $r^2\Delta V<0$ 的情况.



图 1.4　受拉普拉斯算符作用为零、为正或者为负的位势能级顺序的图示说明

现在，对夸克偶素的应用是显而易见的. 我们很清楚地在图 1.1 和图 1.2 中看到这一点，并且我们也看到，它对应于 $r^2\Delta V \geqslant 0$ 的情况. 然而，还有一些其他的应用.

我们要考虑的首个应用是那些 μ 原子(muonic atoms)，其中原子核的大小相对于 Bohr 轨道不能被忽略. 因为原子核具有一个正电荷的分布，根据 Gauss 定律，它产生的位势在拉普拉斯算符作用下为正. 在由 Engfer 等人[51] 得到的表中，我们发现了有关 μ^{-138}Ba 原子的丰富数据.

特别是借助谱学符号(notation)，对于 $N = 2$ 的能级，我们发现

$$2s_{1/2} - 2p_{1/2} = 405.41\ \text{keV},$$

它是正的，并且对于一个点状的原子核，它就是 0(甚至对 Dirac 方程也如此). 对于 $N = 3$，我们类似地有

$$3d_{3/2} - 2p_{1/2} = 1\,283.22\ \text{keV},$$

而

$$3p_{3/2} - 2p_{1/2} = 3p_{3/2} - 2s_{1/2} + 2s_{1/2} - 2p_{1/2} = 1\,291.91\ \text{keV},$$

这意味着

$$3p_{3/2} > 3d_{3/2}.$$

对于 $N = 4$，一个 4 keV 的破坏被发现，但是，这与相对论修正相容.

另一个应用是对碱金属原子. 在这些碱金属原子中，外层电子被点状的原子核以及带负电的电子云所产生的位势所控制，以至于在 Hartree 近似下，我们有 $r^2\Delta V < 0$. 图 1.5 和图 1.6 分别用图对锂和钠[52] 阐明了这一情形.

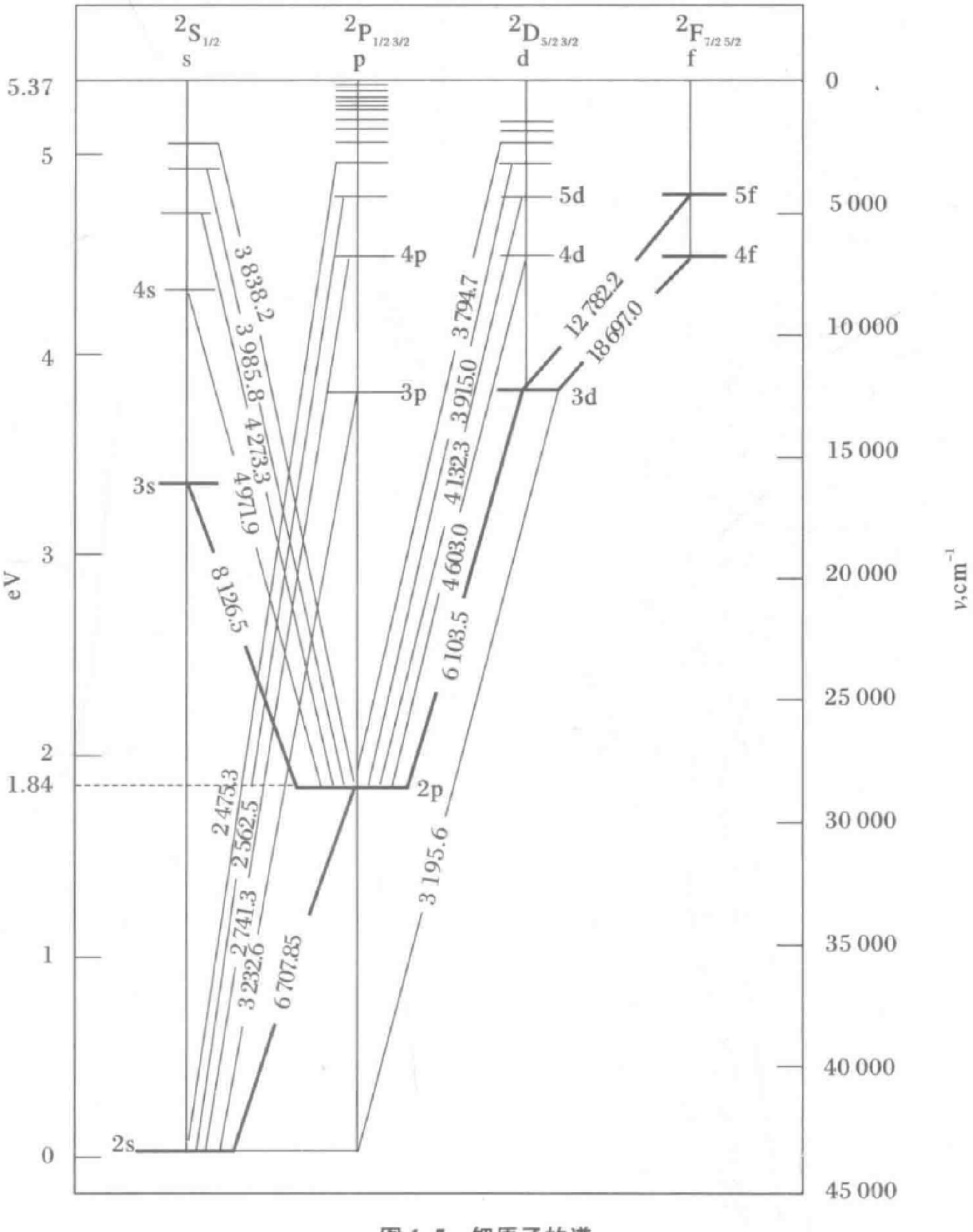

图 1.5 锂原子的谱

现在，我们要转到式(1.15). 图 1.7 显示了谐振子势(实线)、满足$(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)>0$条件的势(虚线)和满足$(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)<0$条件(点线)的势的能级图.

当然,被称作 ψ'' 的$c\bar{c}$ 系统的 $\ell=2$ 的态满足这个定理:

$$M_{\psi}=3.77\ \mathrm{GeV},\quad \text{而}\quad M_{\psi}=3.68\ \mathrm{GeV}.$$

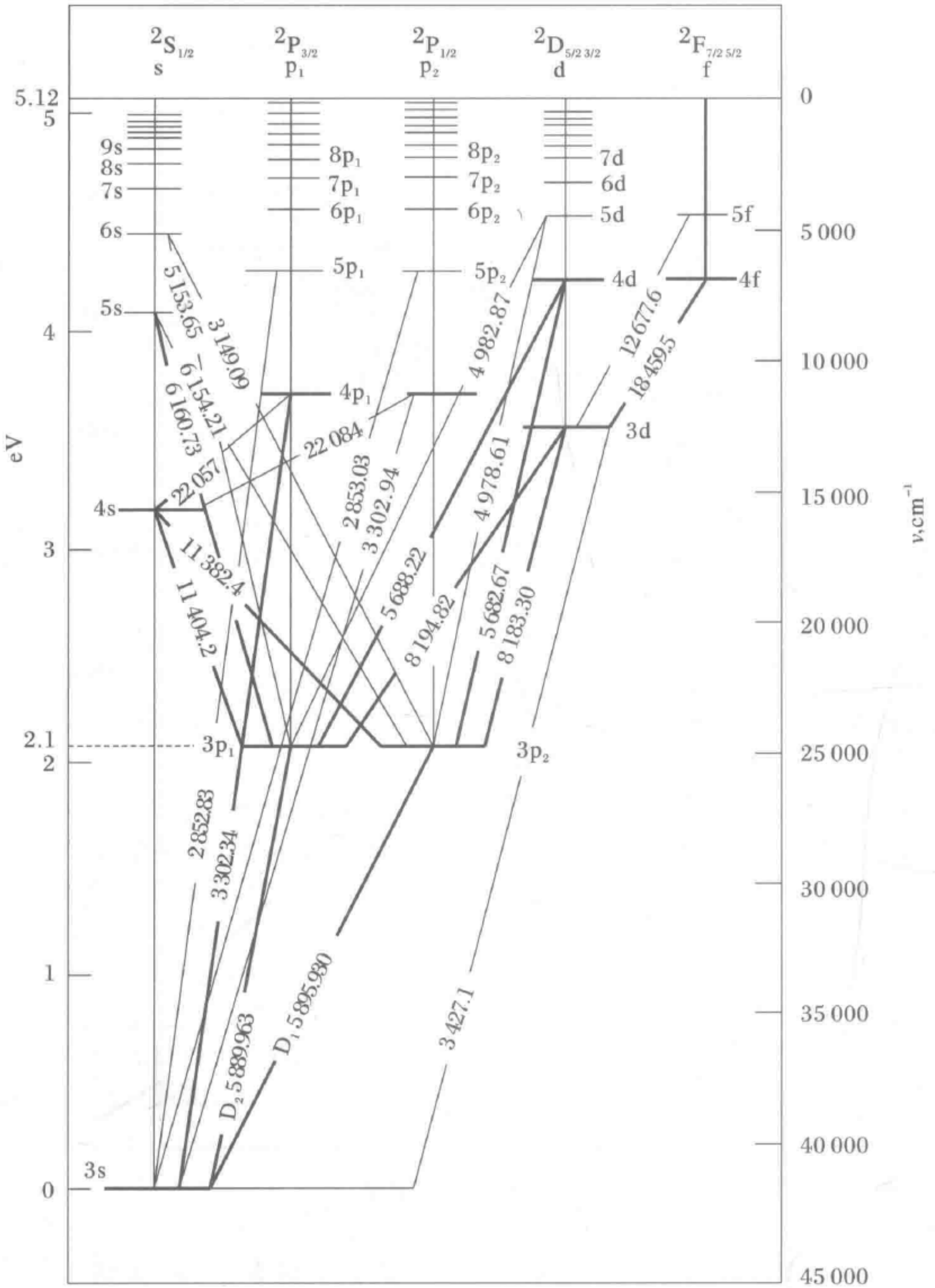

图 1.6　钠原子的谱

其次，我们想说明式(1.19)[50]，它涉及纯粹的角激发. 如果 $r^2\Delta V \gtrless 0$，则

$$\frac{E_{3d}-E_{2p}}{E_{2p}-E_{1s}} \gtrless 0.185\cdots, \tag{1.20}$$

$$\frac{E_{4f}-E_{3d}}{E_{3d}-E_{2p}} \gtrless 0.35, \tag{1.21}$$

$$\frac{E_{5g}-E_{4f}}{E_{4f}-E_{3d}} \gtrless 0.463\cdots. \tag{1.22}$$

当然，$c\bar{c}$ 系统满足带有“$>$”号的不等式(1.20)：

$$\frac{M_{\psi'}-M_{\chi c}}{M_{\chi c}-M_{J/\psi}}=\frac{3.77-3.51}{3.51-3.10}=0.634\gg 0.185,$$

但这不是非常令人激动的.我们相信，正是在 μ 原子中[51] 我们找到了最惊人的例证.

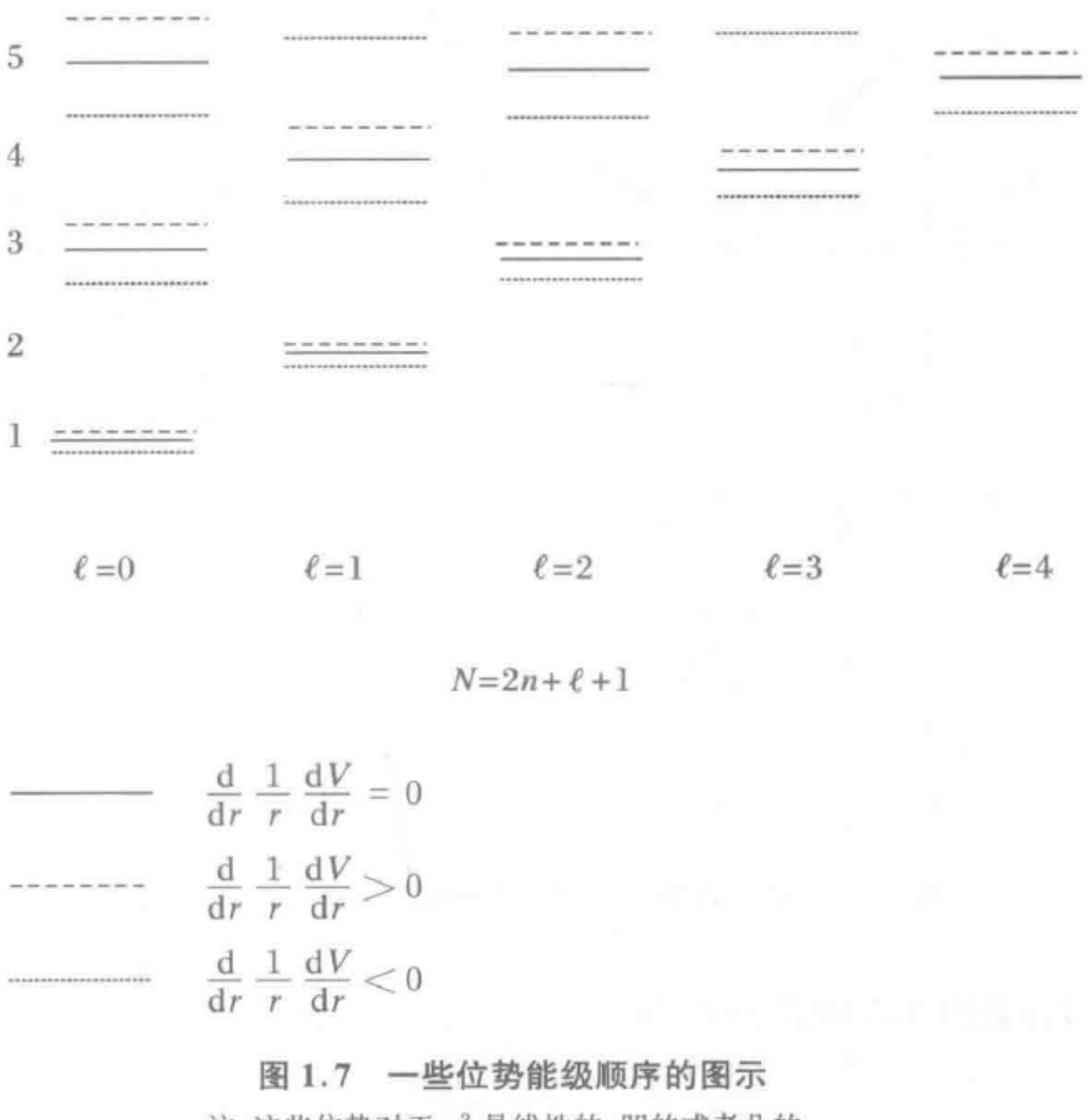

图 1.7 一些位势能级顺序的图示

注：这些位势对于 r^2 是线性的、凹的或者凸的.

在图 1.8 中，我们显示了作为原子核的电荷 Z 的函数的这一比值式(1.20)、式(1.21)和式(1.22).我们已通过一个不在此描述的步骤消除了相对论效应.我们看到，随着 Z 的增加，前两个比值很明显地偏离库仑势的值，而最后一个比值则保持不变，它对原子核非零的尺寸是不敏感的.

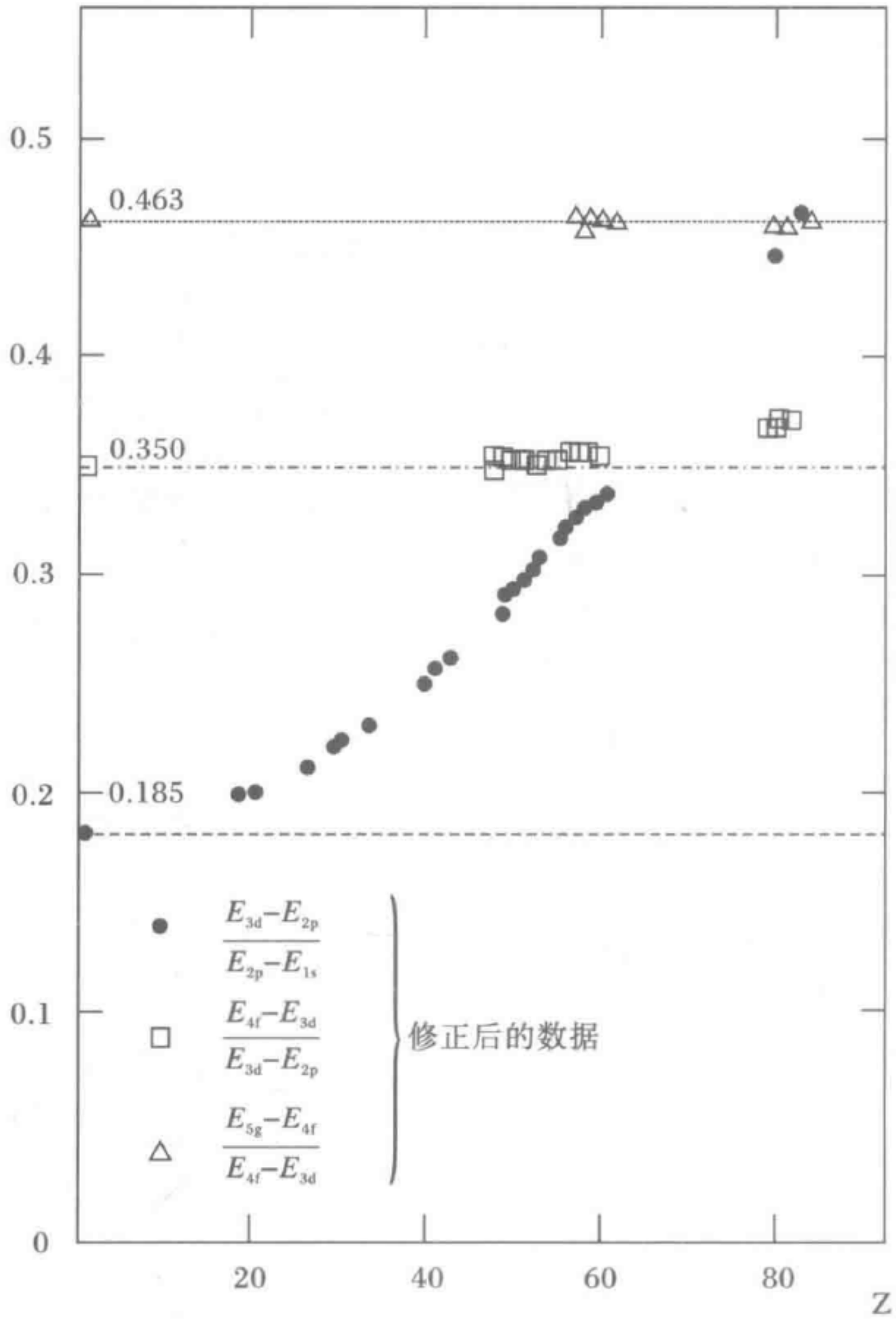

图 1.8　μ 原子角激发之间间距的比作为原子核电荷的函数

通过查看图 1.5 中锂的谱，得到一个沿相反方向变化的例证. 我们发现

$$\frac{E_{4f}-E_{3d}}{E_{3d}-E_{2p}}=0.326<0.35,$$

它正是我们应当得到的.

利用 Bashkin 和 Stone 的表[53]，表 1.4 列出了锂序列的和钠序列的一些能级差的比率. 在那些电离能中，也有一些不等式，它们可以被求得并用于检验那些实验数据所声称的精度.

表 1.4 锂序列和钠序列的角激发间距比

	锂序列			钠序列		
	$\frac{4f-3d}{3d-2p}$	$\frac{5g-4f}{4f-3d}$		$\frac{5g-4f}{4f-3d}$	$\frac{6h-5g}{5g-4f}$
库仑	0.35	0.463 8	库仑	0.463 8	0.543 2
Li Ⅰ	0.326				
Be Ⅱ	0.324	0.462			
B Ⅲ	0.326	0.462			
C Ⅳ	0.329	0.462			
N Ⅴ	0.331	0.462			
O Ⅵ	0.331				
F Ⅶ	0.334	0.462			
Ne Ⅷ	0.336				
Na Ⅸ			Na Ⅰ	0.456	0.542 6
Mg Ⅹ	0.338		Mg Ⅱ	0.444	0.541 9
Al Ⅺ	0.339		Al Ⅳ	0.432	0.541 3
Si Ⅻ	0.339		Si Ⅳ	0.423	0.540 9
P XIII	0.339		P Ⅴ	0.418	0.540 6
S XIV	0.340		S Ⅵ	0.416	

我们甚至可以更进一步将 μ 子或者外层电子的自旋纳入进来，并且，在这些以半相对论方式处理的纯粹角激发的精细结构劈裂中，得到了一些有趣的不等式. 对这些 μ 原子的一个应用表明，对于 $Z<40$ 的情况，实际数值和这些约束界限相差不到 20%. 在碱金属原子的情况下，锂序列勉强满足这些不等式，但对钠序列遭到破坏. 这是有关这些系统的 Hartree 近似失败的一个标志，也是预料之中的事，因为钠三重态被反转了，也就是说，带有更高 J 的态反倒更低.

接下来，我们将评论有关 $c\bar{c}$ 单态以及 $b\bar{b}$ 系统的 P 态劈裂. 这些 P 态是通过自旋-自旋力、自旋-轨道力和张量力劈裂的. 本书作者之一（A. M.）同 Stubbe[54] 一道曾经假定，该劈裂可由 Fermi-Breit 哈密顿量和那些仅包含矢量类及标量类成分的

中心势给出.那时就有可能去限制$^1P_1$态和P态三重态($S=1$)加权平均的质量之差.采用这个策略,并且利用一些实验值和允许某些相对论修正,对$c\bar{c}$系统,获得的约束为

$$3\,536 \pm 12 < M(^1P_1) < 3\,559 \pm 12\ (\text{MeV}),$$

类似地,对$b\bar{b}$系统,获得的约束为

$$9\,900.3 \pm 2.8 < M(^1P_1) < 9\,908.9 \pm 2.8\ (\text{MeV}).$$

$c\bar{c}$的$^1P_1$态的实验结果是3 526.1 MeV,它与这些约束范围和来自ISR的早期迹象是相容的.

仍有待被发现的其他狭窄的态是$c\bar{c}$系统的$1D\ 2^{--}$和$1D\ 2^{-+}$,以及$b\bar{b}$系统的两组完整的D态,对它们,Kwong和Rosner[55]基于"反散射"方法("inverse scattering" method)给出了预言,如图1.9所示.

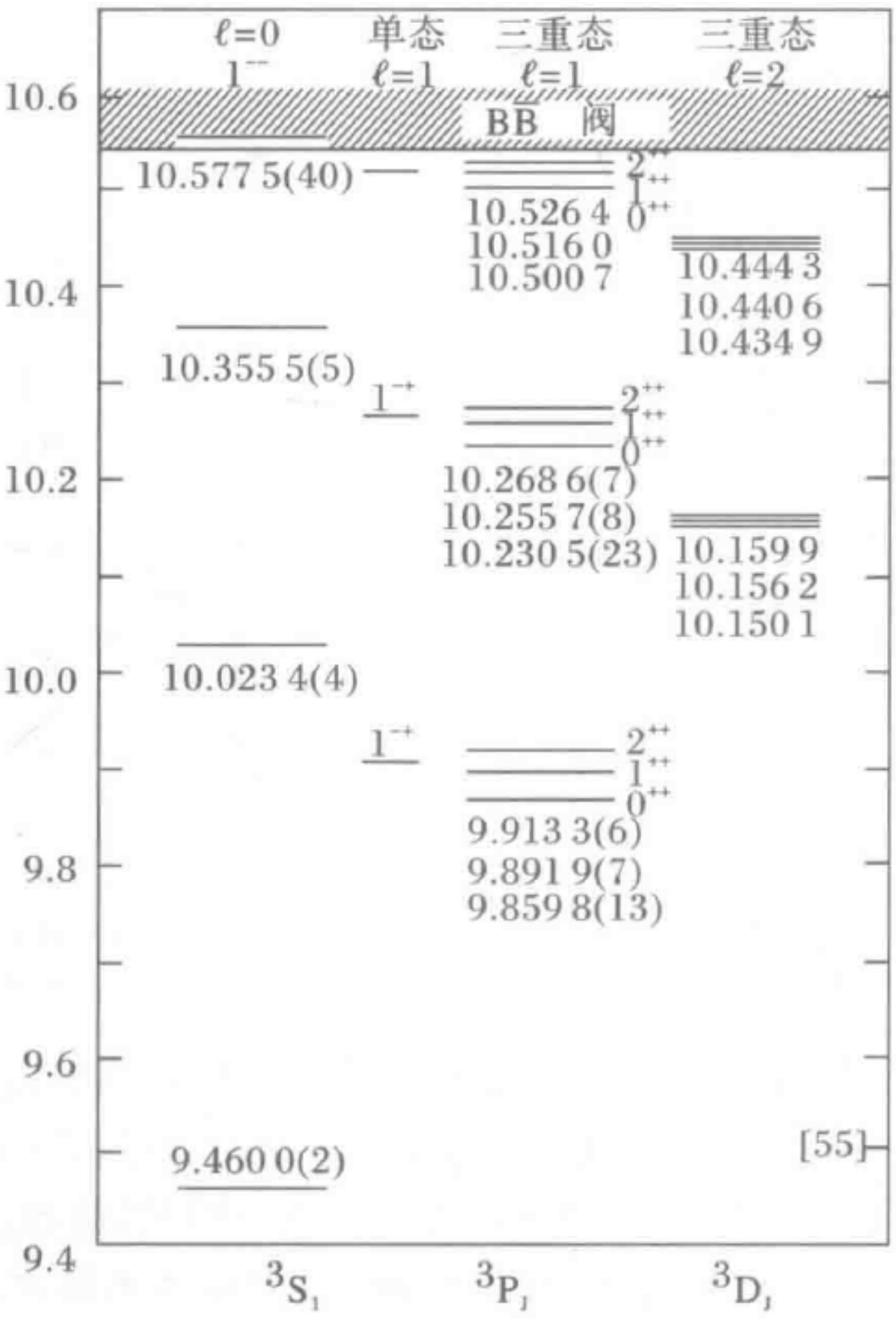

图1.9　根据Kwong和Rosner[55]给出的$b\bar{b}$的能级图

在1991～1992年期间,对相对论效应也进行了研究,也就是说,我们考虑了满足Klein-Gordon方程和Dirac方程的粒子.在Klein-Gordon方程中,如果V是吸引的,并且$\Delta V \leqslant 0$,我们有[56]

$$E(n+1,\ell) < E(n,\ell+1), \tag{1.23}$$

这就是说，这些能级被这样排序了，它们就像带有一个受拉普拉斯算符作用为负的位势的薛定谔方程的能级次序一样.

对于 $\Delta V > 0$，则有一个逆定理，但是它更为深奥：我们不得不用另外一个“有效”的角动量替换 ℓ.

关于 Dirac 方程，本书作者之一（H. G.）已经在文献[57] 中求得了一个微扰结果.结果是，对于围绕库仑势的扰动，如果对于所有的 $r > 0, \Delta V \gtrless 0$，则带有相同 J 和不同 ℓ 的能级是这样的：

$$E(N,J,\ell = J - 1/2) \gtrless E(N,J,\ell = J + 1/2). \tag{1.24}$$

在式(1.24) 中的主量子数用 N 表示.这意味着，如果我们接受即使对于更大的 V，这个结果仍然有效，则能级顺序不仅在薛定谔方程的情况下，而且在 Dirac 方程的情况下也成立.这也意味着，Lamb 位移效应相当于库仑势的源被一个延展结构所取代.寻找这个结果的一个非微扰版本仍然是一个挑战.

另一方面，我们和 Stubbe 一起比较具有相同的 N、相同的**轨道**角动量以及不同的总角动量[58] 的 Dirac 方程的能级，我们发现，如果 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r > 0$，则

$$E\left(N,J = \ell + \frac{1}{2},\ell\right) > E\left(N,J = \ell - \frac{1}{2},\ell\right). \tag{1.25}$$

假如我们把这两个结果结合起来，我们看到，如果 $\Delta V < 0$ 且 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r > 0$，则库仑多重态被完全排序.正如半相对论近似所建议的那样，第二个条件可能确实是多余的.那时，在这个多重态中，对于固定的 J 增加 L，以及对于固定的 L 增加 J，能量都会增高.因此，我们有，例如，对于 $N = 3$

$$3\mathrm{S}_{1/2} < 3\mathrm{P}_{1/2} < 3\mathrm{P}_{3/2} < 3\mathrm{D}_{3/2} < 3\mathrm{D}_{5/2}. \tag{1.26}$$

未来关于单粒子 Dirac 方程取得进展看来是可能的.

也有许多关于三体甚至 N 体系统的相对近期的严格结果，我们愿提及一些.我们已经在唯象层面介绍过把一个重子内部和介子内部的那些两体势联结在一起的“规则”，$V_{\infty} = \frac{1}{2} V_{\infty\bar{\infty}}$.如果我们认真地接受这个规则，根据两体束缚态我们就可以计算出三体哈密顿量的下限.这实际上是关于很久以前发明的一个普遍技术的一种特殊情况，它能被成功地用于任何带有吸引力的 N 粒子系统，包括在引力相互作用下的三个夸克以及 N 个粒子.我们将描述导致非常准确下限（也就是非常接近于变分法的上限）的这种技术的改进.例如，N 个受引力作用的玻色子的能量，对于任意 N，以小于 7% 的精度被获知.所有这些结果都是在非相对论的层面上得到的，但是也可能把半相对论和非相对论的处理联系起来，并且以一种简单的方式证明 Chandrasekhar 塌缩（Collapse）的不可避免性.我们也可以去探索关于一个粒子质量倒数的凹形性质，来得到含有一个重夸克的那些重子和介子质量的上限.

我们希望我们的贡献能使读者认识到薛定谔方程的广泛应用，这些应用中只

有很小的部分被揭示出来. 对于粒子物理，薛定谔方程将是否继续有用，则是一个悬而未决的问题. 在 1977 年之前，除了描写核子-核子相互作用外，薛定谔方程在粒子物理世界还被认为是无用的，但是，正如我们所看到的，情况已经发生了改变. 情况或许会再次改变，下一次或许是沿相反的方向变. 然而，在重夸克系统的发现刺激下所得到的这些结果将保持下去，并且可能被用于其他领域，例如原子物理，或者甚至凝聚态物理.

在引言的最后，让我们做一些关于文献的评论. 在 20 世纪 70 年代中期，这个主题开始被考察，并且稍后有两篇综述出现了[59-60]. 从那时起，大量新资料，既有理论的也有实验的，开始问世. 它们被部分地总结在了由本书作者之一（A. M.）所写的综述[61-63] 以及文献[64] 中.

第2章　两体问题

2.1　一般性质

在本节的一开始，我们将通过一个位势来讨论相互作用的许多一般性质. 目的是以简单的术语解释几个事实而不用牵涉过多的数学. 首先，我们一劳永逸地引用一个两粒子系统的薛定谔方程. 如果位势仅仅依赖于相对位置，则质心系薛定谔方程变为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x). \tag{2.1}$$

我们将主要处理三维中心势. 只有2.7节和第3章中的一些结果对于非中心位势以及任何维度成立. 位势的径向对称性使我们可以通过取 $\psi(r) = Y_{\ell m}(\Omega)u_{n,\ell}(r)/r$ 做更进一步的简化. 这里，$Y_{\ell m}$ 表示第 ℓ, m 阶的球谐函数. 对于约化径向波函数 $u_{n,\ell}(r)$，方程式(2.1) 变成

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell(\ell+1)h^2}{2mr^2} + V(r)\right)u_{n,\ell}(r) = E(n,\ell)u_{n,\ell}(r), \tag{2.2}$$

这里的 m 表示两粒子系统的约化质量. 我们设 $\hbar = 2m = 1$ 以简化描述. 显然，为了使问题明确，我们不得不假定几个事实. 出于稳定性的原因，我们希望出现在薛定谔方程里的哈密顿量有下界. 因此，我们主要处理一些规则位势，它们在原点不是太奇异，而且它们在无限远处要么减小为零要么是禁闭的. 我们还将要求 $|V|^{3/2}$ 在三维下是局部可积的. 这保证了哈密顿量有下界. 对于球对称情形，我们倾向于 $\int_0^R \mathrm{d}r r\,|V(r)|$ 的有限性. 对于非禁闭势，$R = \infty$ 情况下最后的这个条件意味着束缚态数目的有限性. 如果在原点 $V(r)$ 的奇异性比 $-1/4r^2$ 弱一些，也能得到规则位势. 如果 $\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$，则 $u_{n,\ell}(r)$ 在原点附近与 $r^{\ell+1}$ 成正比. $u_{n,\ell}(r)$ 行为的一个直观图像能够很容易得到. 为简单起见，我们取 $\ell = 0$，$\hbar = 2m = 1$，用 u 来表示 $u_{n,\ell}(r)$，E 来表示 $E(n,\ell)$，并且假定 $V(r)$ 单调递增以及 $V(0)$ 有限. 这时方程式(2.2) 就变为了 $u'' = (V - E)u$. 我们从小 r 时的 $u(r) = r$ 开始积分到无穷，同时

变化参数 E. 首先，我们能够取 $E < V(0) \leqslant V(r)$. 于是 u'' 总取正值，因而 u 是凸型的，且趋于无穷. 归一化条件 $\int_0^\infty \mathrm{d}r\ |u(r)|^2 = 1$ 永远无法得到. 增大 E 使得 $V(0) < E = V(r_{\mathrm{cl}})$，其中 r_{cl} 表示经典的转折点，这时产生两个行为不同的区间. 对于 $0 < r < r_{\mathrm{cl}}$，u 是凹型的；对于 $r_{\mathrm{cl}} < r < \infty$，它是凸型的. 于是可以理解，在一个足够大的 E（基态能量）值下，当 $r \to \infty$ 时 $u(r)$ 将趋于零，而且变得可归一化. 此外，没有任何节点存在. 再进一步增加 E，首先会获得一个趋于 $-\infty$ 的微分方程的解，它具有一个零点——在 $(0, \infty)$ 区间内——因为若它为零的话，$u(r)$ 的曲率会改变. 再增加 E 将产生一个对应于径向激发态（如果它存在）的能量本征值，它具有一个零点，等等. 如此简单的凸性条件和节点结构一起曾经被本书作者之一（H. G.）采用[65]，以便得到确定束缚态能量位置的一个系统化数值程序. 我们可明确指出，若 $V(\infty) = 0$，则我们求得 $E > 0$ 情形下的散射解和 $E = 0$ 情形下可能的共振行为. 根据上述简单论证（随后我们会解析地来说明），我们可以用 $(0, \infty)$ 区间内 u 所具有的节点数 n 和角动量量子数 ℓ 来标记 u 和 E.

我们已假定了 $V(r)$ 是“光滑的”，从而式(2.2) 定义了一个自伴算符，该算符仅具有一个实的谱. 本书大部分篇幅中，$V(r)$ 将被取作禁闭势，当 $r \to \infty$ 时它趋于无穷，因而只有离散谱. 在有些地方，我们将处理一个趋于零的位势. 在那种情况下，$V(r)$ 的振荡甚至可能会产生一个 E 为正的束缚态. 第一个非常简单的例子归功于 Von Neumann：从束缚态波函数的一个候选函数

$$u(r) = \frac{\sin kr}{C + \int_0^r \mathrm{d}r' (\sin kr)^2} \equiv \frac{\sin kr}{D} \underset{r \to \infty}{\simeq} \frac{2\sin kr}{r} \tag{2.3}$$

开始，它在半直线 $[0, \infty)$ 上是平方可积的. 对式(2.3) 求两次微商并且除以 $u(r)$，我们得到

$$\frac{u''}{u} = -k^2 + \left(\frac{2(\sin kr)^4}{D^2} - \frac{4k \cos kr \sin kr}{D} \right), \tag{2.4}$$

这表明 u 对应于这样一个位势的一个正能量 $E = k^2$ 的束缚态，该位势在无穷远处振荡：

$$V(r) \simeq -\frac{4k \sin 2kr}{r}. \tag{2.5}$$

这种病态情况很容易被排除. 如果 V 在超过某一半径之外，即 $r > r_0$ 的区域单调地趋于零，则可给出排除这种病态情况的一个充分条件. 其他充分条件是 $\int_R^\infty \mathrm{d}r\ |V'(r)| < \infty$ 或者 $\int_R^\infty \mathrm{d}r\ |V(r)| < \infty$. 在所有这三种情况下，一切具有正能量的态都对应于散射态.

然而，我们需要指出的是，存在一些“好”的位势，对于它们，哈密顿量是自伴的，谱有下界且束缚态具有负能量，正如 Chadan 所发现的[66]，这些束缚态在原点或无穷远处剧烈振荡. 正是这个位势的**原始形式**，必须具有规则的性质.

有几个有助于定位束缚态的简单原则.例如,人们求得作为下确界的哈密顿量 H 的基态能量 E_1:

$$E_1 = \inf_{\psi \in \mathcal{H}} \frac{\langle \psi | H\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \tag{2.6}$$

其中,$\mathcal{H}$ 表示 L^2 函数 $\psi \neq 0$ 的希尔伯特空间,而 $\langle \cdot | \cdot \rangle$ 表示标积.由式(2.6)可得,任何试探波函数 φ 都将给出 E_1 的一个上限,$E_1 \leqslant \langle \varphi | H\varphi \rangle / \langle \varphi | \varphi \rangle$.此外,我们从式(2.6)可以推断,加入一个正的位势(这里是指所有的期待值 $\langle \chi | V\chi \rangle$ 都是正的)只能增加能量.为了获得第 n 个激发态,我们必须首先在线性独立的试探函数所张成的一个 n 维空间 $\mathcal{H}_n$ 内取最大本征值,来得到 E_n 的一个上限[67]:

$$E_n = \inf_{\mathcal{H}_n} \max_{\psi \in \mathcal{H}_n} \langle \psi | H\psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle. \tag{2.7}$$

由此可见,加入一个正位势将增大所有的本征值:我们用 $\phi_1, \cdots, \phi_n$ 来表示 $\overline{H} = H + V$ 具有本征值 $\overline{E}_n$ 的前 n 个本征函数,用 $\mathcal{D}_n$ 来表示由 $\{\phi_1, \cdots, \phi_n\}$ 张成的线性空间.于是

$$E_n \leqslant \max_{\psi \in \mathcal{D}_n} \langle \psi | H\psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle \leqslant \max_{\psi \in \mathcal{D}_n} \langle \psi | \overline{H}\psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle = \overline{E}_n. \tag{2.8}$$

由于 $\langle \psi | (1/r^2)\psi \rangle \geqslant 0$,我们推断出,例如,"Regge 轨迹"的单调性:对给定的节点数,所有的能量都是角动量 ℓ 的递增函数.

其他的一些结果是:

设 $\phi_1, \cdots, \phi_N$ 为 N 个线性独立的、正交的试探函数.矩阵 $\langle \phi_i | H\phi_j \rangle$ 的对角化给出了本征值 $\epsilon_1, \cdots, \epsilon_N$,它们大于真实的本征值 E_i:对于 $i = 1, \cdots, N$,$E_i \leqslant \epsilon_i$.由此给出

$$\sum_{i=1}^{N} E_i \leqslant \sum_{i=1}^{N} \langle \phi_i | H\phi_i \rangle. \tag{2.9}$$

对于前 N 个本征值之和,式(2.7)还意味着,如果 $\mathcal{H}_n$ 是由服从 $\langle \chi_i, \chi_j \rangle = \delta_{ij}$ 的 $\chi_1, \cdots, \chi_N$ 所张成的,则

$$\sum_{i=1}^{N} E_i = \inf_{\mathcal{H}_n} \sum_{i=1}^{N} E_i \langle \chi_i | H\chi_i \rangle. \tag{2.10}$$

一族线性函数的下确界是一个凹函数.这意味着,由式(2.6),E_1 将是线性地出现在 H 中所有参数的一个凹函数.根据先前的评注,这个结果对 $\sum_{i=1}^{N} E_i$ 同样成立.

很明显,如果加入一个正的相互作用,则小于某一能量的束缚态数目减少,或者至多保持不变.作为一个简单推论,我们提醒一下,任何禁闭势 V 都具有无穷多个束缚态:你只要取一个无限深方势阱 V_w,使得 $V_w \geqslant V$,来比较这两个适当的薛定谔算符即可.

变分原理的一个应用告诉我们,使 $\int \mathrm{d}x V(x)$ 为负的一个位势的任何一维薛定

谓问题至少具有一个束缚态.类似的论证也适用于二维问题.我们将在2.7节给出详细的标度论证,那时我们再讨论定位束缚态的可能性.这样的一些论证不适用于式(2.1)的半直线问题,因为波函数 $u(r)$ 必须服从在原点的边界条件 $u(0)=0$.通过对 $r=x\geqslant 0$ 取 $\overline{V}(x)=V(r)$,以及对 $x=-r<0$ 取 $\overline{V}(x)=V(r)$,从而获得一个对称的位势 $\overline{V}(x)=\overline{V}(-x)$,我们确实能从一个定义在半直线 $r\in[0,\infty)$ 上的薛定谔方程过渡到一个定义在 $\mathbf{R}$ 上的问题.对于 $p^2+V(x)$ 的每个第二本征值,在原点 $x=0$ 处波函数为零,因而半直线问题的本征值也都是真实的.

对于作为一个哈密顿量 $H(\lambda)$ 中任何参数的函数的能级变化,容易得到所谓的 Feynman-Hellmann 定理:

$$H(\lambda)\psi_\lambda=E\psi_\lambda\Rightarrow\frac{\partial E}{\partial\lambda}=\left\langle\psi_\lambda\left|\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right|\psi_\lambda\right\rangle. \tag{2.11}$$

$E=\langle\psi_\lambda|H(\lambda)\psi_\lambda\rangle$ 对 λ 求导给出了三个表达式之和;但是,因为 ψ_λ 被假定是归一的,所以 $\langle\delta\psi_\lambda|H(\lambda)\psi_\lambda\rangle$ 和 $\langle\psi_\lambda|H(\lambda)\delta\psi_\lambda\rangle$ 两者都为零.

一个著名的结果 —— 位力定理,将动能 $T=-\mathrm{d}^2/\mathrm{d}r^2$ 的期待值和"位力" $r\mathrm{d}V(r)/\mathrm{d}r$ 联系起来:

$$(T+V(r))\psi=E\psi\Rightarrow 2\langle\psi|T\psi\rangle=\left\langle\psi\left|r\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\psi\right.\right\rangle. \tag{2.12}$$

此外

$$\delta=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r\right)$$

计数了标度维数:$-\mathrm{i}[\delta,T]=2T$ 和 $-\mathrm{i}[\delta,V]=rV'(r)$.把对易子 $[\delta,H]$ 放在 H 的一个本征态之间,就得到方程式(2.12).事实上,容易看出方程式(2.12)对任意角动量都成立.

因此由幂指数型位势 $V=\lambda r^\alpha$ 给出 $2\langle T\rangle=\alpha\langle V\rangle$,其中 $\langle\bullet\rangle\equiv\langle\psi|\bullet\psi\rangle$.在这种情况下,我们可将式(2.11)

$$\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda}=\langle V\rangle$$

和式(2.12)相结合而求得

$$E=\left(\frac{\alpha}{2}+1\right)\lambda\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\lambda},$$

只要 $\alpha>-2$,则该式有解 $E(\lambda)=\lambda^{2/(\alpha+2)}E(1)$.一个诸如 $-\lambda/r^2$ 的位势,在 $0<\lambda<1/4$ 情形下是"标度"不变的,但没有任何束缚态.根据式(2.12),一个对数位势 $V(r)=\lambda\ln(r/r_0)$ 给出了 $2\cdot\langle\psi|T\psi\rangle=\lambda$.

接下来我们还将考虑具有不同夸克质量的系统.因此,能量随质量的变化是令人感兴趣的.如果

$$H(m)=-\frac{1}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r),$$

则由方程式(2.11)得出

$$m\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}m} = -\langle T\rangle.$$

对于幂指数型位势

$$E = -\frac{\alpha+2}{\alpha}m\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}m},$$

其积分后给出 $E(m) = m^{-\alpha/(\alpha+2)}E(1)$.

在 $V = \lambda\ln r = \lambda\lim(r^\epsilon - 1)/\epsilon$ 的特殊情况下,我们得到 $m(\mathrm{d}E/\mathrm{d}m) = -\lambda$,从而 $\mathrm{d}E/\mathrm{d}m$ 和所考虑的态的量子数**无关**.我们可引用幂指数型位势的物理量标度行为作为 m,$|\lambda|$ 和 $\hbar$ 的函数.结合我们之前的断言,并且注意到 m 和 $\hbar$ 以商 $\hbar^2/m$ 的形式进入到式(2.2),可推出:

$$E(\lambda,m,\hbar) = |\lambda|^{\frac{2}{\alpha+2}}\left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha+2}}E(1,1,1). \tag{2.13}$$

熟知的情况是库仑势,其能级标度正比于 $m\lambda^2$;还有谐振子势,对它有 $E\sim(\lambda/m)^{1/2}$.对于奇异位势,$\alpha<0$,方程式(2.13)意味着能级间距随质量增加而增加,而对于规则位势,$\alpha>0$,能级间距作为 m 的函数而减小.对于对数位势,标度化(scaling)仅仅使位势移动一个常数,能量差因此不依赖于质量.如果我们比较式(2.13)和式(2.2)将认识到,长度 L 被如此标度,即

$$L\sim\left(\frac{\hbar^2}{m|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\alpha}}. \tag{2.14}$$

轻子过程的衰变概率正比于零点波函数的平方 $|\psi(0)|^2$.通过注意 $|\psi(0)|^2$ 有着体积倒数的量纲,即可得到其标度行为.$|\psi(\boldsymbol{x})|^2$ 对 $\mathbf{R}^3$ 的总积分得到一个数.因此

$$|\psi(0)|^2\sim\left(\frac{m|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2+\alpha}}. \tag{2.15}$$

许多有用的求和规则和恒等式通常都可以通过在薛定谔方程两边乘以巧妙选取的函数,然后求分部积分等等得到.我们已经学会源自 Bessis[68] 的一个系统的(并且完备的)步骤:我们把式(2.2)简写为 $u'' = Wu$,并且定义密度 $\rho(r) = u^2(r)$.求微商给出 $\rho' = 2uu'$,$\rho'' = 2u^2W + 2u'^2$.三阶导数可由 ρ 和 ρ' 表示:$\rho''' - 4W\rho' = 0$.我们对最后一个方程乘以一个三阶可微函数 $F(r)$ 并且求分部积分.为了简化,我们假定没有任何边界项出现,因而求得了最普遍的求和规则

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\rho(r)(-F'''(r) + 4F'W + 2FW') = 0. \tag{2.16}$$

式(2.16)的各种特别情况将在随后用到(一个特别的情况——位力定理已经被提到过).

还有一些求和规则涉及两种不同的态,例如,我们可以考虑由两个角动量波函数叠加的一个波函数

$$\phi = \psi_\ell \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\ell t} + \psi_{\ell+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{\ell+1}t} \tag{2.17}$$

然后将其插入到表达式

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\phi|\boldsymbol{r}|\phi\rangle = -\langle\phi|\nabla V|\phi\rangle, \tag{2.18}$$

这是埃伦费斯特定理的特殊情况.我们由此获得了下列类型的一个求和规则

$$\frac{1}{2}(E_{\ell+1}-E_\ell)^2\langle\psi_\ell|r\,\psi_{\ell+1}\rangle = \left\langle\psi_\ell\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\psi_{\ell+1}\right.\right\rangle, \tag{2.19}$$

这随后会被用于建立偶极矩之间的关系(记得我们的约定:$m = 1/2$).事实上,这些"混合"的求和规则能通过一种系统的方式被找到.如果 u 和 v 满足方程

$$u'' = Uu,$$
$$v'' = Vv,$$

我们能够通过关于 $uv = \rho$ 的相继微分并且使用两个方程的朗斯基行列式(Wronskian),得到

$$\rho''' = ((U+V)\rho)' + (U+V)\rho' + (U-V)\int_0^r (V-U)\rho(r')\mathrm{d}r'.$$

然后乘以一个任意函数 F 并求分部积分,得到

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\rho(F''' + 2F'(U+V) + F(U+V)' + (V-U)\int_r^\infty (V-U)F(r')\mathrm{d}r') = 0, \tag{2.20}$$

其中忽略了一些可能积出的项.

选取 $F = 1$,并且取

$$U = W - E_\ell + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

和

$$V = W - E_{\ell+1} + \frac{(\ell+1)(\ell+2)}{r^2},$$

我们就回到了求和规则式(2.19).

2.2　能级的顺序

正如我们已经说过的,位势可以用于描写夸克偶素系统.Bèg 曾提出过的一个问题是,什么导致了最低的激发:是径向的还是轨道的?很明显,我们所得结果能够用于由薛定谔方程描写的任何物理领域.

径向薛定谔方程能够写为

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) - E(n,\ell)\right)u_{n,\ell}(r) = 0. \tag{2.21}$$

为了简化，我们将仅仅处理“光滑”位势，它在原点不及 $-1/(4r^2)$ 奇异，从而有一个基态存在. 能量的本征值 $E(n,\ell)$ 依赖于两个量子数，约化的径向波函数 $u_{n,\ell}(r)$ 的节点数 n 以及轨道角动量 ℓ.

对于一个完全一般的、允许有束缚态的位势，有两个性质是众所周知的. 第一，能量随着节点数目增加，$E(n+1,\ell) > E(n,\ell)$. 这源于二阶微分方程的标准 Sturm-Liouville 理论. 第二，能量是角动量的递增函数，$E(n,\ell+1) > E(n,\ell)$. 这是因为离心势是排斥的，并且离心项前面的系数随 ℓ 增加. 具有相同 n 和不同 ℓ 的能级集合构成了自 1959 年以来一直被称作的“Regge 轨迹”. Regge 曾经指出，方程式(2.21)中的 ℓ 不需要是整数或者甚至不需要是实数. 对于实的 $\ell > -1/2$，且 $\delta > 0$，我们仍然有 $E(n,\ell+\delta) > E(n,\ell)$.

然而，我们感兴趣的是一个更微妙的问题. 我们想比较 (n,ℓ) 和 (n',ℓ') 对的能级. 为获得一个初步的深入了解，我们援引有例外简并的一些著名特殊情况.

库仑势

如果 $V(r) = -\alpha/r$，能量本征值仅依赖于主量子数 $N = n + \ell + 1$，并且我们得到如图 2.1 所示的能级结构. 这里我们有 $E(n+1,\ell) = E(n,\ell+1)$.

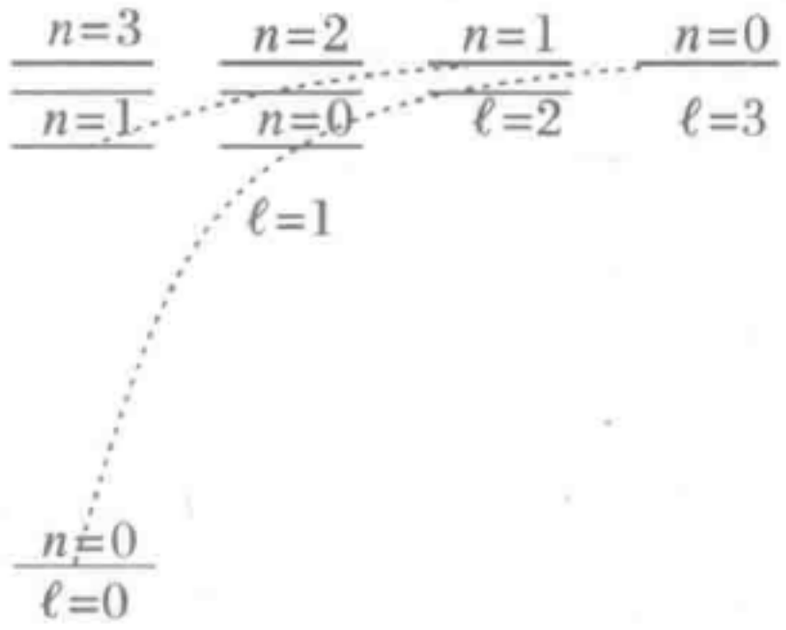

图 2.1 库仑-薛定谔算符的能级结构

谐振子势

如果 $V(r) = \omega^2 r^2/2$，能量本征值仅仅依赖于组合 $n + \ell/2$. 你必须增加两个单位的角动量方可到达下一个简并能级：$E(n+1,\ell) = E(n,\ell+2)$. 能级结构展示在图 2.2 中. Regge 轨迹用点线标示出来. 直线表示谐振子，凹线表示库仑势的轨迹.

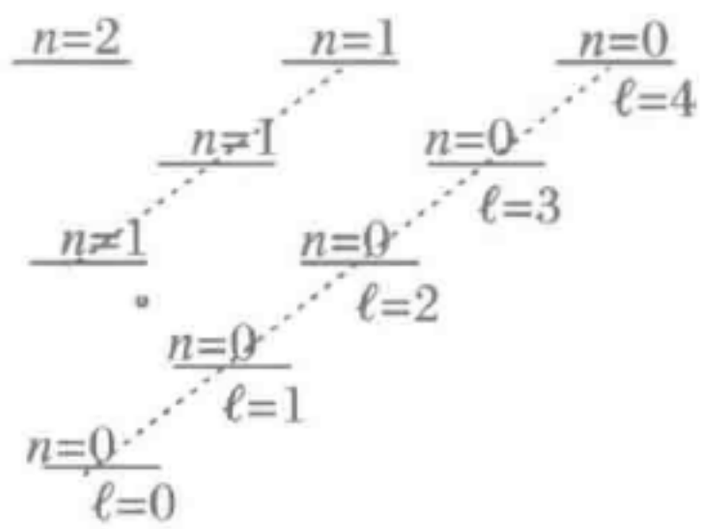

图 2.2 谐振子-薛定谔算符的能级结构

接下来我们将陈述并证明我们关于能级顺序的主要结果之一，它们在式(1.14)中也提到过.通常，我们对位势强加一些条件.我们将能级图与先前给出的例子作比较.

定理　假定位势的拉普拉斯算符作用(Laplacian)(离开 $r=0$ 点)具有确定的符号*：

$$\Delta V(r)=\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\gtrless 0,\quad \forall\, r>0.$$

则能级将按顺序排列成

$$E(n+1,\ell)\gtrless E(n,\ell+1). \tag{2.22}$$

评注　自然，在库仑势的情况下，原点外 $\Delta V=0$，这意味着结果处在其最优形式.

一个稍微精致的改进是，当 $r\neq 0$ 时 $\Delta V\leqslant 0$ 或者 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r\leqslant 0$，就已经足以保证 $E(n+1,\ell)\leqslant E(n,\ell+1)$.定理式(2.22)的许多变体将在随后提到.

历史上，我们自1977年始致力于能级顺序问题的研究.起初，不得不强加一些更强的条件，而得到一些弱得多的结果，而且仅对 $n=0$ 和 $n=1$ 有效.接着，Feldman，Fulton 和 Devoto[69] 研究了满足 $n\gg l\gg 1$ 的 WKB 极限.他们发现相关的量是 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)r^2(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$，它与拉普拉斯算符成正比.由于 WKB 近似与精确结果之间的差别很难控制，我们接下来考虑围绕库仑(及谐振子)势：$V(r)=-(\alpha/r)+\lambda v(r)$ 的微扰情况.为了比较 $\lambda\to 0$ 极限下的 $E(n+1,\ell)$ 和 $E(n,\ell+1)$，我们需要找到量

$$\delta=\int_0^\infty \mathrm{d}r v(r)(u_{n+1,\ell}^2(r)-u_{n,\ell+1}^2(r)) \tag{2.23}$$

的符号，它给出了两个能量移动的差.方程式(2.23)中的那些 u 都是未扰动的库仑波函数，即拉盖尔多项式乘上指数函数.若 n 很大，则积分剧烈地振荡.然而，$u_{n+1,\ell}$ 和 $u_{n,\ell+1}$ 可通过运用一个升算符或者一个降算符而彼此相互得到，而这些算符的存在与库仑问题的 O_4 对称性和 Runge-Lentz 矢量相关联.它们是如下形式的简单一阶微分算符：

$$u_{n,\ell+1}=\text{常数}\ A_+u_{n+1,\ell},\quad u_{n+1,\ell}=\text{常数}\ A_-u_{n,\ell+1},$$
$$A_\pm=\pm\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{\ell+1}{r}+\frac{1}{2(\ell+1)}. \tag{2.24}$$

所有需要做的是根据式(2.24)去替换 $u_{n+1,\ell}$，然后分部积分两次.用这种方法，方程式(2.23)里的 δ 表现为 v 的拉普拉斯算符作用的积分乘上一个正的量.因此，位势的拉普拉斯算符作用的符号决定了在一级微扰论中能级劈裂的方式[70].

接下来的问题是获取一个非微扰结果，它已在文献[71]中得到了解决.其想法

---

* 这里作者用了一种简略术语 Laplacian，原意是指拉普拉斯算符作用在位势之上的结果.因此，我们的译文也相应地作了简化.下同.——译者

是要推广升算符的概念. 如果 $u_{n,\ell}$ 是方程式(2.21) 的一个解,并且定义

$$\tilde{u} = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{u'_{0,\ell}}{u_{0,\ell}}\right)u_{n,\ell} = \frac{u_{0,\ell}u'_{n,\ell} - u'_{0,\ell}u_{n,\ell}}{u_{0,\ell}},$$

其中 $u_{0,\ell}$ 表示 $n = 0$、角动量为 ℓ 的基态波函数,则 $\tilde{u}$ 是如下方程的一个解:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(-\frac{u'_{0,\ell}}{u_{0,\ell}}\right) + V - E\right)\tilde{u} = 0. \tag{2.25}$$

我们重新发明的这种变换,其实已经为人所知很长一段时间了. 它出现在 1955 年的 Marchenko 和 Crum 的工作中,但是事实上 Darboux 在 1882 年就曾研究了这个变换. 该变换与超对称量子力学的关系在附录 A 中给出了解释.

如果 V 在原点是规则的,则 u 的行为像 $r^{\ell+1}$,并且由定义我们发现 $\tilde{u}$ 的行为像 $r^{\ell+2}$. 此外,让我们来证明 $\tilde{u}$ 比 u 少一个节点:在 u 的两个相继零点之间,$\tilde{u}$ 至少有一个零点,因为 u',从而 $\tilde{u}$ 在零点处有相反的符号. 我们可以把对于 $u_0 = u_{0,\ell}$ 和能量 E_0 与具有能量 E 的 $u = u_{n,\ell}$ 的式(2.21) 组合在一起,求积分之后得到

$$u_0(r_2)\tilde{u}(r_2) - u_0(r_1)\tilde{u}(r_1) = (E - E_0)\int_{r_1}^{r_2}\mathrm{d}r u_0(r)u_{n,\ell}(r). \tag{2.26}$$

从式(2.26) 我们看到,在 $\tilde{u}$ 的两个相继零点之间存在 $u_{n,\ell}$ 的一个零点,只要记住 u_0 具有不变的符号. 通过取 $r_1 = 0$ 我们发现,比方说,只要 $u_{n,\ell}$ 为正,而且如果 u_0 和 $u_{n,\ell}$ 行为像 $cr^{\ell+1}$,则 $\tilde{u}$ 为正并且在原点其行为像 $r^{\ell+2}$. 因此 $\tilde{u}$ 具有对应于角动量 $\ell+1$ 的典型行为. 通过取 $r_2 \to \infty$ 我们发现越过 $u_{n,\ell}$ 的最后一个零点,$\tilde{u}$ 具有一个与 $u_{n,\ell}$ 相反的恒定的符号. 因此 $\tilde{u}$ 比 u 少一个节点. 所以 $\tilde{u}$ 和 $u_{n,\ell}$ 对应于相同的主量子数,$N = n + \ell + 1$.

我们因此能够把 $\tilde{u}$ 解释为具有角动量为 $\ell+1$ 和 $n-1$ 个节点的波函数,它感受到(feel) 一个位势

$$\tilde{V} = V + 2\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(-\frac{u'_{0,\ell}}{u_{0,\ell}}\right) - \frac{\ell+1}{r^2}\right). \tag{2.27}$$

接下来的是一个至关紧要的引理,它允许我们告诉你在哪些条件下 $\tilde{V} \geqslant V$ 或者 $\tilde{V} \leqslant V$.

引理 如果

$$\Delta V(r) \gtrless 0, \quad \forall\, r > 0$$

$$\text{则}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(-\frac{u'_{0,\ell}}{u_{0,\ell}}\right) - \frac{\ell+1}{r^2} \gtrless 0, \tag{2.28}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\log\left(\frac{u_{0,\ell}}{r^{\ell+1}}\right) \gtrless 0.$$

事实上,对于第二种情况($\tilde{V} \leqslant V$),满足对所有的 $r > 0$,有 $\Delta V \leqslant 0$ 或者

$\mathrm{d}V/\mathrm{d}r \leqslant 0$ 就足以推论出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(-\frac{u'_{0,\ell}}{u_{0,\ell}}\right)-\frac{\ell+1}{r^2}\leqslant 0.$$

对于这种精致化的改进，我们建议读者参阅原始文献[71].

注意　显然，对于库仑情形我们得到一些等式. 对该引理的第一个证明，我们使用了库仑势 V_c 作为一个这样的对照位势，使得 $E - V(R) = E_c - V_c(R)$ 以及 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r(R) = \mathrm{d}V_c/\mathrm{d}r(R)$，其中 E_c 是库仑问题的基态能量. 于是如果 V 对于 $1/r$，例如，是凸的，则 $E - V$ 和 $E_c - V_c$ 既不会在区间 $(0,R)$ 内交叉也不会在区间 (R,∞) 内交叉. 这允许写下一个关于 u 和 u_c 的朗斯基关系，它给出了所要的结果.

新的证明甚至更简单. 证明步骤受了 Ashbaugh 和 Benguria 结果[72] 的启发. 我们返回到方程式(2.25)，并且把 $\tilde{u}$ 看作一个具有 $n-1$ 个节点和角动量 $\ell+1$ 的约化波函数，它满足具有位势 $V + \delta V$ 的一个薛定谔方程，其中

$$\frac{1}{2}\delta V = -\left(\frac{u'}{u}\right)' - \frac{\ell+1}{r^2}. \tag{2.29}$$

而且用 u 代表了 $u_{0,\ell}$.

我们试图证明，如果 $rV(r)$ 是凸的(或者凹的)，则在任何地方 δV 为正(或者为负). 文献[72] 指出，当位势的拉普拉斯算符作用为正(或为负) 时，这个引理的结果等价于说 $v = \ln(u/r^{\ell+1})$ 是凸的(或者凹的). 依照文献[73]，我们直接采用 $\delta V = -2v''$ 入手，并且从薛定谔方程得到

$$u^2\frac{\delta V}{2} = (E-V)u^2 + u'^2 - \frac{(\ell+1)^2}{r^2}u^2,$$

从而在两次微分之后得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{r^2}{u^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u^2\delta V = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)+2(\ell+1)\delta V, \tag{2.30}$$

其中我们识别出式(2.30) 右边的三维拉普拉斯算符. 注意到至少对于满足 $\lim\limits_{r\to 0} r^2V(r) = 0$ 的位势，有

$$\lim_{r\to 0} u^2\delta V = 0, \tag{2.31}$$

因为那时 $u \sim r^{\ell+1}$. 另外，我们有 $\lim\limits_{r\to\infty} u^2\delta V = 0$，这是因为超过某一 r 值，具有一个确定的拉普拉斯算符作用的位势一定是单调的. 现在假定 $\Delta V \geqslant 0$. 从式(2.30) 我们得到一个关于 δV 的线性微分不等式. 假定在 0 和 ∞ 之间的某处 $\delta V(r)$ 为负. 这意味着 $u^2\delta V$ 至少具有一个最小的 $\bar{r}$，在那里 δV 为负. 在这个最小值处，式(2.30) 左边为正，而其右边为负. 这是一个矛盾. 所以 δV 处处为正.

现在取，例如 $\Delta V \geqslant 0$. 那时我们有 $\tilde{V} > V$. 然而，因为从 V 变为 $\tilde{V}$ 能量保持不变，我们有 $E_{n,\ell}(V) = E_{n-1,\ell+1}(\tilde{V})$. 因为能量在该位势中是单调的，我们得到 $E_{n-1,\ell+1}(\tilde{V}) \geqslant E_{n-1,\ell+1}(V)$，这就证明了该结果. 显然，同样的论证也适用于相反的

符号.因此,我们得到一大类位势,对于它们,在库仑情况下简并的能级以一种非常确定的方式劈裂.

应用 正如在引言中提到的,我们利用这个结果既分析了夸克偶素也分析了μ子系统.我们还把原子系统能级结构的一个用于确定周期表的新解释建立于能级如何劈裂[74]的基础之上.在夸克偶素系统和μ子系统中,角动量越高的态越低,因而适用于式(2.22)* 上的符号,但可以论证,在原子情形结论正好相反.在μ原子中,μ子如此接近原子核,以至于同电子的相互作用变得可以忽略不计,然而核子的有限延展变得更为重要了.μ子感受到具有如下位势的非负电荷分布,即

$$V(\boldsymbol{x}) = -e^2\int\frac{\mathrm{d}^3 y\rho(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}, \tag{2.32}$$

该位势是球对称的.因为ΔV为正,呈现出像夸克偶素那样的相同的能级顺序.

为讨论一些原子系统的谱,我们在 Hartree 近似下处理碱金属原子.它们可以被当作一个外层电子与一个球对称的电荷分布相互作用来处理.我们首先引用标准的论证,它也被 Condon 和 Shortley 提到过[75].例如,对于钠,论证表明3S态要低于3P态,因为对于3S态电子将更为接近核子.但是该论证并不令人信服.它或许也能适用于氢原子,但是我们知道在那里,这两个能级会变成简并的.我们将把我们的论证建立于不同的基础上,并考虑与一个电荷分布ρ相互作用的一个外部电子的薛定谔方程

$$-\Delta\psi(\boldsymbol{x}) - \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{x}|}\psi(\boldsymbol{x}) + e^2\int\mathrm{d}^3 y\,\frac{\rho(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\psi(\boldsymbol{y}) = E\psi(\boldsymbol{x}), \tag{2.33}$$

其中$\rho(\boldsymbol{y}) = \sum_i |\psi_i(\boldsymbol{y})|^2$应由非线性方程式(2.33)自洽地确定.但是因为$\rho$为正,故这个有效势的拉普拉斯算符作用为负.因此我们有$E(n+1,\ell) < E(n,\ell+1)$,并且推出顺序

$$\begin{aligned} &E(3\mathrm{S}) < E(3\mathrm{P}) < E(3\mathrm{D}),\\ &E(4\mathrm{S}) < E(4\mathrm{P}) < E(4\mathrm{D}) < E(4\mathrm{F}), \end{aligned} \tag{2.34}$$

它们已被具体的计算所验证[76].

在 Hartree 近似的范围内并忽略外层电子间的相互作用,我们甚至可以利用上述结果来证明原子中能级填充的正确性.而且式(2.34)的确是满足的.在氩中3P壳层被填满,接着出现的问题是关于下一个电子将处在3D态还是在4S态.碰巧,4S态赢了.这显然依赖于相互作用的精细的细节,与我们的不等式没有矛盾.因此,这似乎表明我们推导的能级顺序未发生任何破坏.

同 Baumgartner 一道,我们把这个允许排列能级顺序的方法也用到连续能谱.在那里我们发现了散射相移之间的关系[77].很明显,我们不得不小心地考虑波函数在无穷远处的渐进行为.因此,我们对照了相对于一个库仑势$-Z/r$的相移.这

---

* 原文明显有误.—— 译者

里我们仅引用结果.

我们假定 $V(r) = -Z/r + V_{SR}(r)$,其中 V_{SR} 表示一个短程位势并满足

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) > -\frac{1}{4},\quad \int_{r_0}^{\infty} \mathrm{d}r\,|V_{SR}(r)| < \infty,\quad V_{SR}(\infty) = 0, \tag{2.35}$$

而且对于 $r \neq 0$ 有 $\Delta V \leqslant 0$.我们用 $\delta_\ell(E)$ 表示相对于库仑势的第 ℓ 个散射相移.于是

$$\delta_{\ell+1}(E) \leqslant \delta_\ell(E). \tag{2.36}$$

此外,如果角动量 ℓ 的基态能量低于 $-(Z/2(\ell+1))^2$ 并且 $Z \leqslant 0$,或者 $Z > 0$,我们得到

$$\delta_{\ell+1}(E) \leqslant \delta_\ell(E) + \arctan\frac{Z}{2k(\ell+1)} - \arctan\frac{\sqrt{|E_\ell|}}{k}, \tag{2.37}$$

其中 $E = k^2$,而 E_ℓ 是式(2.1)的谱的下确界.

如果现在式(2.25)成立,并且 $\Delta V \geqslant 0$ 对于所有的 $r \neq 0$ 都是满足的,则 $\delta_\ell(E)$ 对 ℓ 是单调的:$\delta_{\ell+1}(E) \geqslant \delta_\ell(E)$.对于 $Z < 0$,E_ℓ 表示具有 $\sqrt{|E_\ell|} \leqslant Z/2(\ell+1)$ 的基态能量,并且我们得到了

$$\delta_{\ell+1}(E) \geqslant \delta_\ell(E) + \arctan\frac{Z}{2k(\ell+1)} - \arctan\frac{\sqrt{|E_\ell|}}{k},\quad E = k^2. \tag{2.38}$$

推广　如果从一个谐振子的能级方案出发,假使得不到任何类似结果,那将会是令人惊讶的.为了获取这些结果,我们必须记住有一个允许从库仑问题转化到谐振子问题的变换.因为在后一种情况下,角动量为 ℓ 的第 n 个能级同角动量为 $\ell+2$ 的第 $n-1$ 个能级简并,人们预期这些能级的劈裂将替代式(2.2).这样的一个结果我们最早是通过微扰方法知道的[70].

存在一个甚至更一般的结果[78].我们曾发现关于位势的这样一些局部条件,即对于任何给定的 α,角动量为 ℓ 的第 n 个能级位于角动量为 $\ell+\alpha$ 的第 $n-1$ 个能级的上方(或下方).这些条件之一是说,对于一个正的位势,有

$$\begin{aligned} &D_\alpha V(r) > 0,\quad 1 < \alpha < 2 \Rightarrow E(n,\ell) > E(n-1,\ell+\alpha),\\ &D_\alpha V(r) > 0,\quad 2 < \alpha \quad \text{或} \quad \alpha < 1 \Rightarrow E(n,\ell) < E(n-1,\ell+\alpha), \end{aligned} \tag{2.39}$$

其中二阶微分算符 D_α 被定义为

$$D_\alpha = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + (5-3\alpha)\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + 2(1-\alpha)(2-\alpha)\frac{1}{r^2}. \tag{2.40}$$

让我们特别提一下 $\alpha = 2$ 的情况.位势对于 r^2 的凸性(或凹性)意味着能级之间有关系*:

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r^2}\right)^2 V(r) \gtrless 0 \quad \Rightarrow \quad E(n,\ell) \gtrless E(n-1,\ell+2). \tag{2.41}$$

---

* 原式漏掉半个括号,现已更正. —— 译者

要注意的是,对于谐振子,对所有的 n 和 ℓ 求得式(2.41)右边的能级相等.方程式(2.41)是我们先前关于谐振子的微扰结果的推广.从库仑问题到谐振子的著名变换便是这些结果的产生根源.

我们所提到的推广被表述为下面的定理.

定理 假定 $V(r)$ 为正,并且对于 $1<\alpha<2$,$D_\alpha V(r)$ 为正(对于 $\alpha>2$ 或者 $\alpha<1$ 它为负),其中 D_α 已经在式(2.40)中给出.则

$$E(n,\ell)\gtrless E(n-1,\ell+\alpha). \tag{2.42}$$

类似地,如果 $V(r)$ 为负,并且对于 $1<\alpha<2$,$D_\alpha V(r)$ 为负(对于 $\alpha<1$ 为正)(注意,在 $D_\alpha V(r)>0$,$\alpha>2$ 的情况下,$V(r)<0$ 是空集!),则

$$E(n,\ell)\gtrless E(n-1,\ell+\alpha). \tag{2.43}$$

证明 主要想法是以这样的一种方式变换薛定谔方程,以便能够运用前面所阐释的技术:从式(2.2)开始,我们将变量从 r 变成 z,且波函数由 $u_{n,\ell}$ 变成 $w_{n,\ell}$:

$$z=r^\alpha,\quad w_{n,\ell}(z)=r^{\frac{\alpha-1}{2}}u_{n,\ell}(r),\quad W(z)=V(r), \tag{2.44}$$

这是一个更为普遍变换的一种特殊情况[79],从而给出

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}w_{n,\ell}(z)=\left\{U(z;E(n,\ell))+\frac{\lambda(\lambda+1)}{z^2}\right\}w_{n,\ell}(z),\\&U(z;E)=\frac{W(z)-E}{\alpha^2z^{2-2/\alpha}},\end{aligned} \tag{2.45}$$

其中 $\lambda=(2\ell-\alpha+1)/(2\alpha)$ 表示新的角动量.可以将方程式(2.45)看成具有角动量 λ,位势 $U(z;E)$ 以及能量为零的一个薛定谔方程.由 $E(n,\ell)$ 和 $D_\alpha V(r)$ 对 $1<\alpha<2$ 假定的正定性,我们可通过直接计算推得 $\Delta_z U(z;E)>0$;因此存在一个新的位势 $\tilde{U}$,它有一个角动量为 $\lambda+1$ 的零能量态,以及比 $w_{n,\ell}$ 少一个节点的波函数.回到初始的薛定谔方程式(2.2),我们得到一个具有角动量 $\ell+\alpha$ 的一个态和位于旧位势上方的一个位势.这个新位势现在依赖于 n 和 $E(n,\ell)$,但这并不重要.再次利用最小-最大原理,我们推导出 $E(n,\ell)>E(n-1,\ell+\alpha)$.对于 $\alpha>2$ 或者 $\alpha<1$,反转的符号源自 $\alpha>2$ 或者 $\alpha<1$ 时 $D_\alpha V(r)<0$ 的假定.

这个定理第二部分的证明是类似的. □

例 这些例子来源于纯幂次势 $\epsilon(v)r^v$,其中 ϵ 是符号函数.于是 $D_\alpha V(r)$ 约化为 $\epsilon(v)(v-2(\alpha-1))(v+2-\alpha)r^{v-2}$.由该方法,我们得出

$$\begin{aligned}&V=r^4,\quad E(n-1,\ell+2)<E(n,\ell)<E(n-1,\ell+3),\\&V=r,\quad E(n-1,\ell+3/2)<E(n,\ell)<E(n-1,\ell+2),\\&V=-r^{-1/2},\quad E(n-1,\ell+1)<E(n,\ell)<E(n-1,\ell+3/2),\\&V=-r^{-3/2},\quad E(n-1,\ell+1/2)<E(n,\ell)<E(n-1,\ell+1).\end{aligned} \tag{2.46}$$

评注 我们发现有这样一些位势,它们是微分方程 $D_\alpha V(r)=0$ 的解并且可被变换成库仑位势.

定理 位势

$$V_{\alpha,N,Z}(r) = \alpha^2 \frac{Z^2}{4N^2} r^{2\alpha-2} - \alpha^2 Z r^{\alpha-2}, \quad \alpha > 0, Z > 0, N \geqslant \frac{1}{2} \tag{2.47}$$

对于满足下列等式的角动量子数 ℓ 具有零能量的本征值，即

$$\lambda = \frac{2\ell - \alpha + 1}{2\alpha} = N - n - 1, \quad n = 0,1,2,\cdots, \tag{2.48}$$

其中，n 表示相应本征函数的节点数.

证明　在变量从 r 变到 $\rho = r^\alpha$ 的情况下，具有位势 $V_{\alpha,N,Z}$、角动量 ℓ 以及能量为零的径向薛定谔方程被变换为对于库仑位势 $-Z/\rho$、角动量 λ 和能量为 $-Z^2/4N^2$ 的薛定谔方程. 还需指出，这个库仑量子数 N 不需要是整数：库仑问题的代数处理[67,78] 对于一般的实角动量 λ 都适用.　□

评注　我们也可以对定理式(2.47) 中描述的位势作一个直接的代数处理. 让我们定义

$$A^{\pm}_{\alpha,Z,\ell} = \pm \frac{1}{\alpha} r^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{\mu_{\pm}(\alpha)}{\alpha r} + \frac{\alpha Z}{2\ell + 1 + \alpha}, \quad \mu_+ = \ell + 1, \quad \mu_- = \ell + \alpha, \tag{2.49}$$

$$H_{\alpha,N,Z,\ell} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V_{\alpha,N,Z}(r), \tag{2.50}$$

且在 $r = 0$ 处具有 Dirichlet 边界条件. 一方面，我们很容易计算 A^- 和 A^+ 的积：

$$A^-_{\alpha,Z,\ell} A^+_{\alpha,Z,\ell} = \frac{1}{\alpha^2} r^{2-2\alpha} H_{\alpha,N(\ell),Z,\ell}, \quad N(\ell) = \frac{2\ell + 1 - \alpha}{2\alpha} + 1, \tag{2.51}$$

而另一方面，对易式是

$$[A^+_{\alpha,Z,\ell}, A^-_{\alpha,Z,\ell}] = \frac{1}{\alpha^2} r^{2-2\alpha} (H_{\alpha,N,Z,\ell+\alpha} - H_{\alpha,N,Z,\ell}). \tag{2.52}$$

这表明

$$r^{2-2\alpha} H_{\alpha,N,Z,\ell-\alpha} A^-_{\alpha,Z,\ell-\alpha} = A^-_{\alpha,Z,\ell-\alpha} r^{2-2\alpha} H_{\alpha,N,Z,\ell}. \tag{2.53}$$

$H_{\alpha,N,Z,\ell}$ 的基态波函数 $u_{0,\ell}$ 是微分方程 $A^+_{\alpha,Z,\ell} u_{0,\ell} = 0$ 的解，并且可由下式显示地给出，即

$$u_{0,\ell}(r) = r^{\ell+1} \mathrm{e}^{-Zr^\alpha/(2N)}. \tag{2.54}$$

此外，借助归纳法继续下去，我们看到

$$u_{n,\ell-n\alpha} = A^-_{\alpha,Z,\ell-n\alpha} u_{n-1,\ell-(n-1)\alpha} \tag{2.55}$$

是

$$H_{\alpha,N,Z,\ell-n\alpha} u_{n,\ell-n\alpha} = 0$$

的一个解.

$\alpha = 2$ 的情况是特别的，它是对三维谐振子能级顺序的一种对照.

推论

$$\begin{aligned} &\text{如果} \quad D_2 V(r) \geqslant 0, \quad \text{那么} \quad E(n,\ell) \geqslant E(n-1,\ell+2), \\ &\text{如果} \quad D_2 V(r) \leqslant 0, \quad \text{那么} \quad E(n,\ell) \leqslant E(n-1,\ell+2). \end{aligned} \tag{2.56}$$

证明 因为 D_2 不包含零阶项，当我们作与前述定理的证明中相同的变换时，条件 $D_2 V(r) \gtrless 0$ 等价于 $\Delta U \gtrless 0$. 因此，对于 U 的能级的两个不等式产生 V 的能级的不等式. □

评注 用 $V'(r) = K(r)r$ 我们能够定义一个“跑动的弹性力常数”$K(r)$. 条件 $D_2 V(r) > (<) 0$ 则等价于 K 的单调性：$K'(r) > (<) 0$. 这类似于 $\alpha = 1$ 的情况，在那里我们能够考虑由 $V'(r) = Z(r)/r^2$ 定义的一个“跑动的库仑常数”$Z(r)$. 那时，$\Delta V(r) > (<0)$ 意味着 $Z'(r) > (<0)$.

评注 在定理式(2.42)中，我们可以避免假定 V 为正，并且可利用 $U(z;E)$ 的方法重新将其公式化；但是，那时这个条件是能量相关的. 消除在这样一个条件下的能量相关性导致了下面的结果.

定理 如果位势 $V(r)$ 满足

$$\left(r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + (3-2\alpha)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)\right)V(r) \leqslant 0, \quad \alpha \geqslant 2, \tag{2.57}$$

则我们推断 $E(n,\ell) \leqslant E(n-1,\ell+\alpha)$.

证明 我们从作了变量变换 $z = r^\alpha$ 之后的薛定谔方程式(2.45)开始，并且使用我们之前推导的定理式(2.42) ～ 式(2.43)的一个改进版本[71]. 如果

$$I(z) = \Delta_z U(z;E) < 0, \quad \text{无论何时只要 } J(z) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}U(z;E) > 0, \tag{2.58}$$

则存在式(2.45)的一个解，它的 λ 增加了一个单位，能量为 0 且其位势比 U 更低. 正的 $J(z)$ 明确意味着

$$z\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}W(z) > \left(2-\frac{2}{\alpha}\right)(W(z)-E). \tag{2.59}$$

现在容易看出，式(2.59)同下式

$$K(z) = z\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}z}\left(\frac{2}{\alpha}-1\right) + z^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}W < 0 \tag{2.60}$$

的负定性一起，意味着对于 $\alpha > 2$，$I(z)$ 为负. 注意

$$\alpha z I(z) = \alpha z^{2/\alpha-3}K(z) + (2-\alpha)J(z). \tag{2.61}$$

而利用变量 r 重写的条件式(2.60)给出了式(2.57). □

评注 对于纯幂次势，同定理式(2.43)相比我们得不到任何新的东西，但是条件式(2.57)是 —— 正如它应该那样 —— 在能量原点的变化下不变的.

因为我们没有发现一种使条件 $\Delta U(z;E) > 0$ 弱化的方法，在这种情况下消除能量依赖只能借助于一个额外假定实现.

定理 设 $V(r)$ 是单调递增的，即 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r > 0$，并且假定

$$\left(r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + (3-2\alpha)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)V(r) \geqslant 0, \quad 1 < \alpha < 2, \tag{2.62}$$

则

$$E(n,\ell) > E(n-1,\ell+\alpha). \tag{2.63}$$

证明　这次我们假定 $K(z)$ 为正，利用变量 r 将其改写，意味着式(2.62)．为了再次使用式(2.62) 并且推导出对于 $\alpha > 2$ 有 $I(z)$ 为正，我们希望证明 $J(z)$ 的正定性．通过注意到源于位势单调性的 $E(n,\ell) > W(0)$，以及 $W(z) - W(0)$ 可能是有限的，这个结果能够获得，因为

$$W(z) - W(0) = \frac{\alpha}{2(\alpha-1)}\left(zW' - \int_0^z \mathrm{d}y\,\frac{K(y)}{y}\right), \tag{2.64}$$

并且 K 为正．这表明

$$W(z) - E(n,\ell) < \frac{\alpha}{2(\alpha-1)} zW'(z), \tag{2.65}$$

因而意味着 $J(z)$ 和 $I(z)$ 都是正的．　□

最后，我们用公式表述如下的结果．

定理　假定 $V(r)$ 满足

$$r\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}r^2} + (3-\alpha)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \leqslant 0, \quad 1 < \alpha < 2, \tag{2.66}$$

则 $E(n,\ell) < E(n-1,\ell+\alpha)$．

证明　这次我们发现

$$E(n,\ell) - W(z) < \int_z^\infty \mathrm{d}yW'(y) = \frac{\alpha}{2-\alpha}\left(zW' + \int_z^\infty \mathrm{d}y\left(yW'' + \frac{2}{\alpha}W'\right)\right). \tag{2.67}$$

现在假定

$$\left(\alpha z\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)W(z) < 0, \tag{2.68}$$

其等价于式(2.66)；这表明

$$E(n,\ell) - W(z) < \frac{\alpha}{2-\alpha} zW'(z). \tag{2.69}$$

现在以一种明显的方式从式(2.58) 中分离出 $I(z)$，以便消除和 $E(n,\ell) - W(z)$ 成正比的项，通过再次使用式(2.68) 我们推知 $\Delta_z U(z;E(n,\ell))$ 为负．　□

猜测　除了与谐振子的能级顺序作比较的预期结果之外，我们获得了由例子式(2.47) 所阐述的一系列新的和意外的结果．然而，当我们数值地检验这些不等式时看到，它们并没有像我们可能预料的那样受到约束．例如，对于位势 $V = \ln r$，它对应于 $v \to 0$，我们没有得到任何新的东西，而只是 $E(n-1,\ell+1) < E(n,\ell) < E(n-1,\ell+2)$．我们或许会问在条件式(2.57) 和式(2.62) 中的因子 $3-2\alpha$，以及在条件式(2.66) 中的因子 $3-\alpha$，是最佳的还是能被不同的因子替换．基于大角动量的谐振子近似和数值核对，我们被引向用公式表述的定理式(2.57) 和式(2.62) ～式(2.66) 的改进版本，如所猜测的那样．

猜测　假定 $V(r)$ 满足

$$\left(r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-(\alpha^2-3)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)V(r)<0,\quad \alpha>2,\alpha<1. \tag{2.70}$$

我们猜测 $E(n,\ell)<E(n-1,\ell+\alpha)$.另一方面,如果

$$\left(r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-(\alpha^2-3)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)V(r)<0,\quad 1<\alpha<2, \tag{2.71}$$

则我们猜测,有颠倒的顺序 $E(n,\ell)>E(n-1,\ell+\alpha)$.

我们有许多论据支持这个猜测.

第一个论据:

对于光滑的位势和大的 ℓ,我们期待有效势

$$V_\ell(r)=\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+V(r), \tag{2.72}$$

在它的最小值附近,看上去越来越像一个谐振子.在 r_ℓ 位于 $V_\ell(r)$ 的最小值的位置时

$$2\frac{\ell(\ell+1)}{r_\ell^3}=V'(r_\ell), \tag{2.73}$$

我们预期,对于 ℓ 趋于无穷而 n 保持有限,能级将由 r_ℓ 附近的谐振子的频率确定:

$$E(n,\ell)\simeq V_\ell(r_\ell)+(2n+1)\sqrt{\frac{1}{2}V_\ell''(r_\ell)}, \tag{2.74}$$

其中曲率由

$$V_\ell''(r_\ell)=\frac{6\ell(\ell+1)}{r_\ell^4}+V''(r_\ell)=3\frac{V'(r_\ell)}{r_\ell}+V''(r_\ell) \tag{2.75}$$

给出.因为对于光滑的位势我们预期,对于 $\ell\to\infty$ 并且 $r_\ell\to\infty$[60]

$$V'\simeq O\left(\frac{V}{r_\ell}\right),\quad V''=O\left(\frac{V}{r_\ell^2}\right),\quad V_\ell\simeq O\left(\frac{\ell^2}{r_\ell^2}\right),\quad \sqrt{V_\ell''}\simeq O\left(\frac{\ell}{r_\ell^2}\right), \tag{2.76}$$

在式(2.74)中的领头项将由 V_ℓ 给出.用 $\ell+\Delta\ell$ 代替 ℓ 代入式(2.74)中并且使用在最小值成立的

$$V_\ell(r_{\ell+\Delta\ell})-V_\ell(r_\ell)\simeq(r_{\ell+\Delta\ell}-r_\ell)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V_\ell(r_\ell)=0, \tag{2.77}$$

对于能量差给出

$$E(n,\ell+\Delta\ell)-E(n,\ell)\simeq V_{\ell+\Delta\ell}(r_\ell)-V_\ell(r_\ell)\simeq\frac{(2\ell+1)\Delta\ell}{r_\ell^2}. \tag{2.78}$$

我们现在可能会问,对于什么样的 $\Delta\ell$ 值,$E(n,\ell)$ 等于 $E(n-1,\ell+\Delta\ell)$.如果通过用式(2.73)能和 $V'(r_\ell)$ 联系的式(2.78)的右边,等于式(2.74)中从 n 变为 $n-1$ 的贡献的话,则情况就将会如此.借助式(2.75)我们得到

$$2\Delta\ell\sqrt{\frac{V'(r_\ell)}{2r_\ell}}\simeq\frac{(2\ell+1)\Delta\ell}{r_\ell^2}=2\sqrt{\frac{3V'(r_\ell)+r_\ell V''(r_\ell)}{r_\ell}}. \tag{2.79}$$

因此,如果

$$r_\ell V''(r_\ell) = ((\Delta\ell)^2 - 3)\,V'(r_\ell), \tag{2.80}$$

我们可推导出在我们所考虑的极限下的能级等式.此外,如果式(2.80)的左边超过右边,我们预期 $E(n,\ell) > E(n-1,\ell+\Delta\ell)$,并且对于大的 ℓ 反之亦然.因为对于 $r \to \infty$ 时趋于无穷的光滑的位势,我们预期WKB近似对于有限的 ℓ 和 $n \to \infty$ 是有效的,我们预期至少对于禁闭势具有 $E(n,\ell) \simeq E(n-1,\ell+2)$[69],并且对 $n \to \infty$ 和 ℓ 有限当 $\Delta\ell > 2$ 或 $\Delta\ell < 2$ 时只有一个不等式保存下来.因此我们预期式(2.70)和式(2.71)成立.

第二个论据:

对于纯幂次势,我们发现 $E(n,\ell)$ 按照 $\ell + 1/2$ 递减幂次的一个渐进展开.首先,我们再次用一个谐振子来近似:

$$V_\ell(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \epsilon(v)\cdot r^v, \quad \epsilon(v) = \begin{cases} +1, & v > 0, \\ -1, & v < 0, \end{cases} \tag{2.81}$$

并且计算非简谐修正.结果表明(对纯幂次势)由 $V_\ell^{\mathrm{IV}}(r_\ell)(r-r_\ell)^4/4!$ 项产生的一级微扰与由 $V_\ell^{\mathrm{III}}(r_\ell)(r-r_\ell)^3/3!$ 产生的二级微扰具有相同的量级.用 x 的 $(a+a^\dagger)$ 表象计算 x^3 和 x^4 的矩阵元,是冗长乏味但却简单的.(在文献[80]中能找到一个类似的展开.)最后的答案是

$$\begin{aligned} E(n,\ell) \simeq \left(\frac{1}{2}|v|\right)^{2/(v+2)} (\ell+1/2)^{2v/(v+2)} \Bigg(& \frac{v+2}{v} + \frac{1}{\ell+1/2}(2n+1)\sqrt{v+2} \\ & + \frac{v-2}{24(\ell+1/2)^2}\left((2n^2+2n+1)(11-v) + \frac{2}{3}(v-8)\right) + \cdots \Bigg). \end{aligned} \tag{2.82}$$

从这个表达式我们得到

$$\begin{aligned} & E(n,\ell+\sqrt{2+v}) - E(n+1,\ell) \\ & \simeq \left(\frac{1}{2}|v|\right)^{2/(v+2)} \times \left(\ell+\frac{1}{2}\right)^{-4/(v+2)} \frac{1}{12}(n+1)(v-2)(v+1) + \cdots \end{aligned} \tag{2.83}$$

这再次支持了这个猜测

$$E(n,\ell+\sqrt{2+v}) > E(n+1,\ell), \quad v > 2\ (\text{或 } v < -1),$$

但是

$$E(n,\ell+\sqrt{2+v}) < E(n+1,\ell), \quad -1 < v \leqslant 2. \tag{2.84}$$

第三个论据:

能级的一个数值计算——例如,对于位势 $V(r) = r^4$——给出了表2.1中所列的能级.可以看到,对 $0 \leqslant n \leqslant 7$ 和 $0 \leqslant \ell \leqslant 5$ 计算出的所有数值支持这个猜测 $E(n,\ell) < E(n-1,\ell+\sqrt{6})$;没有发现任何破坏.对于 $V = \ln r$ 曾作了一个类似的检验.

表 2.1 位势 $V(r) = r^4$ 对于角动量 ℓ 和 $\ell + \sqrt{6}$ 的能级

	n							
ℓ	0	1	2	3	4	5	6	7
0	3.8	11.6	21.2	32.1	44.0	56.7	70.3	84.5
$\sqrt{6}$	12.6	22.8	34.0	46.2	59.2	72.9	87.3	102.3
1	7.1	16.0	26.4	37.8	50.1	63.3	77.2	91.7
$1+\sqrt{6}$	16.9	27.7	39.5	52.2	65.6	79.7	94.4	109.7
2	10.8	20.6	31.6	43.6	56.4	69.9	84.2	99.0
$2+\sqrt{6}$	21.4	32.8	45.2	58.3	72.1	86.6	101.6	117.2
3	14.9	25.5	37.0	49.5	62.7	76.7	91.2	106.4
$3+\sqrt{6}$	26.1	38.1	51.0	64.5	78.7	93.5	108.9	124.8
4	19.3	30.5	42.6	55.5	69.2	83.5	98.4	113.9
$4+\sqrt{6}$	31.1	43.6	56.9	70.9	85.6	100.6	116.2	
5	23.9	35.7	48.3	61.9	75.7	90.4	105.6	
$5+\sqrt{6}$	36.3	49.3	63.0	77.3	92.2	107.7	123.7	

正如所看到的，对于 $0 \leqslant n \leqslant 7$ 和 $0 \leqslant \ell \leqslant 5$，我们发现 $E(n-1,\ell+\sqrt{6}) > E(n,\ell)$. 而且对于 $n \leqslant 6$，$(E(n-1,\ell+\sqrt{6}) - E(n,\ell))(E(n,\ell) - E(n-1,\ell))^{-1}$ 不超过 15%.

一个更为有利的情况是 $V = r^5$. 在这种情况下有效势

$$V = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + r^5 \tag{2.85}$$

具有这样的性质，即在 $V'(r) = 0$ 处，我们还有 $V'''(r) = 0$. 这使得有可能把 V 压缩在适宜的上限和下限之间. 具体而言，在对

$$W(\rho) = \frac{5}{\rho^2} + 2\rho^5$$

重新标度之后，我们能够证明下列不等式链：

$$35(\rho-1)^2 + 21(\rho-1)^4 < \frac{5}{\rho^2} + 2\rho^5 - 7 < 35\left(\frac{2}{\pi}\right)^2\left(\frac{1}{\sin^2(\pi\rho/2)} - 1\right). \tag{2.86}$$

左边是一个受四次项扰动的谐振子，对于它，根据 Loeffel、Martin、Simon 和 Wightman[81] 的对角线 Padé 近似给出了一个下限. 具体地讲，对于哈密顿量

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + z^2 + \lambda z^4$$

我们有一个下限：

$$E_0 > \frac{1+\frac{5}{2}\lambda}{1+\frac{7}{4}\lambda}.$$

根据 Flügge 的《实用量子力学》一书[82]，式(2.86) 的右边是一个可解势：如果

$$V = \alpha^2\left(\frac{\chi(\chi-1)}{\sin^2\alpha x}+\frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2\alpha x}\right), \tag{2.87}$$

则能级由

$$E = \alpha^2(\chi+\lambda+2n)^2 \tag{2.88}$$

给出.

用这种方法我们得到了 $E(1,\ell)$ 的一个明确的解析上限和关于 $E(0,\ell+\sqrt{7})$ 的一个下限.对于 $\ell = 20$ 我们得到了

$$E(n=0,\ell=20+\sqrt{7}) > 175.087\ 79,$$
$$E(n=1,\ell=20) < 175.074\ 15,$$

这意味着不等式成立.由 Richard 所做的一个数值计算分别得到了 175.2 和 174.5，这意味着第一个限制是非常好的[83].

超过 $\ell = 20$，解析地证明这个不等式是可能的.而对于 $l < 20$，则需要数值计算.该计算已有人做过了，例如

$$\begin{cases} E(n=0,\ell=\sqrt{7}) = 15.31, \\ E(n=1,\ell=0) = 13.43. \end{cases}$$

如果我们承认薛定谔方程的数值积分程序足够精确，这就构成了对 $n=0$，$v=5$ 的一个证明.

第四个论据：

在 $n=1$ 和 $\ell=0$ 的情况下，我们猜测的第一部分的一个特殊情况被包括在了下面的定理中，那里只要求单调性.

定理　对于一个单调的位势，$E(1,0) < E(0,6)$ 成立 —— 事实上我们能够证明 $E(1,0) < E(0,2.5)$.

证明　对于一个单调的位势 V，我们能够取一个位势 $\tilde{V}(r)$ 作为一个上限，该位势对于 $r<R$ 是一个常数 $V(R)$，而对于 $r>R$ 是无限大.这给出了对所有 R 关于 $E(1,0) < 4\pi^2/R^2 + V(R)$ 的一个上限.另一方面，对于角动量为 ℓ 的基态能量，总是由

$$E_{0,\ell} > \inf_R\left(V(R)+\frac{\ell(\ell+1)}{R^2}\right) \tag{2.89}$$

给出下限.若取 $\ell = 6$，则给出了一个不等式链，从而证明了这一断言.前面提到的改进(用 2.5 来替换 6) 则需要更为准确的论证.　□

结论:应用

此外,我们的结果至少还有三个重要的应用.第一个动机来自夸克偶素物理,但是,正如我们已经在本节提到的,这些结果也能够被用于 μ 原子和原子物理.在前两种情况下,两个条件

$$\Delta V(r) > 0, \quad D_2 V(r) < 0, \tag{2.90}$$

都是满足的.在夸克偶素物理中提出的所有位势均满足条件式(2.90),这一点能够通过具体计算验证.还要注意,带有修改短程类库仑行为的一个跑动耦合常数的标准位势

$$V(r) = -\frac{\alpha(r)}{r} + kr, \quad \alpha(r)_{小的r} \sim -1/\ln r \tag{2.91}$$

满足式(2.90).对于小 r,$\Delta V > 0$ 只不过是 QCD 典型的反屏蔽行为.为了核对式(2.90)对于 μ 原子的情况正确无误,我们考虑由 V 所产生的电荷密度 ρ:$\rho = \Delta V$.一个利用了"跑动弹性力常数" $K(r)$ 和牛顿定理

$$K(r_0) = r_0^{-3}\int_0^{r_0} \mathrm{d}r r^2 \rho(r) \tag{2.92}$$

的直接计算,得到

$$r_0^2(D_2 V)(r_0) = r_0 K'(r_0) = \rho(r_0) - \langle\rho\rangle_{r\leqslant r_0} = \frac{3}{r_0^3}\int_0^{r_0} \mathrm{d}r r^2(\rho(r_0) - \rho(r)), \tag{2.93}$$

其中我们用 $\langle\rho\rangle_{r\leqslant r_0}$ 来表示在半径为 r_0 的球内 $\rho(r)$ 的平均值.一个递减的电荷密度因此产生一个具有 $D_2 V \leqslant 0$ 的位势.

因此对于夸克偶素系统和 μ 原子(这里我们使用了实验事实,即对于大多数的核子,电荷密度是从核子的中心开始逐步减小的),在下式的意义上(如图 2.3 所示):

$$E(n+1,\ell) \geqslant E(n,\ell+1) \geqslant E(n+1,\ell), \tag{2.94}$$

能级顺序介于氢原子和谐振子之间.

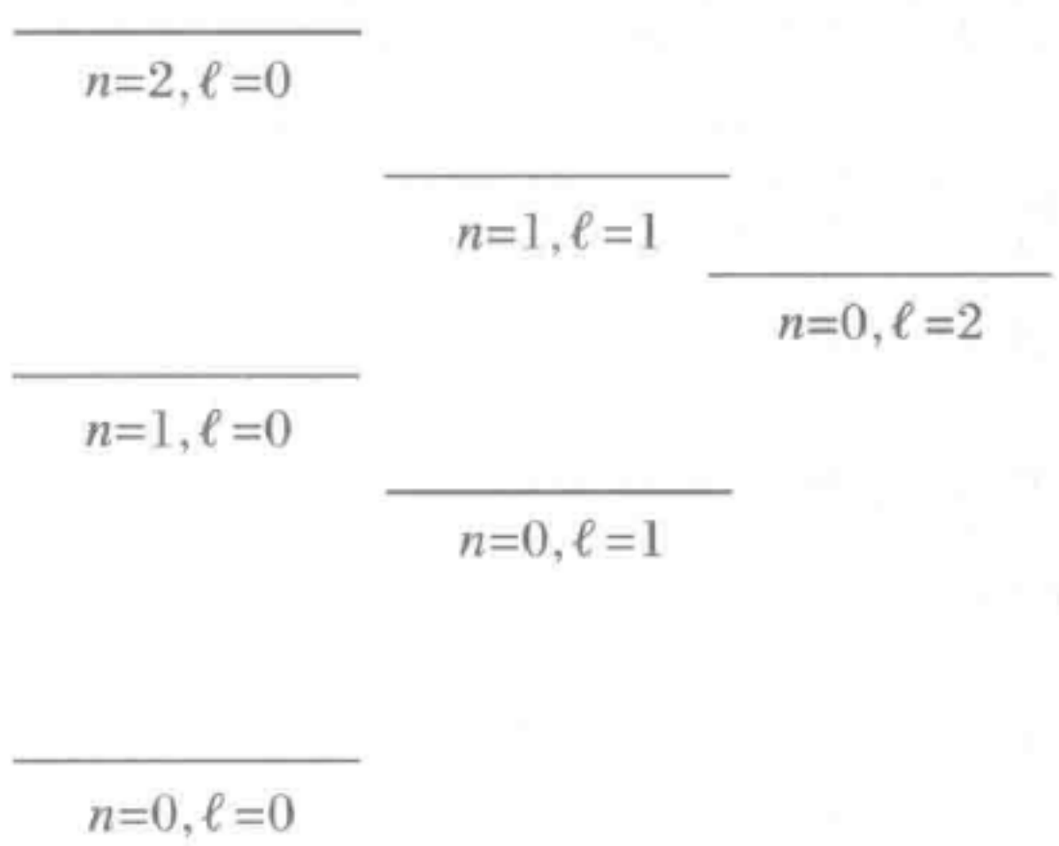

图 2.3 对于满足 $\Delta V > 0$ 和 $D_2 V < 0$ 位势的能级顺序

对于原子物理中的第三个应用在 1.1 节中讨论过. 另外，我们在这里提请注意，对于中性碱-金属原子激发态能级，Sternheimer[84] 引入了一个新的排序方案. 受能级观测值的启发，当 $n+2\ell$ 被作为一个新的量子数引入时，他发现了能级的近似简并. 这个情形对应于 $\alpha=1/2$. 从定理式(2.47)我们发现存在一个位势，它对于处在某一能量的这样的能级给出了精确的简并.

评注　之前的结果都是对那些满足像式(2.39)那样条件的位势得到的，其中有二阶微分算符 D_a，即方程式(2.40)出现. 事实表明在两个更进一步的问题中，其一涉及矩之间的关系[85]，而另一个约束基态的总能量和动能[86]，都将用到类似的条件. 为了方便，我们定义了两类位势.

A 类　对所有 $r>0$，下列条件之一成立：

$$\begin{aligned}&\text{(i) } D_aV(r)>0,1\leqslant\alpha\leqslant2,V(r)\geqslant0;\\&\text{(ii) } D_aV(r)>0,\alpha<1,V(r)\leqslant0;\\&\text{(iii) } \left(r^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+(3-2\alpha)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)V(r)\geqslant0,1<\alpha<2,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\geqslant0.\end{aligned}\tag{2.95}$$

B 类　对所有 $r>0$，下列条件之一成立：

$$\begin{aligned}&\text{(i) } D_aV(r)\leqslant0,\alpha>2\text{ 或 }<1,V(r)\geqslant0;\\&\text{(ii) } D_aV(r)\leqslant0,1\leqslant\alpha\leqslant2,V(r)\leqslant0;\\&\text{(iii) } \left(r^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+(3-2\alpha)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)V(r)\leqslant0,\alpha\geqslant2.\end{aligned}\tag{2.96}$$

在非恒定磁场中朗道能级的分裂

人们已经认识到，所谓的朗道能级简并，即处在一个恒定磁场中并被约束在一个平面上的一个带电粒子的能级的简并，在量子霍尔效应中起着至关重要的作用[87]. 我们认为，利用在中心势情况下发展的“技术”研究当磁场不是恒定[88]时简并如何消除，是很有趣的，并且首先感兴趣的是考虑最简单的情况 —— 磁场围绕垂直于该平面的轴具有柱对称性的情况.

因此我们考虑二维空间中磁的薛定谔算符：

$$H_A=(-i\nabla+\boldsymbol{A})^2.\tag{2.97}$$

固定了规范之后，我们假定 $\boldsymbol{A}$ 具有如下形式：

$$\boldsymbol{A}(x,y)=a(r)\begin{pmatrix}-y\\+x\end{pmatrix},\quad r=\sqrt{x^2+y^2}.\tag{2.98}$$

那时磁场 B 仅仅依赖于 r，并由下式给出：

$$B(r)=\partial_xA_y-\partial_yA_x=2a(r)+r\frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r}.\tag{2.99}$$

由于角动量守恒，H_A 分裂成一族无穷多的径向算符，以其简化形式记为

$$H_m=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{m^2-\frac{1}{4}}{r^2}+a^2(r)r^2-2ma(r).\tag{2.100}$$

在一个恒定磁场 B(即在我们规范中的 $a = B/2$) 的情况下,能量由下式给出,即

$$E(n,m) = B(2n+1), \tag{2.101}$$

其中 n 表示相应的约化径向波函数的节点数. 因此,所有能级(对 m) 都是无限简并的.

对于一般的 $B(r)$,薛定谔算符 H_A 可以有相当惊人的能谱性质. 我们以文献[89]中给出的一个例子阐述这个事实:我们取 $a(r) = k(1+r)^{-\gamma}(\gamma > 0)$. 因此,$B(r) = 2k(1+r)^{-\gamma} - k\gamma r(1+r)^{-\gamma-1}$,并且当 $r \to \infty$ 时 $B(r) \to 0$. 因此,H_A 的本质谱(the essential spectrum) 等于$\mathbf{R}_0^+$. 存在如下三种情况.

(1) $\gamma < 1$:在每个 H_m 中的位势项当$r \to \infty$ 时趋于无穷. 所以 H_m 以及因而,H_A 具有一个纯点谱(也即只有本征值). 另一方面,该谱又等于$\mathbf{R}_0^+$. 因此,这个点谱是稠密的.

(2) $\gamma = 1$:偏移了 $-k^2$ 的位势是一个当 r 趋于无穷时趋于零的长程势. 所以 H_m(故而 H_A) 有一个在(k^2,∞) 内(绝对) 的连续谱和一个在$(0,k^2)$ 内稠密的纯点谱.

(3) $\gamma > 1$:此情况下位势项是一个短程势,因此仅有一个连续谱.

我们主要的结果如下.

定理 设 $E_{m,n}(\lambda)$ 表示二维磁薛定谔算符 H_A 的本征值,该算符对应于一个与平面垂直的,强度为 $B(r) = B_0 + \lambda B_1(r)$ 的磁场,其中 $\lambda \geqslant 0$,而 r 是二维的距离.

那时,对于所有 $n \geqslant 0$ 和 $m \geqslant 0$,我们有

$$\lim_{\lambda \to 0} \frac{1}{\lambda}(E_{m+1,n}(\lambda) - E_{m,n}(\lambda)) \gtrless 0, \quad \text{若} \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}r} \gtrless 0. \tag{2.102}$$

我们的第二个结果超越一阶微扰论成立,但仅限于纯角向激发.

定理 考虑对于场 $B(r)$ 的二维磁薛定谔算符. 假定场 $B(r)$ 对于大 r 为正,则

$$E_{m+1,0} \gtrless E_{m,0}, \quad \text{若} \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}r} \gtrless 0. \tag{2.103}$$

从物理的角度来看,这种能级排序的结果是相当明显的.

一个本征态离原点的距离随着角动量 m 增加. 因此,如果场 B 随着距离增长(或者,分别为减小),本征态将感受到一个更强(更弱) 的场,因此能量应该在朗道能级内将作为 m 的一个函数增加(减少).

对于定理式(2.102) 的证明,我们将利用恒定场薛定谔算符的超对称结构,也就是,H_m 是可因子化的并且存在一些梯算符作用于各个H_m 之间.

对于定理式(2.103),我们利用算符 $H_A - B(r)$ 的超对称性和 H_A 的纯角激发的一个比较定理.

证明 定理式(2.102).

首先,我们给出恒定磁场情况下约化哈密顿量 H_m 的一个适当的因子化. 我们有

$$H_m = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + a_0^2 r^2 - 2ma_0, \tag{2.104}$$

其中 $a_0 = B_0/2$. 它的谱为$(4a_0(n+1/2), n \in \mathbf{N}^0)$. 我们定义阶梯算符以及它的共轭算符为

$$A_m = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{m+\frac{1}{2}}{r} + a_0 r, \quad A_m^+ = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{m+\frac{1}{2}}{r} + a_0 r. \tag{2.105}$$

我们有

$$A_m^+ A_m = H_m + 4a_0\left(m+\frac{1}{2}\right), \quad A_m A_m^+ = H_{m+1} + 4a_0\left(m+\frac{1}{2}\right) \tag{2.106}$$

以及相互缠绕的关系

$$H_m A_m^+ = A_m^+ H_{m+1}. \tag{2.107}$$

如果我们用 $u_{n,m}$ 表示约化的本征函数，我们发现

$$A_m u_{n,m} = c_{nm} u_{n,m+1}, \quad A_m^+ u_{n,m+1} = c_{nm} u_{n,m}, \tag{2.108}$$

其中 $c_{nm}^2 = 4a_0(n+m+1)$.

由这些阶梯算符我们推出以下有用的求和规则. 令 W 是一个可微的球对称函数. 然后用$\langle .|. \rangle$ 表示关于 $\mathrm{d}r$ 的 L^2 内积，则有

$$c_{nm}\langle u_{n,m}|W|u_{n,m+1}\rangle = \langle u_{n,m}|W|A_m u_{n,m}\rangle = \langle A_m^+ u_{n,m+1}|W|u_{n,m+1}\rangle, \tag{2.109}$$

因此

$$\left\langle u_{n,m}\left|\frac{W'}{2} + \left(\frac{m+\frac{1}{2}}{r} + a_0 r\right)W\right|u_{n,m}\right\rangle \tag{2.110}$$

$$= \left\langle u_{n,m+1}\left|-\frac{W'}{2} + \left(\frac{m+\frac{1}{2}}{r} + a_0 r\right)W\right|u_{n,m+1}\right\rangle.$$

在一般情况下，我们将矢量场的径向部分写为 $a_0 + \lambda a(r)$. 在(对于 λ)一级近似下，能量由下式给出：

$$E_{n,m}(\lambda) = 4a_0\left(n+\frac{1}{2}\right) + 2\lambda\langle u_{n,m}|a_0 a(r) r^2 - ma(r)|u_{n,m}\rangle. \tag{2.111}$$

因此，对于能级分裂，我们有

$$\Delta_{n,m}^{n,m+1} \equiv \frac{1}{2\lambda}(E_{n,m+1}(\lambda) - E_{n,m}(\lambda))$$

$$= \left\langle u_{n,m+1} \middle| \left(a_0 r^2 - \left(m + \frac{1}{2}\right)\right) a(r) + \frac{a(r)}{2} \middle| u_{n,m+1} \right\rangle \quad (2.112)$$

$$- \left\langle u_{n,m} \middle| \left(a_0 r^2 - \left(m + \frac{1}{2}\right)\right) a(r) - \frac{a(r)}{2} \middle| u_{n,m} \right\rangle.$$

利用这个求和规则,并取 $W' = a(r)$,我们发现

$$\Delta_{n,m}^{n,m+1} = \left\langle u_{n,m+1} \middle| \left(a_0 r^2 - m - \frac{1}{2}\right) a(r) - \left[\frac{m + \frac{1}{2}}{r} + a_0 r\right] W \middle| u_{n,m+1} \right\rangle$$

$$- \left\langle u_{n,m} \middle| \left(a_0 r^2 - m - \frac{1}{2}\right) a(r) - \left[\frac{m + \frac{1}{2}}{r} + a_0 r\right] W \middle| u_{n,m} \right\rangle. \quad (2.113)$$

再利用阶梯算符,我们得到

$$\Delta_{n,m}^{n,m+1} = \frac{1}{c_{nm}} \langle u_{n,m} | U' | u_{n,m+1} \rangle, \quad (2.114)$$

其中

$$U = \left(a_0 r^2 - m - \frac{1}{2}\right) a(r) - W(r) \left[\frac{m + \frac{1}{2}}{r} + a_0 r\right]. \quad (2.115)$$

由于

$$U' = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} U = \left[a_0 - \frac{m + \frac{1}{2}}{r^2}\right] \left(r^2 \frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r} + ra(r) - W(r)\right) \quad (2.116)$$

以及

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r} + ra(r) - W(r)\right) = r^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} a(r) + 3r \frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r} = r \frac{\mathrm{d}B(r)}{\mathrm{d}r}, \quad (2.117)$$

分部积分之后,我们有

$$\Delta_{n,m}^{n,m+1} = \frac{1}{c_{nm}} \int r \frac{\mathrm{d}B(r)}{\mathrm{d}r} \int_r^\infty \left[a_0 - \frac{m + \frac{1}{2}}{s^2}\right] u_{n,m}(s) u_{n,m+1}(s) \mathrm{d}s \mathrm{d}r. \quad (2.118)$$

现在我们能够证明

$$F(r) \equiv \frac{1}{c_{nm}} \int_r^\infty \left[a_0 - \frac{m + \frac{1}{2}}{s^2}\right] u_{n,m}(s) u_{n,m+1}(s) \mathrm{d}s \quad (2.119)$$

对 $r>0$ 严格为正.利用 $u_{n,m+1}=(1/c_{nm})A_m u_{n,m}$,并使用分部积分,我们发现

$$F(r)=\frac{1}{2}u_{n,m}^2(r)\left(a_0-\frac{m+\frac{1}{2}}{r^2}\right)+\int_r^\infty\left(a_0^2 s-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{s^3}\right)u_{n,m}^2(s)\mathrm{d}s. \tag{2.120}$$

另一方面,把 $u_{n,m}$ 的本征方程乘以$(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)u_{n,m}$,然后求从 r 到无穷的积分,我们得到

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{n,m}(r)\right)^2-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{r^2}u_{n,m}^2(r)-a_0^2r^2u_{n,m}^2(r)+2a_0(2n+m+1)u_{n,m}^2(r)\\&=2\int_r^\infty\left(a_0^2 s-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{s^3}\right)u_{n,m}^2(s)\mathrm{d}s.\end{aligned} \tag{2.121}$$

因此

$$\begin{aligned}F(r)=\frac{1}{2}\Bigg[&\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{n,m}(r)\right)^2-\Bigg(\frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}\\&-2a_0\left(2n+m+\frac{3}{2}\right)+a_0^2r^2\Bigg)u_{n,m}^2(r)\Bigg].\end{aligned} \tag{2.122}$$

现在 $F(0)=0$ 并且$\lim\limits_{r\to\infty}F(r)=0$.在 $F(r)$ 临界点我们有下列一些可能性:

(i) 如果 $u_{n,m}(r)=0$,则$((\mathrm{d}/\mathrm{d}r)u_{n,m}(r))^2>0$,因此 $F(r)>0$.

(ii) 如果 $a_0r^2=m+1/2$,则

$$F(r)=((\mathrm{d}/\mathrm{d}r)u_{n,m}(r))^2+a_0(4m+2)u_{n,m}^2(r)>0.$$

(iii) 如果$(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)u_{n,m}(r)=(a_0r+(m+1/2)/r)u_{n,m}(r)$,则

$$F(r)=(4n+2)a_0u_{n,m}^2(r)>0.$$

因此定理式(2.102) 得证. □

证明　定理式(2.103).

我们来研究哈密顿量的单参数族

$$H_A(\lambda)=H_A-\lambda B(r),\quad \text{其中对于大 } r \text{ 有 } B(r)\geqslant 0. \tag{2.123}$$

对于$\lambda=0$,我们有描写在磁场 $B(r)$ 中无自旋粒子运动的算符,而对于$\lambda=1$,哈密顿量 $H_A(1)$ 是描写在场 $B(r)$ 中一个自旋 1/2 粒子运动的哈密顿量在自旋向下分量上的投影.然而,这个哈密顿量有能量 $E=0$ 的一个无限简并的基态[89].

事实上,通过考虑约化的哈密顿量族

$$H_m(\lambda)=H_m(0)-\lambda B(r), \tag{2.124}$$

其中

$$H_m(0)=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{m^2-\frac{1}{4}}{r^2}+a^2(r)r^2-2ma(r), \tag{2.125}$$

并用 $u_m(\lambda)$ 来表示无节点的约化本征函数，即

$$H_m(\lambda)u_m(\lambda) = E_m(\lambda)u_m(\lambda), \tag{2.126}$$

则对所有的 $m \geqslant 0$，我们有 $E_m(1) = 0$ 以及

$$u_m(1,r) = c_m r^{m+\frac{1}{2}} \exp\left(-\int^r sa(s)\mathrm{d}s\right). \tag{2.127}$$

依据费曼-海尔曼定理，$E_m(\lambda)$ 对于 λ 的导数等于磁场的期待值，从而对于两个本征值的分裂我们发现

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(E_{m+1}(\lambda) - E_m(\lambda)) &= \langle u_m(\lambda) \,|B|\, u_m(\lambda)\rangle - \langle u_{m+1}(\lambda) \,|B|\, u_{m+1}(\lambda)\rangle \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}B(r)\right) I(r,\lambda)\mathrm{d}r,\end{aligned} \tag{2.128}$$

其中

$$I(r,\lambda) = \int_0^r (u_{m+1}^2(\lambda,s) - u_m^2(\lambda,s))\mathrm{d}s. \tag{2.129}$$

我们必须分别考虑 $\mathrm{d}B/\mathrm{d}r > 0$ 和 $\mathrm{d}B/\mathrm{d}r < 0$ 两种情况.

(1) $\mathrm{d}B/\mathrm{d}r > 0$

我们想要证明 $I(r,\lambda) < 0$. 为此我们分析 u_{m+1} 和 u_m 的朗斯基行列式

$$w(r) = u_m(\lambda,r)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{m+1}(\lambda,r) - u_{m+1}(\lambda,r)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_m(\lambda,r); \tag{2.130}$$

$w(r)$ 在零点和无穷远处均为零，并且

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}w(r) = u_m(\lambda,r)u_{m+1}(\lambda,r)\left[\frac{2m+1}{r^2} - 2a(r) + E_m(\lambda) - E_{m+1}(\lambda)\right]. \tag{2.131}$$

如果我们用 $h(r)$ 表示式(2.131) 中的方括号，则我们有

$$\frac{\mathrm{d}h(r)}{\mathrm{d}r} = -\frac{2}{r^3}\left(2m+1+r^3\frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r}\right). \tag{2.132}$$

对于在原点处有限的场 $B(r)$(奇异性小于一个二维的 delta 函数也就足够了)，$r^3(\mathrm{d}a(r)/\mathrm{d}r)$ 在原点等于零. 由于

$$\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}r} = \frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^3\frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r}\right) > 0, \tag{2.133}$$

这个方括号是一个严格递减函数，因此 $w(r)$ 的正定性意味着 $u_{m+1}(\lambda,r)/u_m(\lambda,r)$ 是严格递增的. 由于 $I(r,\lambda)$ 在零点和无穷远处均为零，我们有 $I(r,\lambda) < 0$. 因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(E_{m+1}(\lambda) - E_m(\lambda)) < 0. \tag{2.134}$$

对于 λ 从 0 积到 1 我们发现

$$E_{m+1}(0) - E_m(0) > E_{m+1}(1) - E_m(1) = 0. \tag{2.135}$$

(2) $\mathrm{d}B/\mathrm{d}r < 0$

我们通过反证法来证明这个排序结果.我们再次分析 u_{m+1} 和 u_m 的朗斯基行列式 $w(r)$.利用 $B(r) = 2a(r) + r(\mathrm{d}a(r)/\mathrm{d}r)$,我们将 $w(r)$ 的导数写成下式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}w(r) = \frac{u_m(\lambda,r)u_{m+1}(\lambda,r)}{r^2} \times \left[2m + 1 - B(r)\cdot r^2 + r^3\frac{\mathrm{d}a(r)}{\mathrm{d}r} + r^2((E_m(\lambda) - E_{m+1}(\lambda))\right]. \tag{2.136}$$

用 $k(r)$ 来表示这里的方括号,我们有

$$\frac{\mathrm{d}k(r)}{\mathrm{d}r} = 2r(E_m(\lambda) - E_{m+1}(\lambda) - B(r)). \tag{2.137}$$

现在我们用反证法证明这个结果.为此,我们注意到 $I(r,1) < 0$,它很容易得到验证.因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(E_{m+1}(\lambda) - E_m(\lambda))\,|_{\lambda=1} > 0. \tag{2.138}$$

这样,要么对于所有 $\lambda \in [0,1)$ 有 $E_{m+1}(\lambda) < E_m(\lambda)$,要么存在这样的一个第一点 λ^*(起始于 1)使得 $E_{m+1}(\lambda^*) = E_m(\lambda^*)$.但那时 $\mathrm{d}k(r)/\mathrm{d}r = -2rB(r) \leqslant 0$,因为根据假定 $B(r)$ 是非负的.

和以前一样,我们得出结论 $I(r,\lambda^*) < 0$.因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(E_{m+1}(\lambda) - E_m(\lambda))\,|_{\lambda=\lambda^*} > 0, \tag{2.139}$$

这给出所想要的矛盾.

评注　我们的证明并不适用于激发态,因为对于有节点的态该引理不成立.

上述这些结果对于具有一个额外标量势的哈密顿量的推广工作已由本书作者之一(H. G.)和 Stubbe[88] 完成.

2.3　能级的间距

我们现在回到能级**间距**问题,并且首先回到**角**激发态,也就是,具有 $n = 0$(零节点)和任意 ℓ 的态之间的间距.对此,我们首先给出 Common 关于这些角激发波函数的矩

$$\langle r^v\rangle\ell = \int_0^\infty u_{0,\ell}^2(r)r^v\mathrm{d}r \tag{2.140}$$

的值得注意的发现[90],它来自引理式(2.28).这个引理表明,对于位势的拉普拉斯算符作用的一种给定的符号,约化波函数除以 $r^{\ell+1}$ 是对数凹的($\Delta V > 0$)或者凸的

($\Delta V < 0$). 我们将不会追随 Common 利用分部积分的原始推导[90]，相反，我们给出由 Common、Martin 和 Stubbe 得到的下列稍强的结果[91].

定理 如果位势在原点外有一个正的(负的) 拉普拉斯算符作用，则量

$$M_\ell(\nu) = \frac{\langle r^\nu \rangle_\ell}{\Gamma(2\ell + \nu + 3)}, \tag{2.141}$$

分别是对数凹的或者凸的，也就是，$\log(M_\ell(\nu))$ 是凹的或凸的——其中分子是 r^ν 在角动量为 ℓ 的基态中的期待值. 在给出证明之前，让我们指出，在 Common 的原始结果中，这个矩按一个单位跃升. 例如对于 $\Delta V > 0$，有

$$\langle r^{-1} \rangle_{\ell=0} \langle r \rangle_{\ell=0} < \frac{3}{2} |\langle 1 \rangle_{\ell=0}|^2. \tag{2.142}$$

另一重要评注是，Common 的那些原始不等式，以及更一般的一些不等式，对 $\Delta V < 0$ 导致 **Schwarz** 类型的不等式，而他们给出的这些不等式，对于 $\Delta V > 0$，却指向**相反**的方向，就像上面给出的例子那样.

现在我们开始证明. 首先我们将用到函数

$$\phi(r) = \left(\frac{u_\ell(r)}{r^{\ell+1}}\right)^2, \tag{2.143}$$

它是对数凹的(凸的)，如果位势的拉普拉斯算符对于所有 $r > 0$ 为负(正) 的话. 然后，问题是要研究

$$N(\nu) = \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \int \phi(r) r^\nu \mathrm{d}r \tag{2.144}$$

的对数凹性. 为此，我们考虑下面的量

$$\begin{aligned} &N(\nu) - 2xN(\nu + \epsilon) + x^2 N(\nu + 2\epsilon) \\ &= \int \phi(r) \left[\frac{r^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} - 2x \frac{r^{\nu+\epsilon}}{\Gamma(\nu + 1 + \epsilon)} + x^2 \frac{r^{\nu+2\epsilon}}{\Gamma(\nu + 1 + 2\epsilon)}\right] \mathrm{d}r. \end{aligned} \tag{2.145}$$

在公式(2.145) 中的方括号在 $\mathbf{R}^+$ 中有两个零点，因为这是一个 xr^ϵ 的二次多项式，具有一个正的判别式作为伽马函数的对数凸性的结果. 设 $0 < y_1 < y_2$ 是方程

$$\frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} - \frac{2y}{\Gamma(\nu + 1 + \epsilon)} + \frac{y^2}{\Gamma(\nu + 1 + 2\epsilon)} = 0 \tag{2.146}$$

的两个解，则式(2.145) 中的方括号在

$$r_1 = \left(\frac{y_1}{x}\right)^{\frac{1}{\epsilon}}, \quad r_2 = \left(\frac{y_2}{x}\right)^{\frac{1}{\epsilon}} \tag{2.147}$$

处为零.

现在我们构造表达式

$$X = \int [\phi(r) - A\mathrm{e}^{-Br}] \left[\frac{r^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} - \frac{2xr^{\nu+\epsilon}}{\Gamma(\nu + 1 + \epsilon)} + \frac{x^2 r^{\nu+2\epsilon}}{\Gamma(\nu + 1 + 2\epsilon)}\right] \mathrm{d}r, \tag{2.148}$$

其中 A 和 B 以这样一种方式进行调整，使第一个方括号在 r_1 和 r_2 处为零. 因为 ϕ 的对数凹性或凸性，这总是可以做到的，并且第一个方括号没有其他的零点. 因此，如果 $\Delta V \gtrless 0$，则我们得到

$$N(v) - 2xN(v+\epsilon) + x^2 N(v+2\epsilon) - A\left(1 - \frac{x}{B^\epsilon}\right)^2 \gtrless 0. \quad (2.149)$$

最简单的情况是 $\Delta V < 0$. 于是，由式(2.149)以及 A 为正，对任何 x 可以得出

$$N(v) - 2xN(v+\epsilon) + x^2 N(v+2\epsilon) > 0,$$

并且这表明

$$(N(v+\epsilon))^2 < N(v)N(v+2\epsilon),$$

其证明了 N 还有 $M_\ell(v)$ 的对数凸性.

对于 $\Delta V > 0$，我们必须找到这样的 x 和 B，使得 $x = B^\epsilon$. 那时，在式(2.149)中那些 N 的组合对于某些 x 为负，并且这意味着它的判别式为正. 但是这只能借助我们现在要概述的不动点论证来做到. 要点是，我们必须要求 $\phi(r_2)/\phi(r_1) = \exp(-B(r_2 - r_1))$，其中 $R = r_2/r_1 = (y_2/y_1)^{1/\epsilon}$，而 y_1 和 y_2 由公式(2.146)唯一地给出. 此外，$x = B^\epsilon = y_1/r_1^\epsilon$.

因此，我们必须证明 $\phi(Rr_1)/\phi(r_1) = \exp(-y_1^{1/\epsilon}(R-1))$ 存在一个解；因为 ϕ 的对数凹性，左边对于 $r_1 \to 0$ 趋于一，而对于 $r_1 \to \infty$ 趋于 $-\infty$. 因此有一个解存在，于是定理的第二部分就被证明了.

我们将推广这些结果到混合矩，也就是，$\int u_{0,\ell} u_{0,\ell'} r^v \mathrm{d}r$，作为一个练习留给读者.

剩下的是要把这些结果推广到这样一种情况，在那里代替具有一个给定符号的拉普拉斯算符，位势属于以前在等式(2.95)和等式(2.96)中引入的集合 A 和 B 之一，它们是通过一个变量变换获得的. 在这里，我们仅限于 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$ 具有一个给定符号的特殊情况，也就是，其中的 V，作为 r^2 的函数，是凹的或者凸的. 那时，我们必须要做的就是把变量改变为 $z = r^2$，而定理如下.

定理　如果 V 相对于 r^2 是凸的(凹的)，则

$$\log \frac{\int u_{0,\ell}^2 r^v \mathrm{d}r}{\Gamma((v+2\ell+3)/2)} \text{ 相对于 } v \text{ 是凹的(凸的)}. \quad (2.150)$$

现在，我们有了研究能级间距所需要的一切. 当然还有 Common 结果的其他的一些推论——例如，关于动能和波函数的一些不等式——但是这些将留到后面考虑.

我们着手处理的第一个问题是，研究由 $n = 0$ 和 ℓ 标记的基态能量 $E(\ell)$ 作为 ℓ 的一个函数的凸性和凹性. 对于谐振子势，我们知道 $E(\ell)$ 是 ℓ 的线性函数. 对于一个一般的位势，因为根据 Feynman-Hellmann 定理有

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}(\ell) = (2\ell+1)\int_0^\infty \frac{u_\ell^2}{r^2}\mathrm{d}r, \quad (2.151)$$

故我们首先知道 $E(\ell)$ 是增加的，并且我们也知道，它比 $\ell(\ell+1)$ 增加得要更缓慢，因为，根据在 2.1 节中所指出的一个一般定理，基态能量是线性地进入哈密顿量中的任何参数的凹函数. 对一个无限深方势阱，对于大的 ℓ，$E(\ell)$ 的行为的确类似于 $\ell(\ell+1)$.

我们现在回到同谐振子的比较. 首先我们考虑一个相对 r^2 是凹的位势，也就是使得 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)<0$ 的位势的情况. 自然地，角动量可以取作一个连续变量，并且我们必须证明，量

$$2E(\ell)-E(\ell+\delta)-E(\ell-\delta)$$

对任意的 δ 为正，从而确立能量是 ℓ 的一个凹函数. 通过分别使用试探函数 $r^{-\delta}u_\ell(r)$ 和 $r^{+\delta}u_\ell(r)$，很容易得到 $E(\ell-\delta)$ 和 $E(\ell+\delta)$ 的一个上限（注意，这些试探函数在谐振子的情况下变得**精确**）.

利用 u_ℓ 的薛定谔方程，作初等代数处理，给出

$$2E(\ell)-E(\ell-\delta)-E(\ell-\delta)>$$

$$\delta\left((2\ell+1-2\delta)\frac{\int u^2 r^{-2-2\delta}\mathrm{d}r}{\int u^2 r^{-2\delta}\mathrm{d}r}-(2\ell+1+2\delta)\frac{\int u^2 r^{-2+2\delta}\mathrm{d}r}{\int u^2 r^{2\delta}\mathrm{d}r}\right). \tag{2.152}$$

从 $\log\langle r^v\rangle/\Gamma((2\ell+3+v)/2)$ 的凹性，易见，式(2.152)的右边为正. 因此，我们有如下定理.

定理 如果对于所有 $r>0$，$(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)<0$，则 $E(\ell)$ 相对 ℓ 是凹的.

它的逆命题亦是正确的，但是证明“更难对付”，因而在附录 B 中给出了. 总之，我们得到了[48] 定理：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\gtrless 0,\quad \forall\, r>0\\&\Rightarrow\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}\ell^2}\gtrless 0\end{aligned}\right\}. \tag{2.153}$$

分界线上的情况自然是谐振子，对于它，E 是 ℓ 的线性函数.

随后，对于具有给定符号拉普拉斯算符作用的位势情况[50]，类似的定理已经被得到了.

定理 如果

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\gtrless 0,\quad \forall\, r>0\\&\Rightarrow\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}\ell^2}\lesseqgtr-\frac{3}{\ell+1}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\end{aligned}\right\}. \tag{2.154}$$

尽管我们不会在本书中给出这两个定理的证明，但是让我们指出证明的要点. 这两种情况下都广泛地使用了 Chebyshev 不等式：

如果 f 和 g 都是递减的或者都是非递增的，并且 h 是非负的，则

$$\int fh\mathrm{d}x\int gh\mathrm{d}x \leqslant \int fgh\mathrm{d}x\int h\mathrm{d}x. \tag{2.155}$$

对式(2.153),我们利用

$$-\left(\frac{u'}{ru}\right)' - \frac{2(\ell+1)}{r^3} > 0, \tag{2.156}$$

而对于式(2.154)

$$-\left(\frac{u'}{u}\right)' - \frac{\ell+1}{r^2} > 0. \tag{2.157}$$

通过积分求得第二个定理的一个更弱的但是更为清晰的版本. 即,如果 $\Delta V(r) \geqslant 0, \forall\, r > 0$,则

$$\frac{E_{\ell+1} - E_\ell}{E_\ell - E_{\ell-1}} \geqslant \frac{E^c_{\ell+1} - E^c_\ell}{E^c_\ell - E^c_{\ell-1}}, \tag{2.158}$$

其中 E^c_ℓ 指定为库仑能量.那时,式(2.158) 的右边为

$$\frac{2\ell+3}{2\ell+1}\left(\frac{\ell}{\ell+2}\right)^2. \tag{2.159}$$

在引言中,我们已给出了该不等式的一些示例说明,其中包括 μ 原子 —— 其 $\Delta V(r) > 0$—— 以及一些碱金属原子,对于它们,在单电子近似下有 $\Delta V(r) < 0$.

到现在为止,我们一直忽略了自旋效应,但是迄今为止所发展的技术,使得在自旋1/2的情况下,以一种半相对论"Pauli"处理方式考虑这些效应成为可能.众所周知,$J = \ell + 1/2$ 和 $J = \ell - 1/2$ 态之间的分裂,到能量以 $(v/c)^2$ 作展开的第一阶,由下式给出

$$\delta = \frac{2\ell+1}{4m^2}\left\langle \frac{\mathrm{d}V/\mathrm{d}r}{r} \right\rangle, \tag{2.160}$$

其中,期待值是在具有确定轨道角动量的**薛定谔**波函数之间取得的,并且 V 是作为**类矢量**的量进入相应的 Dirac 算符的**中心**位势之中.我们将指定 $\delta(\ell)$ 为对应于一个**纯角向**激发(即,对应于具有无节点径向波函数) 的分裂.

接着,我们有两个定理[50]:对于 $\Delta V(r) \geqslant 0, \forall\, r > 0$,有

$$\delta(\ell) \leqslant \Delta(\ell) = \frac{2}{m\ell}\,\frac{(\ell+2)^4}{(2\ell+3)^2}(E(\ell+1) - E(\ell))^2, \tag{2.161}$$

以及对于 $\Delta V(r) \geqslant 0, \forall\, r > 0$,有

$$\frac{\delta(\ell+1)}{\delta(\ell)} \geqslant \frac{\ell(\ell+1)^3}{(\ell+2)^4}. \tag{2.162}$$

对于它们的证明,之前在方程式(2.155) 中提到的Chebyshev不等式是至关重要的,但是我们建议读者去参考原始文献.这些不等式最漂亮的例证由 μ 原子给出(见表 2.2).对于小 Z,$\Delta(\ell)$ 的上限几乎与实验值符合,因为核子基本上是类点的,然而,对于大 Z,例如铅 ——Δ/δ 超过 2.

表 2.2 μ 原子能级精细分裂(δ) 的上限(Δ) 和它们的比值

元 素	Z	$\delta(1)$ keV	$\Delta(1)$ keV	$\delta(2)$ keV	$\Delta(2)$ keV	$\delta(3)$ keV	$\delta(2)/\delta(1)$ $>0.098\ 8$	$\delta(3)/\delta(2)$ >0.211
^{56}Fe	26	4.20 ± 0.09	4.40	0.47 ± 0.07			0.112 ± 0.02	
^{Nat}Ni	28	5.30	5.89					
^{Nat}Cu	29	6.17	6.78 ± 0.6	1.68	± 0.7		0.26 ± 0.13	
^{68}Zn	30	7.00 ± 0.6	7.84	0.56 ± 0.65			0.08 ± 0.012	
^{75}As	33	11.10 ± 0.8	11.45	2.00 ± 0.8			0.18 ± 0.08	
^{89}Y	39	19.26 ± 0.94	22.70	2.27 ± 0.8	2.74	2.27 ± 1.8	0.188 ± 0.04	1.00 ± 0.8
^{93}Nb	41	23.15 ± 1	29.10	2.68 ± 0.22			0.116 ± 0.01	
^{92}Mo	42	25.50 ± 0.8	29.60	2.7 ± 0.4			0.106 ± 0.015	
^{114}Cd	48	39.90 ± 0.8	52.50	5.16 ± 0.5	5.07	2.20 ± 0.8	0.129 ± 0.015	0.43 ± 0.2
^{115}In	49	43.60 ± 0.8	56.80	5.35 ± 0.96			0.123 ± 0.02	
^{120}Sn	50	45.70 ± 0.9	60.60	5.65 ± 0.9	5.98	0.95 ± 0.6	0.123 ± 0.02	0.43 ± 0.2

另一个能得到类似的有趣不等式的领域是由一个三重态和一个单态组成的夸克偶素 P 态的精细结构. 这个结构完全类似于电子偶素的精细结构. 非常奇怪的是, $c\bar{c}$ 系统的 P 波单态已被观测到了, 并且其质量获得精确测量要早于电子偶素的 P 波单态[92].

在一个 $q\bar{q}$(其中 q 是夸克, 或者电子) 系统中有四个 P 波态, 三个具有角动量 $J = 0,1,2$ 的P波三重态和一个P波单态. 在Breit-Fermi近似框架下[93], 它可能对也可能不对, 并假定中心势是由类标量部分和类矢量部分组成, 即

$$V = V_s + V_v, \tag{2.163}$$

我们发现

$$M(1^1\mathrm{P}_1) = \tilde{M} - \frac{1}{2m^2}\left\langle \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle, \tag{2.164}$$

其中

$$\tilde{M} = \frac{1}{12}(-5M(1^3P_2) + 27M(1^3P_1) - 10(1^3P_0)) \tag{2.165}$$

(注意，$\tilde{M}$ **不是** P 波三重态的重心).

当然我们或许能够利用我们之前的结果式(2.161) 得到 $M(1^1P_1)$ 的下限，因为我们相信夸克-反夸克的势具有正的拉普拉斯算符.但是事实证明这并非严格的限制.我们宁愿利用 V 为凹的信息，求得

$$\left\langle \frac{V'}{r} \right\rangle \geqslant \frac{5}{8} m(E(2) - E(1))^2. \tag{2.166}$$

这里，Chebyshev 不等式再次被用于证明中.对于相反的不等式

$$\left\langle \frac{V'}{r} \right\rangle \leqslant \frac{m}{2}(E(1) - E(0))^2, \tag{2.167}$$

我们仅需要 $V'' < (V'/r)$，但是一个额外工具是在 2.1 节末尾曾提到的混合求和规则：

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} u_1 u_0 \mathrm{d}r = \frac{1}{2}(E(1) - E(0))^2 \int_0^\infty r u_1 u_0 \mathrm{d}r.$$

当我们赋予具体的数，对于 $m_c = 1.5$ GeV，粲偶素情况的最后结论是

$$3\,536.2 \pm 12.2\,(\mathrm{MeV}) < M(1^1P_1) < 3\,558.6 \pm 12.2\,(\mathrm{MeV}),$$

其中误差是相对论效应的粗略估计.这与观测的一个 $M = 3.526$ GeV 的 $^1P_1$ 态是一致的，那在文献[94] 给出该预言的六个月之后.

对于底偶素* 系统，我们预言

$$9\,900.3 \pm 2.8\,(\mathrm{MeV}) < M(1^1P_1) < 9\,908 \pm 2.8\,(\mathrm{MeV}).$$

我们现在转到径向激发，即角动量固定而节点数增加的激发的能量间距.许多结果已由 Richard、Taxil 和本书作者之一(A. M.) 得到[49].正如我们将看到的，这些结果有趣但是却不完善，而且一些猜想仍然需要一个完全严格的证明.谐振子将再次成为我们的出发点.的确，三维谐振子 $\ell = 0$ 的能级是等间距的：

$$2E(n,\ell = 0) = E(n+1,\ell = 0) + E(n-1,\ell = 0).$$

当我们(Richard、Taxil 和 A. M.) 从事这项研究时，我们希望前面用到的相同判据，即 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$ 的**符号**将决定是否随着 n 的增加，能级或者是变得越来越靠近，或者是变得越来越远.事实**并非如此**.我们有 $r^2/4$ 微扰的一些这样的例子，对于它们，有 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r) > 0$，但对某些 n，有

$$2E(n,0) > E(n+1,0) + E(n-1,0),$$

和我们的预想正好相反.在纯幂次势，$V = r^\nu$ 的情况下，朴素的预期似乎是正确

---

* Upsilon. 它是由 b 夸克和 $\bar{\mathrm{b}}$ 夸克构成的夸克偶素，常用希腊字母Υ. 因为 b 夸克又称底夸克，故 Upsilon 可以称为底偶素. —— 译者

的,即

$$2E(n,0) \gtrless E(n+1,0) + E(n-1,0), \quad \text{对 } v \gtrless 2.$$

我们所证明的结果完全出乎预料,尽管事后可以理解它们.结果如下.

定理 对于

$$V = \frac{r^2}{4} + \lambda v,$$

当 λ 足够小时,如果

$$\lim_{r\to 0} r^3 v = 0$$

以及

$$Z(r) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^5 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r} > 0, \quad \forall\, r > 0, \tag{2.168}$$

则随着 n 的增加,能级间距变得越来越大.另一方面,如果 $Z < 0$,能级随着 n 的增加变得越来越靠近.然而正如我们将看到的,在超出微扰的区域这并非始终正确.

现在要问,为什么我们需要条件式(2.168) 呢?Z 是对于 v 的一个三阶微分算符.有两个明显的 v 使 Z 等于零.它们是

$$v = \text{常数}, \quad v = r^2$$

然而,$Z \equiv 0$ 允许另外一个解,即

$$v = \frac{1}{r^2},$$

并且这完全正常.添加 $v = C/r^2$ 到谐振子势相当于把角动量移动一个固定的量,并且因为谐振子的 Regge 轨迹是线性的且是平行的,即$(\mathrm{d}/\mathrm{d}\ell)(E(n,\ell))$ 是常数,和 n 无关,所有能级都被移动相同的量,因而等间距特性被保留下来.自然,我们能够发明其他的判据,因为所有 $\ell = 0$ 能级的知识尚确定不了位势 —— 正如所有逆问题专家都知道的.存在着间距相等的 $\ell = 0$ 能级的位势的一个无限维家族,其参数是原点波函数,但是我们确信我们在此有了最简单的判据.

证明再次利用了升、降算符技术.我们想要计算

$$\lambda\Delta = \delta E_{N+1} + \delta E_{N-1} - 2\delta E_N,$$

其中 $E_N = E(N,\ell = 0)$.如果 $V = r^2/4 + \lambda v$,则

$$\Delta = \int_0^\infty v(u_{N+1}^2 + u_{N-1}^2 - 2u_N^2)\mathrm{d}r; \tag{2.169}$$

u_{N-1} 和 u_{N+1} 可以由 u_N 利用升算符或降算符得到:

$$\begin{aligned} \left(2N+2-\frac{r^2}{2}+r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)u_N &= \sqrt{(2N+2)(2N+3)}\,u_{N+1}, \\ \left(2N+3-\frac{r^2}{2}-r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)u_{N+1} &= \sqrt{(2N+2)(2N+3)}\,u_N. \end{aligned} \tag{2.170}$$

然后,我们作一系列分部积分,以便把 Δ 转换为显含式(2.168) 定义的 $Z(r)$ 的一个表达式,并且考虑边界条件$\lim_{r\to 0} vr^3 = 0$.我们得到

$$\Delta = \int_0^\infty K(r)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^5\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\,\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\mathrm{d}r, \tag{2.171}$$

其中

$$K(r) = \int_r^\infty \frac{\mathrm{d}r'}{r'^5}\int_{r'}^\infty r''\mathrm{d}r''\int_{r''}^\infty (u_{N+1}^2 + u_{N-1}^2 - 2u_N^2)\mathrm{d}r;$$

$K(r)$ 的显式表达式为

$$\begin{aligned} &2N(2N+1)(2N+2)(2N+3)K(r)\\ &= + u_N'^2\left(\frac{3}{4r^3} + \frac{E}{2r}\right) + u_N^2\left(-\frac{3E}{4r^3} - \frac{3}{16r} + \frac{E^2}{2r} - \frac{Er}{8}\right) + u_N u'_N\left(-\frac{3}{4r^4} + \frac{E}{2r^2}\right). \end{aligned} \tag{2.172}$$

证明式(2.172) 在各处均为正是可能的(但非常麻烦). 那时，就得到了定理式(2.168).

很不幸，正如若干反例所揭示，这个定理仅对**微扰**成立. 最好的反例是通过取由 Singh、Biswas 和 Datta 以及很久之后由 Turbiner[96] 得到的部分可解势之一[95]的 $V = r^6 - (2K+1)r^2$ 形式而获得的.

对于 $K = 4$，前五个能级的能量由下式给出：

$$\begin{cases} E_0, E_4 = \mp\sqrt{480 + 96\sqrt{11}}, \\ E_1, E_3 = \mp\sqrt{480 - 96\sqrt{11}}, \\ E_2 = 0. \end{cases}$$

很明显间距并不增大，尽管由 V 计算得到的 Z 为正. 然而，对于 Z 取正而 V 单调递增情形没有发现任何反例.

证明这个猜想可能需要一段时间. 同时我们会试图得到基于WKB近似的另一个判据. 对于一个单调位势，E 可认为是 N 的一个连续函数，N 的定义为

$$N - \frac{1}{4} = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \sqrt{(E-V)_+}\,\mathrm{d}r. \tag{2.173}$$

(这里基态由 $N = 1$，而不是 $N = 0$ 给出!) 那时，间距由 $\mathrm{d}E/\mathrm{d}N$ 给出，而假如

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}N}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}N}\right) < 0, \tag{2.174}$$

即把函数和变量交换有

$$\frac{\mathrm{d}^2N}{\mathrm{d}E^2} > 0, \tag{2.175}$$

则随着 N 增加能级变得更近.

在积分号下求导，我们有

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{r_t} \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{E-V}}, \tag{2.176}$$

其中，r_t 是回转点(turning point). 我们不能再求导，因为我们将会得到一个 r_t 处的发散. 所以，我们假定 $V'(r) > 0, \forall\, r \geqslant 0$，并且对式(2.176) 作分部积分

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E}=\frac{1}{2\pi}\int\frac{1}{V'}\frac{V'\mathrm{d}r}{\sqrt{E-V}}=\frac{1}{\pi}\frac{\sqrt{E-V(0)}}{V'(0)}-\frac{1}{\pi}\int_0^{r_t}\frac{V''}{V'^2}\sqrt{E-V}\mathrm{d}r.\tag{2.177}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}^2N}{\mathrm{d}E^2}=\frac{1}{2\pi}\frac{1}{V'(0)\sqrt{E-V(0)}}-\frac{1}{2\pi}\int_0^{r_t}\frac{V''}{V'^2\sqrt{E-V}}\mathrm{d}r.$$

使该式为正的充分条件是

$$V''<0.\tag{2.178}$$

然而，注意，对于 $V''\to 0$，$\mathrm{d}^2N/\mathrm{d}E^2$ 非零，因为第一项保留下来并且不能为 0，原因是 $V'(0)$ 不是无限大. 事实上，对于一个纯线性势，很容易严格地证明，能级的间距是减小的.

我们确信条件式(2.178) 足以保证能级间距减小，但是可能需要花一些时间，才能给出一个严格的证明.

在 QCD 中，夸克-反夸克势被认为是凹的[46]. 按这种方式我们理解了，在底偶素($b\bar{b}$ 束缚态) 和粲偶素($c\bar{c}$ 束缚态) 的情况下我们有

$$M_{\gamma''}-M_{\gamma'}<M_{\gamma'}-M_{\gamma},$$
$$M_{\gamma''}-M_{\gamma''}<M_{\gamma''}-M_{\gamma'},$$
$$M_{\psi''}-M_{\psi'}<M_{\psi'}-M_{\psi}.$$

然而，最近观察到的 $b\bar{b}$ 系统的能级，称作 γ^{IV}，是这样的：

$$M_{\gamma^{\mathrm{IV}}}-M_{\gamma''}>M_{\gamma''}-M_{\gamma''}.$$

因此我们获得这样一个暗示，即朴素的单道势模型失效了. 然而，这个能级高于$B\bar{B}$ 的阈值

$$M_{\gamma^{\mathrm{IV}}}\simeq 10.85\ \mathrm{GeV}\gg 10.55\ \mathrm{GeV},$$

因而耦合道效应或者胶子贡献，或者两者一起可能是重要的.

2.4 零点波函数、动能、均方半径及其他

除了能级的能量之外，其他重要的量有在 2.3 节介绍过的对无节点态波函数的矩、零点径向波函数的平方或在$\ell\neq 0$的情况下零点波函数的ℓ阶导数、动能的期待值以及态的均方半径. 状态之间的矩阵元，例如电偶极矩阵元等也都是很有趣的.

在电子偶素或夸克偶素的衰变中，零点波函数起了重要作用. 对于夸克偶素，所谓的 Van Royen-Weisskopf[97] 公式(也由 Pietschmann 和 Thirring，以及其他人

提出）给出

$$\Gamma_{e^+e^-} = 16\pi\alpha e_{\mathrm{Q}}^2 \frac{|\psi(0)|^2}{M^2}, \tag{2.179}$$

其中 e_{Q} 表示以 e 为单位的夸克电荷，同时 M 表示衰变态的总质量. 对于夸克偶素 P 态变为光子或胶子的衰变，存在包含波函数导数的类似的公式（例如，见文献[97]）.

动能的期待值，在诸如味无关的位势下夸克-反夸克系统的质量依赖中，起着重要作用，这是因为 Feynman-Hellmann 定理给出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}m}E(m) = -\frac{\langle T\rangle}{m}, \tag{2.180}$$

其中 E 是夸克-反夸克系统的结合能，而 m 是两个夸克的共同质量（Common mass）. 对于质量不等的情况，必须作一个简单的改变. 对于纯幂次势，动能也和总能量有着简单的关系，但是若 V 在无穷远处趋于零，则对于符号给定的拉普拉斯算符作用，存在更为普遍的不等式，连接动能和总能量，而且还存在一些相应能级的间距依赖于质量的结果.

均方半径的重要性显而易见，因为它是系统大小的一种度量，并且人们非常希望把它与像能量那样更容易处理的量联系起来.

所有这些量，正如我们将要看到的，通过各种不等式联系在一起，它们之中有一些约束相当严格因而可能是物理上感兴趣的.

现在回到零点波函数或它的导数. 首先要注意，这其实是如下一个矩的极限情况：

$$\lim_{r\to 0}\frac{(u_{\ell,n}(r))^2}{r^{2\ell+2}} = \lim_{v\to -2\ell-3}\frac{\int (u_{\ell,n}(r))^2 r^v \mathrm{d}r}{\Gamma(2\ell+3+v)}. \tag{2.181}$$

在 $n=0$ 的特殊情况下，这将允许我们利用 2.3 节开始时得到的定理库，但是眼下我们将特别关注径向激发态，而且主要是 $\ell=0$ 的情况. 第一个结果如下[98].

定理*　如果

$$V''\gtrless 0, \quad \forall\, r>0, \quad |u'_{1,0}(0)|^2 \gtrless |u'_{0,0}(0)|^2. \tag{2.182}$$

证明　$u_{1,0}(r)$ 最多有一个节点. 通过考查 $u_{0,0}(r)$ 和 $u_{1,0}(r)$ 的朗斯基（Wronskian）行列式，容易看出 $(u_{0,0}(r))^2-(u_{1,0}(r))^2$ 至少有一次为零（因为归一化），且至多两次为零. 由针对 $2m=1$ 写成的 Schwinger 公式，得

$$(u'(0))^2 = \int_0^\infty u^2(r)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}r, \tag{2.183}$$

我们看到，如果 V'' 恒为正，或者恒为负，则均不可能有 $(u'_{1,0}(0))^2=(u'_{0,0}(0))^2$，因为那样的话 $(u'_{1,0}(0))^2-(u'_{0,0}(0))^2$ 将会仅在 $r=r_0$ 有一次为零，并且我们将会有

---

* 该定理的下列表述形式完全遵照原文，看上去不大舒服但没做改动. 下面还有几处与此类似. —— 译者

$$0 = \int_0^\infty ((u_{1,0}(r))^2 - (u_{0,0}(r))^2)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V(r) - \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(r_0)\right)\mathrm{d}r. \quad (2.184)$$

如果 V'' 为负，我们就不能得到 $(u'_{1,0}(0))^2 > (u'_{0,0}(0))^2$，因为对于一个库仑势我们有相反的不等式，并且在凹位势的连续簇(continuous family)

$$V_\lambda(r) = (1-\lambda)V(r) - \frac{\lambda}{r}$$

内，一个位势会给出值为零的零点波函数的差. 对于 $V'' > 0$ 的情况，通过取

$$V_\lambda(r) = (1-\lambda)V(r) + \lambda r^2,$$

可以利用类似的论证. □

极具诱惑力的是作如下猜测[99]：

$$|u'_{n,0}(0)| \gtrless |u'_{n+1,0}(0)|, \quad \text{对于 } V'' \leqslant 0, \forall n, \quad (2.185)$$

但迄今为止这个猜想，一直使所有的证明尝试均告失败. 在极限情况 $V(r) = cr$ 下，根据式(2.183)我们有 $|u'_{n,0}(0)| = |u'_{n+1,0}(0)|, \forall n$. 我们所能做的一切就是看看在 λ 很小且 V 有给定凹形的极限情况 $V(r) = r + \lambda v$. 那时，通过对小 n 的数值计算和对大 n 的 Airy 函数渐近性质的混合使用，我们或许能够“证明”：

$$\lim_{\lambda\to 0}\frac{|u'_{n+1}(0)|^2 - |u'_n(0)|^2}{\lambda} \gtrless 0, \quad \text{如果 } v'' \gtrless 0.$$

不过，一个更弱的但可靠的结果可以被求得.

定理 如果

$$V'' < 0, \quad V'(r) \to 0, \quad \text{并且 } V(r) \to \infty,$$

$$\text{则对于 } r \to \infty, \quad |u'_{n,0}(0)|^2 \to 0 \text{ 对于 } n \to \infty. \quad (2.186)$$

证明 如果 $V'' < 0$，则 V 必然单调递增，因为对于 $r \to \infty$ 时不趋于 $-\infty$ 的情况，它不可能在有限的 r 处达到一个最大值. 于是，正如我们能够通过计算其微商得知，$u'(r)^2 + (E-V)u^2(r)$ 是单调递减的. 因此

$$|u'(0)|^2 > |u'(r)|^2, \quad \forall r > 0,$$

并且通过积分

$$|u(r)|^2 < r^2\,|u'(0)|^2,$$

但还有

$$|u(r)|^2 < \frac{|u'(0)|^2}{E - V(r)}.$$

因此，我们通过在式(2.183)中插入这两个不等式得到

$$|u'_{n,0}(0)|^2\left(1 + 2\int_0^{R_1} rV(r)\mathrm{d}r - R_1^2 V(R_1) + \ln\frac{E(n,0) - V(R_2)}{E(n,0) - V(R_1)}\right) < \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(R_2), \quad (2.187)$$

其中，$0 < R_1 < R_2 < R_T$，而 R_T 是回转点，且

$$E(n,0) = V(R_T).$$

我们能够这样选择 R_1，让其足够小，但保持固定值，使得

$$1+2\int_0^{R_1} r\,|V(r)|\,\mathrm{d}r - R_1^2 V(R_1)$$

严格为正.尔后我们可以这样选择 R_2,使得 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r(R_2) < \epsilon$,其中 ϵ 为任意小,并且最后因为 $V(r)\to\infty$,所以对于 $n\to\infty$ 有 $E(n,0)\to\infty$,因而我们能够使式(2.187)中的对数任意地小. 因此,对于足够大的 n,在可接受的额外条件,即 $\int_0^R r\,|V(r)|\,\mathrm{d}r$ 收敛之下,我们能使 $|u'_{n,0}(0)|^2$ 任意小.

在一个于无穷远处趋于零但具有无穷个束缚态的位势情况下,我们也有 $n\to\infty$ 时 $|u'_{n,0}(r)|^2\to 0$ 的性质.让我们施加条件

$$(2-\epsilon)V(r) + r\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} < 0, \quad \text{具有 } V(r)\to 0 \text{ 当 } r\to\infty, \tag{2.188}$$

它保证了位势比 $r^{-2+\epsilon}$ 减小得更慢,并且具有无穷个束缚态积聚在零能量处.

使用明显的不等式,我们写出

$$|u'_{n,0}(0)|^2\left(1-\int_0^R r^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}r\right) < \frac{1}{R}\int_R^\infty r\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}u_{n,0}^2\mathrm{d}r,$$

因此,如果 R 足够小,则

$$|u'_{n,0}(0)|^2 < \frac{\frac{1}{2}\langle T\rangle_n}{R\left(1-\int_0^R r^2(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)\mathrm{d}r\right)},$$

其中 $\langle T\rangle_n$ 是平均动能.但是,由式(2.188)有

$$\langle T\rangle_n < \frac{2-\epsilon}{\epsilon}\,|E(n,0)|,$$

而且由于 $E(n,0)$ 当 $n\to\infty$ 时趋于零,我们可得到预期的结果.

反之,如果 $V''>0, V'>0$,且当 $r\to\infty$ 时 $V'\to\infty$,则对于 $n\to\infty$ 我们有 $|u'_{n,0}(0)|^2\to\infty$.证明是简单的,因为 V 在原点不可能是奇异的.我们得到

$$|u'_{n,0}(0)|^2 \geqslant \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(R)\Big/\left(1+\frac{\mathrm{d}V(R)}{\mathrm{d}r}\int_0^R\frac{\mathrm{d}r}{E(n,0)-V(r)}\right).$$

我们能够取 R 足够大,以便使 $\mathrm{d}V(R)/\mathrm{d}r$ 任意大,进而 n 足够大使得分母任意地接近 1. □

支持我们猜想的最终迹象是 WKB 近似.对于大的 n,对 WKB 波函数平方的振荡求平均,即替换

$$u^2 \simeq \frac{1}{(E-V)^{1/2}}\sin^2\left(\int_0^r\sqrt{E-V(r')}\,\mathrm{d}r'\right)\times \text{常数}$$

为

$$\frac{1}{2}\frac{1}{(E-V)^{1/2}}\times \text{常数},$$

经过一些处理后我们得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}|u'(0)|^{-2} = -\frac{1}{2}\int_0^{R_T}\mathrm{d}r\,\frac{VV''}{E^2V'^2}\left(1-\frac{V}{E}\right)^{-1/2}, \tag{2.189}$$

这意味着，对于 $V''<0$，$|u'(0)|$ 随 E 增加而变小，并且对于 $V''>0$，情况则相反. 这是我们猜想的一个连续版本.

Glaser 曾提出[100] 零点波函数的另一种处理方法. 他从下面的矩阵元开始

$$\langle x\,|\mathrm{e}^{-Ht}|\,y\rangle, \tag{2.190}$$

对于 $x=y$，该矩阵元约化为

$$\langle x\,|\mathrm{e}^{-Ht}|\,x\rangle=\sum\,|\psi_n(x)|^2\mathrm{e}^{-E_nt}, \tag{2.191}$$

其中假定位势是禁闭的，且因此我们有一个纯离散谱. 最简单的结果是：如果位势为**正**，则

$$\langle x\,|\mathrm{e}^{-Ht}|\,x\rangle<\langle x\,|\mathrm{e}^{-H_0t}|x\rangle, \tag{2.192}$$

这意味着，在三维：

$$\sum_{k=1}^{N}\,|\psi_k(x)|^2<\frac{1}{(4\pi)^{3/2}}\,\frac{\mathrm{e}^{E_Nt}}{t^{3/2}},$$

并且相对于 t 最小化后有

$$\sum_{k=1}^{N}\,|\psi_k(x)|^2<E_N^{3/2}\left(\frac{\mathrm{e}}{6\pi}\right)^{3/2}, \tag{2.193}$$

它具有与我们将要在下面马上导出的半经典估计相同的定性行为.

现在我们不再假定 V 为正，而是仅仅假定 $\gamma<3/2$ 情况下$\int|V_-|^\gamma\mathrm{d}^3x$ 收敛，其中，V_- 是位势的负的部分. 于是我们能够证明[100]

$$\left|\frac{\langle x|\mathrm{e}^{-Ht}|\,y\rangle}{\langle x|\mathrm{e}^{-H_0t}|\,y\rangle}-1\right|\to 0\ \text{对于}\ t\to 0,$$

或者

$$\lim_{t\to 0}\big((4\pi t)^{3/2}\sum_{k=1}^{\infty}\,|\psi_k(x)|^2\mathrm{e}^{-E_kt}\big)=1.$$

然后，多亏了 Karamata 的一个 Tauberian 定理，我们得以证明

$$\lim_{N\to\infty}\frac{\sum_{k=1}^{N}\,|\psi_k(x)|^2}{E_N^{3/2}}=\frac{1}{6\pi^2}, \tag{2.194}$$

这和 Quigg 和 Rosner 得到的半经典结果严格相符[59]—— 至少对 WKB 近似下非奇异的中心势有

$$|\psi_N(0)|^2\sim\frac{1}{4\pi^2}E_N^{1/2}\,\frac{\mathrm{d}E_N}{\mathrm{d}N}. \tag{2.195}$$

我们的结果式(2.194) 具有的优势是，它对于在原点附近不如 $-r^{-2+\epsilon}$ 奇异的任何禁闭势都有效. 例如，对于 $V=\ln r$，它给出了

$$\sum_{k=1}^{N}\,|\psi_k(0)|^2\sim\text{常数}\times(\ln N)^{3/2}.$$

事实上，我们的方法适用于任意的 x，在没有球对称的情况下，并且通过一个温和

的额外假定我们能够证明

$$\lim_{N\to\infty}\frac{\sum_{k=1}^{N}|\psi_k(x)|^2-((E_N-V(x))^{3/2})/(6\pi^2)}{E_N^{1/2}}\to 0, \tag{2.196}$$

这意味着，如果我们用 N 个独立粒子填充一个禁闭的位势，对于大 N，我们得到了 Thomas-Fermi 密度.

现在我们希望推导出作为能量差函数的动能期望值的不等式. 最初，这由 Bertlmann 和本书作者之一(A. M.)借助有点类似用于推导 Thomas-Reiche-Kuhn 和 Wigner 求和规则的技术[97]，利用对中间态求和得出的[101]. 但是，若利用 Regge 解析延拓，我们的不等式事实上甚至对于非整数角动量也成立. 为证明它们，我们必须直接使用薛定谔微分方程. 首先，我们导出一个均方半径的不等式：

$$E(0,\ell+1)-E(0,\ell)\leqslant\frac{2\ell+3}{\langle r^2\rangle_{0,\ell}}. \tag{2.197}$$

我们所需的一切只是一个关于 $E(0,\ell+1)$ 的上限，它可通过取变分试探函数：

$$u_{0,\ell+1}=Cru_{0,\ell} \tag{2.198}$$

得到，其中，$u_{0,\ell}$ 是 $(0,\ell)$ 态的精确波函数. 计算是简单的，它给出式(2.197). 若 $V(r)$ 是一个谐振子势，则式(2.197) 即成为一个等式，这并不令人惊讶，因为，那时，由式(2.198) 给出的试探波函数就变得精确了.

现在我们有了一种 Heisenberg 不确定性不等式：

$$4\langle T\rangle_{0,\ell}\langle r^2\rangle_{0,\ell}\geqslant(2\ell+3)^2. \tag{2.199}$$

通过展开由下式给出的二次型：

$$\int_0^\infty\left(u'_{0,\ell}-(\ell+1)\frac{u_{0,\ell}}{r}-\lambda ru_{0,\ell}\right)^2\mathrm{d}r\geqslant 0, \tag{2.200}$$

并且写出它的取负值的判别式便可以证明这个不等式. 结合式(2.197) 和式(2.200) 我们得到

$$\langle T\rangle_{0,\ell}\geqslant\frac{2\ell+3}{4}(E(0,\ell+1)-E(0,\ell)). \tag{2.201}$$

该不等式是十分普适的，并且当 V 是一个谐振子势时变成一个等式. 在本节末尾，将用它从实验数据计算 b 夸克和 c 夸克之间的质量差.

如果我们加入额外的条件，我们可以得到相反方向的不等式. 例如，若

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}<0,$$

$$\langle T\rangle_{0,\ell}\leqslant\frac{2\ell+3}{4}(E(0,\ell)-E(0,\ell-1)). \tag{2.202}$$

这个不等式的证明将在我们讨论了动能期待值和 r^{-2} 期待值之间的一些“共有(Common)”不等式之后给出[90]，而这些不等式我们现在就将着手介绍.

首先考虑的是位势的拉普拉斯算符作用具有给定符号的情形. 此时，在态 $u=$

$u_{0,\ell}$ 中径向动能可以被写作

$$\int_0^\infty u'^2 \mathrm{d}r = \int_0^\infty uu'\left(\frac{u'}{u}\right)\mathrm{d}r = -\frac{1}{2}\int u^2\left(\frac{u'}{u}\right)'\mathrm{d}r.$$

利用引理式(2.28),我们得到:若

$$\Delta V \gtrless 0,$$

则

$$\int u'^2 \mathrm{d}r \gtrless \frac{1}{2}\int \frac{u^2}{r^2}(\ell+1)\mathrm{d}r. \tag{2.203}$$

与离心项结合起来,我们得到:若

$$\Delta V \gtrless 0, \quad \forall\, r>0,$$

则

$$\langle T\rangle_{0,\ell} \gtrless (\ell+1)\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\langle r^{-2}\rangle_{0,\ell}. \tag{2.204}$$

对2.2节中给出的 A 和 B 的所有情形,假若 V 分别属于集合 A,α 或者 B,α,则能够给出一种类似的处理,它导致

$$\langle T\rangle_{0,\ell} \gtrless \left(\ell+\frac{\alpha+1}{2}\right)(\ell+1/2)\langle r^{-2}\rangle_{0,\ell}. \tag{2.205}$$

一个特殊的情况是 $\alpha=2$,它对应于 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$ 的一个给定符号,若

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \gtrless 0, \quad \forall\, r>0,$$

则

$$\langle T\rangle_{0,\ell} \gtrless \left(\ell+\frac{3}{2}\right)\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\langle r^{-2}\rangle_{0,\ell}. \tag{2.206}$$

把对于

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} < 0$$

情况下的这个不等式和 $E(0,\ell)$ 的凹性——见定理式(2.154)——结合起来,我们得到

$$\langle T\rangle_{0,\ell} < \left(\ell+\frac{3}{2}\right)\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell} < \frac{2\ell+3}{4}(E(0,\ell)-E(0,\ell-1)),$$

这正好就是式(2.202).

我们要注意,尽管迄今我们仅对给定了 ℓ 的基态证明了这些不等式,但是,它们实际上对任意的径向激发**在一个方向**都成立.对于任意的 n,当 $\Delta V \geqslant 0$ 时,我们有

$$\langle T\rangle_{0,\ell} \geqslant (\ell+1)(\ell+1/2)\langle r^{-2}\rangle_{n,\ell}, \tag{2.207}$$

而当

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \geqslant 0$$

时,我们有

$$\langle T\rangle_{n,\ell} \geqslant (\ell + 3/2)(\ell + 1/2)\langle r^{-2}\rangle_{n,\ell}. \tag{2.208}$$

然而,这些不等式对 $n > 1$ 从来都不是饱和(saturate)的.其证明非常简单.考虑一个具有 n 个节点的态.考虑两个相继节点之间的间隔 $r_k < r < r_{k+1}$,取位势为

$$\begin{aligned} V_{k,k+1} &= \left(\frac{r_k}{r}\right)^N - 1, \quad \text{对于 } r < r_k, \\ V_{k,k+1} &= V, \quad \text{对于 } r_k < r < r_{k+1}, \\ V_{k,k+1} &= \left(\frac{r}{r_{k+1}}\right)^N - 1, \quad \text{对于 } r > r_{k+1}. \end{aligned} \tag{2.209}$$

若 V 满足,譬如 $\Delta V > 0$,则 $V_{k,k+1}$ 对 $N > 1$ 也满足 $\Delta V_{k,k+1} > 0$,因此取极限 $N \to \infty$,我们看到不等式(2.207)对此极限位势,即对在 r_k 和 r_{k+1} 处满足 Dirichlet 边界条件的位势 V 的基态成立.因此

$$\int_{r_k}^{r_{k+1}} \left(u'^2_{n,\ell} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u^2_{n,\ell}\right)\mathrm{d}r > (\ell + 1/2)(\ell + 1)\int_{r_k}^{r_{k+1}} r^{-2}u^2_{n,\ell}\mathrm{d}r.$$

将所有相继区间的此类不等式相加,就给出式(2.206).同样的方法允许我们证明式(2.208).注意对任意 n,**反向**不等式**并不成立**,因为构造式(2.209)是不可能的.

现在,正如我们已经看到的,既然原点波函数是矩的极限情形,我们可以得到连接原点波函数和动能期望值的一些不等式[91,102].

在 2.3 节中我们已经看到,如果 V 分别属于类 (A,α) 或 (B,α),则

$$\log \frac{\langle r^v\rangle_{0,\ell}}{\Gamma((v + 2\ell + 3)/\alpha)}$$

是凹的(凸的).另一方面,我们有

$$\lim_{r\to 0}\left(\frac{u_\ell}{r^{\ell+1}}\right)^2 = \alpha \lim_{v\to -2\ell-3} \frac{\langle r^v\rangle_{0,\ell}}{\Gamma((v + 2\ell + 3)/\alpha)}. \tag{2.210}$$

对于 $v = -2\ell - 3$,$v = -2$ 及 $v = 0$,应用凸性考虑,并利用不等式(2.205),则分别对按式(2.95)和式(2.96)定义的 (A,α) 或 (B,α) 类,可以得到

$$\lim_{r\to 0}\left(\frac{u_{0,\ell}}{r^{\ell+1}}\right)^2 \leqslant \alpha \frac{\Gamma((2\ell + 3)/\alpha)^{\ell+1/2}}{\Gamma((2\ell + 1)/\alpha)^{\ell+3/2}}\left(\frac{\langle T\rangle_{0,\ell}}{(\ell + 1/2)(\ell + (\alpha + 1/2))}\right)^{\ell+3/2}. \tag{2.211}$$

特别有趣的情形是,对 $\ell = 0$,若 $\Delta V \geqslant 0$,则

$$|u'_{0,0}(0)|^2 \leqslant 4\langle T\rangle^{3/2}_{0,0}, \tag{2.212}$$

而若

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \geqslant 0,$$

则

$$|u'_{0,0}(0)|^2 \leqslant \frac{4}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{3}\right)^{3/2}\langle T\rangle^{3/2}_{0,0} \simeq 1.228\ 4\langle T\rangle^{3/2}_{0,0}. \tag{2.213}$$

一个有趣的例子是 $V = r$，对应于 $\alpha = 3/2$ 的 A 类，它给出

$$|u'(0)|^2 < \frac{3}{2}\left(\frac{8}{5}\right)^{3/2} \frac{1}{(\Gamma(2/3))^{3/2}} \langle T\rangle_{0,0}^{3/2} \cong 1.927 \langle T\rangle_{0,0}^{3/2},$$

它和精确答案 $(3/E_0)^{3/2} \approx 1.455$ 相差不是太远.

这些结果可用于夸克偶素物理. 动能满足 Bertlmann-Martin 不等式(2.201)，对 $n = 0, \ell = 0$ 它化简成

$$\langle T\rangle_{0,0} \geqslant \frac{3}{4}(E(n = 0, \ell = 1) - E(n = 0, \ell = 0)). \tag{2.214}$$

注意夸克偶素位势是**凹的**，且是**递增的**，我们看出，式(2.213)适用，而且用该方法，我们得到

$$|\psi(0)|^2 > \frac{1}{\pi^{3/2}}\left(\frac{M_q}{2}(E(\ell = 1) - E(\ell = 0))\right)^{3/2}. \tag{2.215}$$

若我们将此不等式代入 Van Royen-Weisskopf 公式(2.179)中，用

$$M(n = 0, \ell = 1) = 3.52 \text{ GeV},$$
$$M(n = 0, \ell = 0) = 3.10 \text{ GeV},$$

而且取 c 夸克质量在 1.5～1.8 GeV 之间，则我们得到 $\Gamma_{e^+e^-} > 3.9 \sim 5.2$ keV. 这可以和实验上得到的数值

$$\Gamma_{e^+e^-} = 4.7 \pm 0.35 \text{ (keV)}$$

相比较. 这个结果几乎是太好了，但必须谨记，Van Royen-Weisskopf 公式需要一些重要的修正.

类似地，对 $b\bar{b}$ 系统，用

$$M(n = 0, \ell = 1) = 9.90 \text{ GeV},$$
$$M(n = 0, \ell = 0) = 9.46 \text{ GeV},$$

以及 5.174 GeV 的夸克质量，可得

$$\Gamma_{e^+e^-} > 0.7 \text{ keV},$$

它可以与

$$\Gamma_{e^+e^-} \simeq 1.34 \pm 0.05 \text{ (keV)}$$

的实验数值相比较.

现在我们将利用前面有关动能的不等式，研究束缚能的质量依赖性，还有能级间距.

表达式(2.180)给出系统束缚能对共同质量的导数，该系统是粒子和反粒子通过质量无关位势(在夸克偶素情形，是“味无关”的位势)束缚而成的. 依据文献[101]，我们有

$$E(m) - E(M) = \int_m^M \frac{T(\mu)}{\mu} \mathrm{d}\mu. \tag{2.216}$$

现在记住，若我们考虑薛定谔方程

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mu \mathrm{d}r^2}+V(r)-E(\mu)\right)u=0, \tag{2.217}$$

$1/\mu$ **线性**地进入哈密顿量，且根据一般定理——参看式(2.10)后的评注——该哈密顿量的基态能量相对于这个参数是凹的，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(1/\mu)}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}(1/\mu)}<0.$$

利用式(2.180)，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mu}(\mu T(\mu))>0, \tag{2.218}$$

从而由式(2.217)，我们得到

$$E(m)-E(M)>mT(m)\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{M}\right),\quad \text{对于 } M>m.$$

然后把以前忽略的量子数添加进来，并利用不等式(2.201)，我们得到

$$\begin{aligned}&E(m,n=0,\ell=0)-E(M,n=0,\ell=0)\\&>\frac{3}{4}\frac{M-m}{M}(E(m,n=0,\ell=1)-E(m,n=0,\ell=0)).\end{aligned}$$

现在我们用

$$M_{Q\bar{Q}}(n,\ell)=2m_Q+E(m_Q,n,\ell), \tag{2.219}$$

其中 m_Q 代表夸克质量，$M_{Q\bar{Q}}$ 代表夸克-反夸克系统的总质量，从而得到

$$m_b-m_c\geqslant\frac{M_{b\bar{b}}(n=0,\ell=0)-M_{c\bar{c}}(n=0,\ell=0)}{2-\frac{3}{4}(M_{c\bar{c}}(n=0,\ell=1)-M_{c\bar{c}}(n=0,\ell=0))/m_b}. \tag{2.220}$$

利用 $m_b=5$ GeV，该式给出 $m_b-m_c>3.29$ GeV，而不等式 $m_b-m_c>(M_{b\bar{b}}-M_{c\bar{c}})/2$ 给出 $m_b-m_c>3.18$ GeV.

这是不对位势施加任何限制的情况下，目前我们所能达到的最佳结果. 在 2.1 节我们已经看到，通过对幂次势 $V=r^\alpha/\alpha$ 的标度，可由薛定谔方程

$$\left(-\frac{1}{\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\ell(\ell+1)}{\mu r^2}+V(r)-E\right)u=0,$$

得出

$$E(\mu)\sim\mu^{-\frac{\alpha}{\alpha+2}}\quad 和\quad T(\mu)\sim\mu^{-\frac{\alpha}{\alpha+2}}.$$

用这种方法我们看到，在库仑势($\alpha=-1$)或线性势($\alpha=1$)的特殊情形下，$T(\mu)$ 行为分别像 μ 或 $\mu^{-1/3}$.

对夸克偶素而言，“好位势”，如我们在引言中所看到的，是这样的，它使得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}>0\quad 和\quad \frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}r^2}<0. \tag{2.221}$$

它们是如下形式限制的特殊情况，即

$$\lambda V'+rV''\geqslant 0,\quad \forall\, r>0, \tag{2.222}$$

式(2.222) 为零对应于 $\lambda = 1 - \alpha$ 的幂次势.从式(2.222) 我们看到

$$(\lambda - 1)\left(V + \frac{1}{2}rV'\right) + \frac{rV'}{2}(3 - \lambda) \tag{2.223}$$

分别是递增或递减的. 现在考虑两个质量,即 m 和 M 情形的薛定谔方程,其中 $M > m$.将方程联立并积分,则得到

$$\frac{u'(M,r)}{u(M,r)} - \frac{u'(m,r)}{u(m,r)} = \frac{\int_0^r ((M-m)V + c)u(M,r')u(m,r')\mathrm{d}r'}{u(M,r)u(m,r)}. \tag{2.224}$$

若 V 是单调递增的,而且如果 $u(M,r)$ 和 $u(m,r)$ 都是基态波函数,则我们看出 $u(M,r)/u(m,r)$ 是递减的,且仅在 $r = r_0$ 处一次取值为 1.若现在我们对 M 和 m 取式(2.223) 的期待值,取它们的差并利用位力定理,我们得到

$$\begin{aligned}&(\lambda - 1)(E(M) - E(m)) + (3 - \lambda)(T(M) - T(m))\\ &= \int ((\lambda - 1)V + rV' - ((\lambda - 1)V + rV')_{r=r_0})(u^2(M,r) - u^2(m,r))\mathrm{d}r.\end{aligned}$$

在式(2.222) 的条件下,我们分别得到

$$(\lambda - 1)(E(M) - E(m)) + (3 - \lambda)(T(M) - T(m)) \lesseqgtr 0$$

或转到其微分形式:

$$(1 - \lambda)\frac{T(\mu)}{\mu} + (3 - \lambda)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\mu} \lesseqgtr 0, \tag{2.225}$$

然后求积分,我们得到 $T(\mu)\mu^{1-\lambda/3-\lambda}$ 是递减(递增) 的.

特别地,若位势具有一个**正的**拉普拉斯算符作用,且是**凹的**,它就是条件式(2.221) 并对应于 $\lambda = 2$ 和 $\lambda = 0$,则我们得到

$$\begin{cases} T(\mu)/\mu, & \text{递减},\\ T(\mu)\mu^{1/3}, & \text{递增}. \end{cases} \tag{2.226}$$

很明显,式(2.226) 给出比式(2.220) 更强的约束.我们求得

$$\begin{aligned}&E(m, n = 0, \ell = 0) - E(M, n = 0, \ell = 0)\\ &> \frac{9}{4}\left(1 - \left(\frac{m}{M}\right)^{1/3}\right)(E(m, n = 0, \ell = 1) - E(m, n = 0, \ell = 0));\end{aligned}$$

当应用此式于夸克偶素体系时,可得

$$\begin{aligned}m_\mathrm{b} - m_\mathrm{c} > {}& \frac{1}{2}(M_{\mathrm{b}\bar{\mathrm{b}}}(n = 0, \ell = 0) - M_{\mathrm{c}\bar{\mathrm{c}}}(n = 0, \ell = 0))\\ &+ \frac{9}{8}\left(1 - \left(\frac{m_\mathrm{c}}{m_\mathrm{b}}\right)^{1/3}\right)(M_{\mathrm{c}\bar{\mathrm{c}}}(n = 0, \ell = 1) - M_{\mathrm{c}\bar{\mathrm{c}}}(n = 0, \ell = 0)).\end{aligned}$$

利用 $m_\mathrm{b} = 5\ \mathrm{GeV}$,该式给出

$$m_\mathrm{b} - m_\mathrm{c} > 3.32\ \mathrm{GeV}, \tag{2.227}$$

它是个重要的改进. 若要再前进一步,你就必须放弃严格性,将 $\ell = 0$ 的不等式(2.201) 替换成一个实际的猜测. 在文献 [101] 中做出了这样的一个猜测. 它断言

$$\left.\begin{aligned}\langle T\rangle_{0,0} &\simeq \frac{3}{4}(E(0,1)-E(0,0))\left(1+\frac{7}{9}c^2\right)\\ \text{其中 } c &= (E(1,0)+E(0,0)-2E(0,1))/(E(1,0)-E(0,0))\end{aligned}\right\}. \tag{2.228}$$

该表达式经过如此方式进行了处理，使得式(2.201)的束缚总得到满足，并且对于一个谐振子势(其 $c=0$)是饱和的.它也适合一个纯库仑势.用位势 $-A/r+Br$ 和纯幂次势做的数值实验给出了在千分之几误差范围之内的一致的结果.

于是，$T(m_b)$ 和 $T(m_c)$ 可被估计出来：

$$T(m_c)\simeq 0.346\ \text{GeV},$$
$$T(m_b)\simeq 0.41\ \text{GeV}.$$

在积分内取 T 的平均值，则对 $m_b=5$ GeV 和 5.2 GeV，分别有

$$m_b-m_c\simeq 3.39 \quad \text{和} \quad 3.38\ \text{GeV}, \tag{2.229}$$

对 m_b 的敏感性因而是非常弱的.对于涉及轻子衰变宽度的另一方法，请参看文献[102].

我们现在转而考虑另一种质量依赖性，即能级间距的质量依赖性[103].对幂次势，由标度可知这是平凡的[59].对于 $V=r^\alpha/\alpha$，在具有给定量子数的两能级之间的间距，其行为如同 $\mu^{-\alpha/(\alpha+2)}$.在最低能级，(1,0)，(0,0)，(0,1)和(0,0)之间，以及更一般地，在两个纯角激发间的间距，我们可施加一个式(2.222)一类的条件.易见，两个纯角激发的波函数 $u_{0,L}$ 和 $u_{0,\ell}$ 仅相交一次，而且对小的 r 有 $u_{0,L}<u_{0,\ell}$.因此，假定了式(2.222)并取式(2.223)在态$(0,L)$和$(0,\ell)$中的两个期待值的差，我们得到：若

$$\lambda V'+rV''\gtrless 0,$$

则

$$(\lambda-1)(E(\mu,0,L)-E(\mu,0,\ell))+(3-\lambda)(T(\mu,0,L)-T(\mu,0,\ell))\gtrless 0.$$

因此

$$(\lambda-1)\Delta E-(3-\lambda)\mu\frac{\mathrm{d}\Delta E}{\mathrm{d}\mu}\gtrless 0,$$

即

$$\Delta E\times\mu^{\frac{1-\lambda}{3-\lambda}} \quad \text{递减(递增)}.$$

特别是，若

$$\Delta V>0,\quad \lambda=2, \tag{2.230}$$

则

$$\Delta E\mu \quad \text{递减;}$$

若

$$V''<0,\quad \lambda=0, \tag{2.231}$$

则 $\Delta E\mu^{-1/3}$ 递增，正好如所预期的.

若波函数仅仅相交一次，也可以应用此类考虑到 2S − 1S 间距上. 这就是针对式(2.231)的情况. 但倘若我们仅仅要求 $\Delta V > 0$，则波函数可能相交两次. 所以，我们得到如下结果.

定理 如果 $\Delta V > 0$ 且 $V'' < 0$，则

$$\begin{aligned} &\frac{E(\mu,1,0) - E(\mu,0,0)}{\mu} && \text{随着 } \mu \text{ 递减，} \\ &(E(\mu,1,0) - E(\mu,0,0))\mu^{1/3} && \text{随着 } \mu \text{ 递增.} \end{aligned} \tag{2.232}$$

当得知这些性质被粲偶素和底偶素体系很好地满足时，读者不会感到惊奇，它们分别为

$$E(m_c,1,0) - E(m_c,0,0) = 3\,686 - 3\,097\ (\text{MeV}) = 589\ (\text{MeV})$$

和

$$E(m_b,1,0) - E(m_b,0,0) = 10\,023 - 9\,460\ (\text{MeV}) = 563\ (\text{MeV}).$$

为结束本节，我们想讨论**混合**矩，即如下类型的矩阵元：

$$\int_0^\infty u_{n,\ell} r^v u_{n',\ell}\, \mathrm{d}r.$$

首先，定理式(2.141)可以平凡地运用. 若我们记

$$M_{\ell\ell'} = \frac{\int_0^\infty u_{0,\ell} r^v u_{0,\ell}\, \mathrm{d}r}{\Gamma(\ell + \ell' + v + 3)},$$

那么，若 $u_{0,\ell}$ 和 $u_{0,\ell'}$ 是角动量为 ℓ, ℓ' 的基态波函数，而且如果位势具有正的(负的)拉普拉斯算符作用，则 $\ln M_{\ell,\ell}(v)$ 对 v 是凹的(凸的). 若 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$ 具有确定符号，则类似的定理亦成立：若有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \gtrless 0,$$

则

$$N_{\ell,\ell}(v) = \frac{\int_0^\infty u_{0,\ell} r^v u_{0,\ell}\, \mathrm{d}r}{\Gamma((\ell + \ell' + v + 3)/2)}$$

是对数型凹的(凸的).

该定理可用于求电偶极矩阵元的上限和下限[104]. 利用 Schwarz 不等式和 $u_{0,\ell+1}$ 的归一化，上限相当简单：

$$\left(\int u_{0,\ell}(r) u_{0,\ell+1}(r) r\mathrm{d}r\right)^2 < \int (u_{0,\ell}(r))^2 r^2 \mathrm{d}r.$$

然后，利用式(2.197)，我们得到

$$\left(\int u_{0,\ell}(r) u_{0,\ell+1}(r) r\mathrm{d}r\right)^2 < \frac{E(0,\ell+1) - E(0,\ell)}{2\ell + 3}. \tag{2.233}$$

求下限需要一些技巧. 首先我们有求和规则

$$\int_0^\infty \frac{2\ell + 3}{r^2} u_{0,\ell} u_{0,\ell+1}\mathrm{d}r = (E(0,\ell+1) - E(0,\ell))\int_0^\infty u_{0,\ell} u_{0,\ell+1}\mathrm{d}r,$$

它可以通过计算 $u_{0,\ell}$ 和 $u_{0,\ell+1}$ 的朗斯基行列式得到. 接着我们假定 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)<0$,并利用 $N_{\ell,\ell+1}(v)$ 在 $v=-2,0,1$ 时的对数凸性,借助之前的恒等式. 于是我们得到

$$\left(\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}r\mathrm{d}r\right)^2>\frac{\left(\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}\mathrm{d}r\right)^2 2\Gamma(\ell+5/2)^2/\Gamma(\ell+2)}{E(0,\ell+1)-E(0,\ell)}.$$

现在只需求得用物理可观测量表达的 $\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}\mathrm{d}r$ 的下限. Common[104] 的技巧是取 $u_{0,\ell}-\lambda u_{0,\ell+1}$ 作为第一径向激发的试探波函数,其中 $\lambda=\left(\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}\mathrm{d}r\right)^{-1}$. 用该方法,我们得到 $E(1,\ell)$ 的下限,它经过一些代数运算后给出

$$\left(\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}\mathrm{d}r\right)^2>\frac{E(1,\ell)-E(0,\ell+1)+2(\ell+1)\int\mathrm{d}r(u_{0,\ell+1})^2/r^2}{E(1,\ell)-E(0,\ell)}$$

此时,存在几种可能性:

(i) 仅保留假设 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)<0$,则有

$$(2\ell+3)\int\frac{u_{0,\ell+1}^2}{r^2}\mathrm{d}r=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}(0,\ell+1)<E(0,\ell+2)-E(0,\ell+1),$$

它给出

$$\left(\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}r\mathrm{d}r\right)^2>\frac{2(\Gamma(\ell+5/2))^2}{\Gamma(\ell+2)}$$
$$\times\frac{E(1,\ell)-E(0,\ell+1)+((2\ell+2)/(2\ell+3))(E(0,\ell+2)-E(0,\ell+1))}{(E(0,\ell+1)-E(0,\ell))(E(1,\ell)-E(0,\ell))};$$

(ii) 添加假设 $\Delta V>0$. 这将保证下限是非平凡的,因为 $E(1,\ell)>E(0,\ell+1)$. 但是通过积分式(2.154) 可以获得更好的结果. 那时我们得到

$$(2\ell+3)\int\mathrm{d}r(u_{0,\ell+1})^2/r^2=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}(0,\ell+1)$$
$$>(E(0,\ell+1)-E(0,\ell))\times\frac{2(\ell+1)^2}{(2\ell+3)(\ell+2)},$$

从而

$$\left(\int u_{0,\ell}u_{0,\ell+1}r\mathrm{d}r\right)^2>2\frac{\Gamma(\ell+5/2)}{\Gamma(\ell+2)}$$
$$\times\frac{E(1,\ell)-E(0,\ell+1)+((\ell+1)^2/((\ell+3)^2(\ell+2)))(E(0,\ell+1)-E(0,\ell))}{(E(0,\ell+1)-E(0,\ell))(E(1,\ell)-E(0,\ell))}.$$

对于底偶素系统,用这种方法人们发现

$$1.76\ \mathrm{GeV}^{-1/2}<\langle r\rangle_{0,1}<2.61\ \mathrm{GeV}^{-1/2}.$$

考虑到所用的几个不等式都并非最优,这个结果并不算太差.

到现在为止我们考察了在具有零个节点的态,即具有正的径向波函数之间的电偶极跃迁矩. 在初态或末态中具有 $n\neq0$ 的态之间的跃迁矩阵元或许为零. 然

而，对于矩阵元

$$D_{n,\ell}^{n',\ell'} = \int u_{n,\ell}(r)u_{r',\ell'}(r)r\mathrm{d}r, \tag{2.234}$$

存在一些可以求得的结果，其中 $|\ell-\ell'|=1, n+n'\leqslant 2$.

这里，我们不给出在文献[105]中提供的那些证明细节，而是仅仅指出一些基本的要素：

(i) $u_{0,\ell}(r)/u_{0,\ell}(r)$ 对于 $\ell'>\ell$ 是递增的；

(ii) 如果 V'/r 递增(递减)，则 $ru_{0,\ell}(r)/u_{0,\ell+1}(r)$ 递增(递减)；

(iii) 求和规则(已在本节用到过)

$$(E_{n,\ell}-E_{n',\ell'})\int u_{n,\ell}u_{n',\ell'}\mathrm{d}r = \frac{(\ell-\ell')(\ell+\ell'+1)}{2\mu}\int \frac{1}{r^2}u_{n,\ell}u_{n',\ell'}\mathrm{d}r,$$

其中 μ 是粒子的约化质量；

(iv) 求和规则(已在 2.1 节引用)：若 $|\ell-\ell'|\leqslant 1$，则

$$\mu(E_{n,\ell}-E_{n',\ell'})^2 D_{n,\ell}^{n',\ell'} = \int \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}u_{n,\ell}u_{n',\ell'}\mathrm{d}r;$$

(v) 一个事实：若

$$f(v) = \int r^v\rho(r)\mathrm{d}r,$$

则 $f(v)$ 的零点数目小于或等于 $\rho(r)$ 的零点数目.

以一种简化形式表达，结果如下：

(1) $D_{0,\ell+1}^{1,\ell}$ 不可能为零，且如果我们确定波函数在原点附近是正的，则它为负.

(2) 如果 $(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$ 是递增的(递减的)，则 $D_{0,\ell}^{1,\ell+1}>(<)0$；

若 V 是谐振子势，则 $D_{0,\ell}^{1,\ell+1}=0$.

(3) 如果

$$V=\int_{-3/2}^{-1}\epsilon(\alpha)\rho(\alpha)r^\alpha\mathrm{d}\alpha$$

或如果

$$V=\int_1^2\rho(\alpha)r^\alpha\mathrm{d}\alpha,$$

其中

$$\epsilon(\alpha)=\alpha \text{ 的符号},$$
$$\rho(\alpha)\geqslant 0.$$

则 $D_{0,\ell+1}^{2,\ell}\neq 0$；反之，对于位势

$$V=\epsilon(\alpha)r^\alpha$$

存在一个 α 的值

$$-1<\alpha<+1,$$

使得

$$D_{0,\ell+1}^{2,\ell}=0.$$

(4) 对于

$$V = \int_{-1}^{+1} \epsilon(\alpha)\rho(\alpha)r^{\alpha}\,\mathrm{d}\alpha$$

有 $D_{0,\ell}^{2,\ell+1} \neq 0$. 这或许是自夸克偶素的属于此类的现有的势模型提出以来,最有趣的非平凡性质.

2.5　能级排序结果的相对论推广

在前面的几节里,我们得到了许多属于不同量子数 n 和 ℓ 的能量本征值的能级排序结果,以及薛定谔方程纯角向激发的一些不等式,其中 n 表示径向波函数的节点数,ℓ 表示轨道角动量. 我们常被问及的一个问题是:以上结果在考虑了相对论效应后将会如何?我们业已讨论了在一阶微扰论中计及相对论修正时多重态的分裂,下一个将要处理的情况是 Klein-Gorden 方程和 Dirac 方程. 首先,非常清楚的是,并非所有的不等式都可以得到推广. 对其中某些,即在薛定谔方程的纯库仑势情况下变为等式的那些不等式,如果利用了 Klein-Gorden 方程和 Dirac 方程,情况完全改变了. 再者,对含有类矢量位势的 Dirac 方程,能级依赖于主量子数 N、总角动量 J 和 k,其中 $|k| = J + (1/2)$,或等价地,依赖于轨道角动量 ℓ. 本文作者之一(H. G.)曾证明[57],对于库仑势,经过势 V 微扰之后对 k 的简并按下列方式解除:

$$E(N,J,-k) \gtrless E(N,J,k), \quad \text{若 } \Delta V \gtrless 0 \quad \forall\, r>0, k>0. \tag{2.235}$$

例如,按谱学符号,这意味着,如果对一切 $r>0$ 有 $\Delta V>0$,则 $N\mathrm{s}_{1/2}$ 能级要高于 $N\mathrm{p}_{1/2}$ 能级. 然而,这一结果仅仅是建立在一阶微扰论之上的,而且没有任何不等式把具有相同的 N 但不同的 J_S 的能级联系起来. 对纯库仑势情况我们知道,对固定的 N,能级随 J 增加而递增.

有一个由 Palladino 和 Leal-Ferreira 得到的,针对标量和矢量势等量混合的特殊情形的结果[106],但这并未告诉我们,在类矢量型的纯库仑势邻域,结果将是怎样的.

我们首先讨论对于 Klein-Gordon 方程

$$(p^2 + (m+S)^2 - (E-V)^2)\psi = 0 \tag{2.236}$$

的一些结果,之后转向 Dirac 方程情形. 对于纯库仑势情形,$S=0$,$V=-(Z\alpha)/r$,且 $Z\alpha<1/2$,我们清楚地知道它的解,因为式(2.236)中的 V^2 可以合并归结到约化径向方程的离心项中:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} + m^2 - E^2 - 2E\frac{Z\alpha}{r}\right)u = 0, \tag{2.237}$$

其中

$$\left(\ell' + \frac{1}{2}\right)^2 = \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2. \tag{2.238}$$

因此,式(2.237)看起来像库仑势下的薛定谔方程,我们得到能级

$$E(n,\ell) = \frac{m}{\sqrt{1 + \dfrac{(Z\alpha)^2}{\left(n + \dfrac{1}{2} + \sqrt{\left(\ell + \dfrac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}\right)^2}}}. \tag{2.239}$$

这里 E 表示总能量.由式(2.239)我们看出,对固定的 $N = n + \ell + 1$ 能量 E 随 ℓ 的增加而递增.

在陈述关于能级排序的结果之前,我们注意到能级依然可以用 n 和 ℓ 标记,且平凡的排序性质

$$E(n+1,\ell) > E(n,\ell) \quad 和 \quad E(n,L) > E(n,\ell), \quad 对\ L > \ell \tag{2.240}$$

保留了下来.只要 $V \leqslant 0$ 和 $E(n,\ell) > 0$,它们的确都是满足的.于是 Klein-Gordon 方程中的 u,即约化波函数的系数,是 E 的单调函数,而这足以证明式(2.240)的第一个不等式.第二个不等式由应用于 $\mathrm{d}E/\mathrm{d}\ell$ 的 Feynman-Hellmann 定理以及 $(E - V)$ 的正定性得出.

下面,我们将在方程式(2.236)中取 $S = 0$,但正如将在稍后指出的,某些结果对 $S > 0$ 亦成立.

定理 如果 $\Delta V(r) \leqslant 0, V(r) < 0$ 及当 $r \to \infty$ 时 $V(r) \to 0$,且 $\lim\limits_{r\to 0} rV(r) > -1/2$,则我们可得严格不等式

$$E(n,\ell) < E(n-1,\ell+1). \tag{2.241}$$

我们通过将 Klein-Gordon 方程看成依赖于一个参数 E 的薛定谔方程:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + m^2 - E^2 + (2VE - V^2)\right)u = 0 \tag{2.242}$$

来证明它.在所做的假定(我们将问题严格限定在正能态)之下,有效位势 $2VE - V^2$ 的拉普拉斯算符作用是负的,因为

$$\Delta V^2 = 2\left(V\Delta V + \left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)^2\right). \tag{2.243}$$

现在,因 $\Delta V < 0, V < 0$,所以在 $r \to 0$ 时 rV 有负的极限,这就意味着,有效势具有一个 $-1/r^2$ 奇异性.在文献[56]中我们的一般结果可拓展到满足 $\lim\limits_{r\to 0} r^2 V(r) > -1/4$ 的位势,从而可以应用.另一方面,式(2.242)对能量的非线性依赖性可以用不动点论证加以克服.

该结果的弱点在于,没有 $\Delta V \geqslant 0$ 情形的对应结果.为绕过此困难,我们采用类似于用在式(2.237)～式(2.239)中的一种做法,即将位势的一部分转移到角动量项.类似于库仑情形,我们定义

$$-Z\alpha = \lim_{r\to\infty} rV(r), \tag{2.244}$$

并且保持 ℓ' 的定义式(2.238).那时 Klein-Gordon 算符变成

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} + m^2 - E^2 + \tilde{V}\right), \tag{2.245}$$

其中

$$\tilde{V} = 2EV - V^2 + \frac{(Z\alpha)^2}{r^2}.$$

接着,可以证明如下引理.

引理　如果 $\Delta V \gtrless 0 \forall\, r > 0, V(r) < 0, \lim_{r\to\infty} rV(r) = -Z\alpha$,则

$$\Delta\tilde{V} \gtrless 0 \quad 和 \quad V^2 \gtrless (Z\alpha)^2/r^2. \tag{2.246}$$

在变换变量 $\tilde{E}(n,\ell') = E(n,\ell)$ 之后,我们便可以表述一个双向定理如下.

定理　若 $\Delta V \gtrless 0, V < 0, \lim_{r\to\infty} rV(r) = -Z\alpha > -1/2 - \ell$,则有

$$\tilde{E}(n,\ell') \gtrless \tilde{E}(n-k,\ell'+k). \tag{2.247}$$

评注　当 $\Delta V \leqslant 0$ 时,该定理的一个先决条件是,Klein-Gordon 方程有意义,即 $\lim_{r\to 0} rV(r) > -1/2 - \ell$.

可以直截了当地将该结果转化成变量 ℓ:

$$E(n,\ell) \gtrless E(n-k,\ell+\Delta(\ell,k)),$$

其中

$$\sqrt{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2} + k = \sqrt{\left(\ell+\Delta+\frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}. \tag{2.248}$$

一般地,当 k 为1时 Δ 将不是一个整数.我们有 $0 < \Delta(\ell,k) < k$,且在这样的意义下,式(2.241) 是式(2.247) 的一个推论.的确,对 $\Delta V < 0$ 等,我们有

$$E(n,\ell) < E(n-k,\ell+\Delta(\ell,k)) < E(n-k,\ell+k), \tag{2.249}$$

这是因为能量相对于角动量具有单调性,而该单调性对于具有负位势的 Klein-Gordon 方程依然成立,原因是

$$\frac{\mathrm{d}E(n,\ell)}{\mathrm{d}\ell}\langle E - V\rangle = \left(\ell+\frac{1}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle. \tag{2.250}$$

我们注意到,在许多情况下 $\Delta(\ell,k)$ 非常接近 k.

若 $Z\alpha < 1/2$(它对 $\ell = 0$ 是必需的),我们将有 $k - 1/2 < \Delta(\ell,k) < k$;而若 $Z\alpha < 1, \ell \geqslant 1$,我们则有 $k - 0.4 < \Delta(\ell,k) < k$.

利用这些评注,我们可将式(2.247) 变换成一个仅与物理角动量有联系的结果.若 $\Delta V > 0, V < 0, \lim_{r\to\infty} V(r)r > -1/2$,则

$$E(n,\ell) > E(n-k,\ell+k+1). \tag{2.251}$$

这难免有些粗糙,并在 V 变为纯库仑势时不能约简到正确的极限.然而,我们可以通过证明 Martin 和 Stubbe 所求得结果[50] 的相对论类似来改进此结果.

定理 若 $\Delta V \leqslant 0, V(r) < 0, \lim\limits_{r\to\infty} rV(r) = -Z\alpha > -1/2 - \ell_1$，则

$$\left(\frac{m^2}{\tilde{E}^2(0,\ell_1')} - 1\right)(\ell_1'+1)^2 > \left(\frac{m^2}{\tilde{E}^2(0,\ell_2')} - 1\right)(\ell_2'+1)^2, \quad \text{对于 } \ell_2' > \ell_1'.$$

若 $\Delta V \geqslant 0, V(r) < 0, \lim\limits_{r\to\infty} rV(r) = -\ell_1 - 1/2$，则

$$\left(\frac{m^2}{\tilde{E}^2(n,\ell_1')} - 1\right)(\ell_1'+1)^2 > \left(\frac{m^2}{\tilde{E}^2(n,\ell_2')} - 1\right)(\ell_2'+1)^2, \quad \text{如果 } \ell_2' > \ell_1'. \tag{2.252}$$

证明涉及一串不等式：初始 Klein-Gordon 方程的位力定理以及与如下事实相结合后修正了的定理，即 $V < 0$ 及 ΔV 具有确定符号：

$$\begin{aligned} E(E - \langle V\rangle) &\gtrless m^2, \quad \text{对于 } \Delta V \lessgtr 0, \\ \langle \tilde{T}\rangle_{n,\ell'} &\gtrless -E\langle V\rangle, \quad \text{对于 } \Delta V \lessgtr 0, \end{aligned} \tag{2.253}$$

其中 $\langle \tilde{T}\rangle_{n,\ell'}$ 是 $-(\mathrm{d}^2/\mathrm{d}r^2) + (\ell'(\ell'+1)/r^2)$ 的期待值. 另外，证明用到了作为依赖 ℓ' 函数的 $\tilde{E}$ 的 Hellman-Feynman 关系：

$$2\langle \tilde{E} - V\rangle \frac{\mathrm{d}\tilde{E}(n,\ell')}{\mathrm{d}\ell'} = (2\ell'+1)\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle, \tag{2.254}$$

以及一个由 Common 建立的，联系薛定谔情形下总动能和角动能关系的不等式

$$\begin{aligned} \langle \tilde{T}\rangle_{n,\ell'} &> \left(\ell' + \frac{1}{2}\right)(\ell'+1)\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{n,\ell'}, \quad \text{对于 } \Delta V > 0, \text{等}, \\ \langle \tilde{T}\rangle_{n,\ell'} &< \left(\ell' + \frac{1}{2}\right)(\ell'+1)\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{0,\ell'}, \quad \text{对于 } \Delta V < 0, \text{等}, \end{aligned} \tag{2.255}$$

最后一个不等式意味着一种不对称性，因为最后一个不等式当 $\Delta V < 0$ 时仅对 $n = 0$ 成立. 而第一个不等式对任何 n 都成立，但在库仑情形时仅对 $n = 0$ 是最优的.

现在，我们可以将式(2.247)、式(2.252) 和 $\ell_1 = \ell + \Delta(\ell,k)$，$\ell_2 = \ell + k$ 联合起来，得到不等式

$$\left(\frac{m^2}{E^2(n,\ell)} - 1\right) < \left(\frac{m^2}{E^2(n-1,\ell+1)} - 1\right)\left[\frac{\frac{1}{2} + \sqrt{\left(\ell+\frac{3}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}}{\frac{3}{2} + \sqrt{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}}\right]^2. \tag{2.256}$$

它只涉及在非相对论极限情形约化为通常形式的物理角动量，并且是对情形 $k = 1$，具有正拉普拉斯算符的位势给出的. 对于负的拉普拉斯算符，我们得到相反的不等式，但它只在 $n = 1$ 时成立. 于是在任何情况下，我们都有式(2.241).

有人可能想知道这些结果的应用范围. 将这些结果应用于 π 原子是很有吸引力的. 然而不幸的是，在此情形下，和 μ 原子情形相反，巨大的扭曲现象并非源自原子核尺寸，而是来自强相互作用，包括被原子核吸收. 夸克偶素也曾由 Kang 和

Schnitzer[107] 利用 Klein-Gordon 方程描述过，但一个纯矢量禁闭作用导致一些亚稳能级.

或许最有趣的结论是，我们找到一种情况，其中从非相对论情形到相对论情形的障碍并非不能逾越.

接下来我们转向 Dirac 情形，在那里我们得到对矢量型库仑相互作用的一阶微扰论[57] 适用的结果，还有一部分有关多重态能级排序的非微扰结果[108].

对于Dirac算符，库仑势再次起着一种特殊的作用.尽管自旋-轨道耦合导致精细结构分裂，能级间某种二重简并依然存在.我们的结果涉及这种简并的分裂.

Dirac-库仑问题的标准处理是相当棘手的.因此利用引发简并的对称性的处理方法更为适当.我们注意到，在我们有关非相对论谱的前述证明中，我们实质上用了超对称方法.此外，出现于薛定谔-库仑哈密顿量因子化过程中的阶梯算符和 Runge-Lenz 矢量有关.存在该矢量对于相对论情形的一种推广.此外，存在非常适合于研究能级分裂的一种超对称因子化.

现在我们开始简要地回顾一下代数因子化方法，它容许我们得到如下相对论库仑哈密顿量的谱和本征函数：

$$H = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{\beta}m - \frac{\gamma}{r}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}. \tag{2.257}$$

这里 c 被取为单位 1，$\gamma = Ze^2$，$\boldsymbol{\sigma}$ 是泡利矩阵，$\mathbf{1}$ 是 2×2 单位矩阵.H 作用于四分量的旋量上，它有着在 $\mathbf{R}^3$ 上平方可积的波函数.我们需要归一化的波函数和属于简并能级的本征函数之间的映射.

用径向坐标将式(2.257) 改写，给出一个 2×2 矩阵算符：

$$h_k = \begin{pmatrix} -\dfrac{\gamma}{r} + m - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \dfrac{k}{r} \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \dfrac{k}{r} - \dfrac{\gamma}{r} - m \end{pmatrix}, \quad h_k \begin{pmatrix} G_k \\ F_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} G_k \\ F_k \end{pmatrix}, \tag{2.258}$$

它作用在二分量波函数上；$k = \pm 1, \pm 2, \cdots$，其中 $|k| = J + 1/2$ 代表算符 $-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ -1 的本征值，该算符与 H 对易.从 (G_k, F_k) 到 $(\tilde{G}_k, \tilde{F}_k)$ 有一个简单的变换[109]：

$$\begin{pmatrix} \tilde{G}_k \\ \tilde{F}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k + s_k & -\gamma \\ -\gamma & k + s_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_k \\ F_k \end{pmatrix}, \quad s_k^2 = k^2 - \gamma^2, \tag{2.259}$$

它容许把式(2.258) 以超对称因子化形式改写.我们引进一阶微分算符

$$A_0^{\pm} = \pm \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \frac{s_k}{\rho} - \frac{\gamma}{s_k}, \quad \rho = E_k r, \tag{2.260}$$

其中指标 k 被隐去了.$\tilde{G}_k$ 和 $\tilde{F}_k$ 满足关系

$$A_0^{+}\tilde{G}_k = \left(\frac{k}{s_k} + \frac{m}{E_k}\right)\tilde{F}_k, \quad A_0^{-}\tilde{F}_k = \left(\frac{k}{s_k} - \frac{m}{E_k}\right)\tilde{G}_k. \tag{2.261}$$

H 的离散谱由 $k=-1,-2,-3,\cdots$ 的独一无二的基态和 $k=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots$ 的一系列二重简并的能级组成.对负的 k,基态由条件 $A_0^-\tilde{F}_k=0,\tilde{G}_k=0$ 得到.这导致

$$\tilde{F}_k=\rho^{s_k}\mathrm{e}^{-\gamma\rho/s_k},\quad E(0,k)=\frac{m}{\sqrt{1+\dfrac{\gamma^2}{k^2-\gamma^2}}},\quad k=-1,-2,\cdots. \tag{2.262}$$

在此能量值,$A_0^-A_0^+$ 没有任何可归一化的解存在.然而,所有 $A_0^-A_0^+$ 和 $A_0^+A_0^-$ 的其他本征态成对出现.它们可由因子化方法[109] 得到,因为有如下形式的一些恒等式:

$$A_n^-A_n^+-\frac{\gamma^2}{(s_k+n)^2}=A_{n+1}^+A_{n-1}^--\frac{\gamma^2}{(s_k+n+1)^2},$$

$$A_n^\pm=\pm\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{s_k+n}{\rho}-\frac{\gamma}{s_k+n},\quad \forall\, n\in\mathbf{N}. \tag{2.263}$$

通过构成 $\tilde{F}_k=A_0^+\cdots A_{n-1}^+\chi_n$ 并且由方程式(2.261) 计算 $\tilde{G}_k$ 得到的解

$$A_n^-\chi_n=0,\quad \chi_n=\rho^{n+s_k}\mathrm{e}^{-\gamma\rho/(s_k+n)} \tag{2.264}$$

求得第 n 个本征函数.G_k 和 F_k 因此可由式(2.259) 求逆得到.它们对应于本征值

$$E(n,k)=\frac{m}{\sqrt{1+\dfrac{\gamma^2}{(s_k+n)^2}}},$$

$$\begin{aligned} &n=0,\quad k=-1-2,\cdots\\ &n=1,2,\cdots,\quad k=\pm1,\pm2,\cdots \end{aligned}\qquad s_k=\sqrt{k^2-\gamma^2}, \tag{2.265}$$

它对于 $n\geqslant1$ 是二重简并的.

下面,我们固定 $n\geqslant1$ 和 $|k|$,并分别记 $G_{\pm|k|}$ 和 $F_{\pm|k|}$ 为 $G_\pm$ 和 $F_\pm$.类似地,我们记 $\tilde{G}_{\pm|k|}$ 和 $\tilde{F}_{\pm|k|}$ 为 $\tilde{G}_\pm$ 和 $\tilde{F}$.注意 $\tilde{F}_{\pm|k|}$ 不依赖于 k 的符号.我们的结果可以引证如下.

定理 哈密顿量 $H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{\beta}m-\gamma/r+\lambda V(x)$ 具有离散谱 $E(n,k,\lambda)$,由 $k=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots$ 来标记,它们是 $-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+1)$ 的本征值,并由关系 $|k|=J+1/2$ 和总角动量量子数 J 相联系,且由 $n=0,1,2,\cdots$ 标记,它们代表 k 固定时态的数目并和径向波函数节点数相联系.对 $n\geqslant1$,我们有 $E(n,k,0)-E(n,-k,0)=0$,以及

$$\lim_{\lambda\to0}\frac{E(n,-k,\lambda)-E(n,k,\lambda)}{\lambda}\gtrless0,\quad \text{若 } \Delta V(r)\gtrless0\,\forall\, r\neq0. \tag{2.266}$$

为证明该定理,我们须确定下式的符号:

$$\Delta E=\frac{\langle G_+|VG_+\rangle+\langle F_+|VF_+\rangle}{\langle G_+|G_+\rangle+\langle F_+|F_+\rangle}-\frac{\langle G_-|VG_-\rangle+\langle F_-|VF_-\rangle}{\langle G_-|G_-\rangle+\langle F_-|F_-\rangle}, \tag{2.267}$$

其中$\langle .|.\rangle$ 代表 $L^2(\mathbf{R}^+,\mathrm{d}r)$ 中的标量积.

还剩下两步.首先,我们必须算出式(2.267)中的归一化积分,然后必须找到联系(G_+,F_+)到(G_-,F_-)的映射.借助一个递推关系,第一个任务由下式完成[57]:

$$\frac{\langle F_\pm \mid F_\pm\rangle + \langle G_\pm \mid G_\pm\rangle}{\langle \widetilde{F} \mid \widetilde{F}\rangle} = \frac{m^2}{s_k E_k^2}\,\frac{1}{(k \pm s_u)(k/s_k \mp m/E_k)}. \tag{2.268}$$

更重要的第二步,是要求出将有一种k符号的态映射到具有相反k符号的态的阶梯算符.通过具体计算,我们发现算符Λ_k在h_k和h_{-k}之间纠缠,其中

$$\Lambda_k = \begin{pmatrix} -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \dfrac{k}{r} + \dfrac{m\gamma}{k} & \dfrac{\gamma}{r} \\ -\dfrac{\gamma}{r} & -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \dfrac{k}{r} + \dfrac{m\gamma}{k} \end{pmatrix} \tag{2.269}$$

且$h_{-k}\Lambda_k = \Lambda_k h_k$.由关系式(2.258)我们得到

$$\begin{pmatrix} G_- \\ F_- \end{pmatrix} = \alpha_k \Lambda_k \begin{pmatrix} G_+ \\ F_+ \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = \sqrt{\frac{k+s_k}{k-s_k}}\,\frac{k}{s_k E_k (k/s_k + m/E_k)}. \tag{2.270}$$

该映射容许ΔE表达式的简化.

采用几个简单的步骤,如分部积分,并利用对纯类库仑势ΔE必须为零的事实,我们得到一个具有确定符号的表达式,倘若位势的拉普拉斯算符具有确定符号的话.

评注　如果我们假设在相对论框架下Hartree近似的有效性,则我们可以从该结果预期,对于碱金属原子以及它们的等电子数序列的分裂有

$$2\mathrm{P}_{1/2} > 2\mathrm{S}_{1/2}, \quad 3\mathrm{P}_{1/2} > 3\mathrm{S}_{1/2}, \quad 3\mathrm{D}_{3/2} > 3\mathrm{P}_{3/2}, \quad \cdots \tag{2.271}$$

这是因为外层电子应在由类点原子核和内部闭壳层电子云产生的位势中运动,后者具有负的拉普拉斯算符作用.

相反的情形发生在μ原子情形,在最朴素的水平上,μ受到原子核的延展型电荷分布的作用,而原子核被认为由不可离解的质子和中子构成.因此由高斯定理知道,该位势的拉普拉斯算符作用是正的.另外,Lamb位移可看成来自具有正拉普拉斯算符作用的有效势的结果,它给出$2\mathrm{P}_{1/2} < 2\mathrm{S}_{1/2}$分裂.与薛定谔情形不同,这个结果依然期待着超出微扰理论的推广.

我们的下一个结果是在原子的情形中:若$\Delta V < 0$,且如果位势是纯吸引的,即$-\gamma/r + \lambda V(r) \leqslant 0$,则对主量子数$N$我们有完整的能级排序,至少对库仑位势附近的微扰是这样的.这就是说,用谱学记号,我们有

$$\begin{aligned} &2\mathrm{P}_{3/2} > 2\mathrm{P}_{1/2} > 2\mathrm{S}_{1/2}, \\ &3\mathrm{D}_{5/2} > 3\mathrm{D}_{3/2} > 3\mathrm{P}_{3/2} > 3\mathrm{P}_{1/2} > 3\mathrm{S}_{1/2}, \end{aligned} \tag{2.272}$$

等等.

新结果是第一行中的第一个不等式,以及第二个不等式链中的第一和第三个不等式,正如我们将要证明的,只要位势$-\gamma/r + \lambda V(r)$是纯吸引和单调递增的(在我们这里的情况,后一条件由假定$\Delta V < 0$所保证),则它们普遍地是对的.其他

不等式取自文献[57].这一次我们将本征值用主量子数 $N=1,2,\cdots$,总角动量 $J=1/2,3/2,\cdots$ 及量子数 $k=\pm1,\pm2,\cdots$.标记.在一般情况下,我们要证明的不等式如下:

$$E_{N,J=L-1/2,|k|}<E_{N,J=L+1/2,-|k|-1}, \tag{2.273}$$

它意味着,对固定的 N 和 L,能量随着总角动量 J 的增加而递增.

文献[50]证明了,在 Dirac 本征值直到 $1/c^2$ 的展开式中,不等式(2.273)当 $\Delta V\leqslant 0$ 时总是成立的,即便位势并非纯吸引势.其原因是分裂等于对薛定谔波函数的下列期待值:

$$\frac{2L+1}{4m^2}\left\langle\frac{\gamma}{r^3}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V(r)\right\rangle_{N,L}. \tag{2.274}$$

若 $\Delta V\leqslant 0$,则用求和规则

$$\left\langle\frac{\gamma}{r^2}+\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}-\frac{2L(L+1)}{r^3}\right\rangle_{N,L}=0 \tag{2.275}$$

可证明该表达式具有确定的符号.

通过添加一个一般位势 V 到 Coulumb 部分而由式(2.256)得到的哈密顿量,其本征值问题可由一个标准步骤[110]化简成两个耦合的常微分方程的方程组:

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\gamma}{r}+\lambda V+m\right)G-F'+\frac{k}{r}F&=E_{N,J,K}G,\\ \left(-\frac{\gamma}{r}+\lambda V-m\right)F+G'+\frac{k}{r}G&=E_{N,J,K}F,\end{aligned} \tag{2.276}$$

其中的 $'$ 代表 $\mathrm{d}/\mathrm{d}r$,$E_{N,J,K}$ 代表正的本征值.

定理 我们对方程式(2.276)中的位势 $W\equiv-(\gamma/r)+\lambda V$ 加上下列一些条件:

C1:W 是纯吸引的,即 $W\leqslant 0$;

C2:W 是对 r 严格单调的,即 $W'>0$;

C3:$\lim\limits_{r\to 0}rV(r)=0$ 且 $\gamma<1$.

那么,$E_{N,J,|k|}<E_{N,J+1,-|k|-1}$.

最后一个条件意味着(不失一般性)库仑奇异性仅出现在 $-\gamma/r$,$\gamma<1$,从而保证了库仑本征值的存在.因 $W\leqslant 0$,我们可得到 G 的一个单独的二阶微分方程:

$$\begin{aligned}&-G''-\frac{W'}{E_{N,J,k}+m-W}G'+\frac{k(k+1)}{r^2}G-(E_{N,J,k}-W)^2G+m^2G\\&-\frac{k}{r}\frac{W'}{E_{N,J,k}+m-W}G=0.\end{aligned} \tag{2.277}$$

对任意的一对 $k=|k|>0$ 和 $-|k|-1$ 做这一步,我们就观察到,类轨道角动量项是相同的.

首先，我们证明，W 的单调性隐含着

$$E_{N,J,|k|} \neq E_{N,J+1,-|k|-1}. \tag{2.278}$$

事实上，假定了

$$E_{N,J,|k|} = E_{N,J+1,-|k|-1} \equiv E.$$

其想法是，构建一个合适的、依赖于“内插”在这两个态之间的某个参数 η 的本征值问题. 基本的技巧是，考虑到能量相同的假定，我们可以在方程式(2.277)的某处取 $E_{N,J,k}$ 作为一个常数. 此外，$1/r^2$ 项的系数 $k(k+1)$，在变换 $|k| \to -|k|-1$ 之下是不变的. 我们将方程式(2.277)代之以依赖一个连续参数 η 的线性本征值方程. 若我们把相应的本征函数标记为 G_η，$\eta = |k|$ 和 $\eta = -|k|-1$，它们满足如下形式的本征方程：

$$\tilde{H}G_\eta - \frac{\eta}{r}\frac{W'}{E+m-W}G_\eta = \epsilon_\eta G_\eta, \tag{2.279}$$

其中

$$\tilde{H} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{W'}{E+m-W}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{k(k+1)}{r^2} - W^2 + 2EW + m^2 \tag{2.280}$$

和

$$\epsilon_\eta = E^2, \quad \text{对于 } \eta = |k| \quad \text{和} \quad \eta = -|k|-1.$$

应该强调，考虑到条件 C3，本征值问题式(2.279)是适定的，而且 $\tilde{H}$ 是一个定义明确的算符. 特别是，有效位势在原点处没有带负号的 $1/r^2$ 奇异性.

现在，我们把 η 看作在 $-|k|-1$ 和 $|k|$ 之间变化的一个参数. 因为 $G_{|k|}$ 和 $G_{-|k|-1}$ 具有相同数目的节点(如参看文献[111])，我们可以发现其值在 $(G_{|k|}, E^2)$ 和 $(G_{-|k|-1}, E^2)$ 之间变化的一条曲线 $\eta \to (G_\eta, \epsilon_\eta)$. 另一方面，Feynman-Hellmann 关系给出

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon_\eta}{\mathrm{d}\eta} = \int_0^\infty \frac{1}{r}\frac{W'}{(E+m-W)^2}G_\eta^2 \mathrm{d}r \Big/ \int_0^\infty \frac{G_\eta^2}{E+m-W}\mathrm{d}r > 0, \tag{2.281}$$

它给出想要得到的矛盾.

现在，假定 $E_{N,J,|k|} > E_{N,J+1,-|k|-1}$. 在这种情况下，我们研究具有位势 W_a 的 Dirac 方程，而 W_a 是如下形式的线性组合：

$$W_a = aW_c + (1-a)W, \quad a \in [0,1],$$

其中 W_c 是使 W_a 满足条件 C1 ~ C3 的另一个库仑势. 然而对纯库仑势情形($a=1$)，$E_{N,J,|k|} < E_{N,-J+1,-|k|+1}$ 是已知的. 因为 W_a 对 a 连续，故有一个临界的 a_0，使得 $E_{N,|k|} = E_{N,-|k|-1}$，且以上论证将适用.

评注 不等式 $E_{N,J,|k|} < E_{N,J+1,-|k|-1}$ 的证明实际上是非微扰的，而且仅用到 W 是单调递增的事实(包括一些光滑性假设). 我们看到关于 $1/c^2$ 展开中能级分裂的预言对完全相对论方程依然成立.

作为推论，考虑到文献[57]的微扰结果，对 $\Delta V < 0$ 的 Dirac 方程我们能得到

完整的能级排序.还要注意,假定 C1 和 C2 均来源于 $\Delta V < 0$ 和 $\lim_{r\to\infty} |rV(r)| < \infty$ 两者的组合.特别是,在一个库仑多重态之内,能量对固定的 L 和递增的 J 是递增的,对固定的 J 和递增的 L 也是递增的.总的来说,趋势和 Klein-Gordon 方程的情形是相同的,在那里,能量随 L 的递增而增加[56].我们所观察到的能级排序的类型,可以在诸如 LiI 等电子系列[53,112] 那样的"单电子系统"的谱中观测到.

2.6 禁闭势的逆问题

以往结果的回顾

在建立了夸克偶素系统中观测到的相关量之间的一系列关系之后,我们可以进一步理想化来研究逆问题.无限远处趋于零的位势的逆问题,在一维和径向对称情形已经很好地得以解决,并有大量有关该主题的文献可以查阅:关于最近的研究请参看 Chadan 和 Sabatier 发表的文章[113].这里我们考虑一种在文献中未加广泛处理的情形.我们假定不仅给定了有限数目的能级和约化波函数在零点的斜率,而且给定了它们的一个无限系列.那时,这个位势可被唯一地确定吗?有没有办法从实验数据重建这个位势?

这样的一个工作已由 Quigg、Rosner 和 Thacker(QRT)[114] 实际着手进行了.他们的工作可以概述如下.首先,他们考虑了相对于原点对称的一维禁闭位势并求解了一个近似问题:他们自己给出了起始的 n 个能级,选取能量零点位于第 n 个和第 $n+1$ 个能级之间的某个地方,然后就如同位势在无限远处趋于零一样求解这个逆问题.求解一维经典问题所需的正能量处的反射系数设为零;那时这个位势可以通过明确地源于一些孤子的纯叠加求得.人们期望通过增加 n 来得到越来越靠近真实势的位势序列;QRT 针对典型位势做了令人印象深刻的数值实验,而且发现了伴随 n 变化的快速收敛性.在他们工作的第二部分,他们处理了径向位势 $V(r)$ 和 S 波,并注意到,当采用约化波函数 $u = r\psi\sqrt{4\pi}$ 时,能级和一个处于一维对称位势 $V(|r|)$ 内部的奇宇称能级相重合.偶宇称能级丢失了,但在另一方面,给出了 $u_i'(0)$ 的值.对小的 i,把丢失的能级和 $u_i'(0)$ 联系起来的代数方程可以数值地解出.

原则上说,还遗留下列一些问题:

(i) 有关 $\ell = 0$ 能级 E_i 和 $|u_i'(0)|^2$ 的无限序列的知识能唯一地确定位势吗?

(ii) 我们能够证明 QRT 手续的收敛性吗?

(iii) 我们能够由那些与奇宇称能级相联系的能级 E_i 和 $u_i'(0)$ 的知识获得偶宇称能级吗?哪些是物理的能级呢?

我们在文献[115]中回答了问题(i)和(iii).而问题(ii)由 Fermilab 小组处理过了[116-117].尽管不存在任何一般性的收敛性证明,但实际手续展示了对于给定位势问题的某种途径.

我们找到了解决问题(i)和(iii)的两种可能性:第一种是最大限度地利用 Gasymov 和 Levitan 以往概括给出的结论[118].这里我们应当提一提关于具有等价谱[119]的位势的最早的一些工作,这些工作之一的离散谱情形已经讨论过了.在那里给出了此类位势的具体构建方案.

文献[118]中讨论了具有"错误"边界条件,即 h 有限的情况下 $u'(r=0)=hu(r=0)$ 的禁闭势唯一性问题,而我们的兴趣在 $u(r=0)=0$.然而,我们将证明如何有可能将我们的问题和另一问题联系起来.

我们曾尝试避免使用在下面的引理和定理中指明的那些较旧的工作,并以可接受的位势应当满足的一个"技术性"的假设为代价取得了成功.

最后,我们就所有基态能量作为角动量的函数给出时的逆问题作一番评论.

由 Gasymov-Levitan 的综述,我们得知如下定理.

定理 设 $u(r,E)$ 为具有如下边界条件的薛定谔方程的一个解,即

$$-u''+(V-E)u=0,\quad u'(0,E)=0,\quad u(0,E)=1. \tag{2.282}$$

现在用

$$(\gamma_i')^{-1}=\int_0^\infty \mathrm{d}ru^2(r,E_i'), \tag{2.283}$$

给定归一化常数 γ_i' 和能量 E_i',则我们可以定义谱密度 $\sigma(E)$:

$$\sigma(E)=\begin{cases}\rho(E), & \text{对于 } E<0,\\ \rho(E)-\dfrac{2}{\pi}\sqrt{E}, & \text{对于 } E>0,\end{cases} \tag{2.284}$$

$$\mathrm{d}\sigma(E)=\mathrm{d}E\sum\gamma_i'\delta(E-E_i'),$$

并能够通过求解核为 K 的 Gelfand-Levitan 积分方程

$$F(r,t)+K(r,t)+\int_0^r \mathrm{d}sK(r,s)F(s,t)=0,$$

$$F(r,t)=\lim_{N\to\infty}\int_{-\infty}^N \mathrm{d}\sigma(E)\cos(\sqrt{E}t)\cos(\sqrt{E}r), \tag{2.285}$$

重建位势,则位势可由下式给出:

$$V(r)=2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}K(r,r). \tag{2.286}$$

唯一性证明 为解答问题(i)和(ii),我们提出研究满足适当边界条件的一个解 $u(r,E)$ 在原点的对数导数.首先我们要确信这样一个解的存在.

引理 假定存在

$$\int_R^\infty \mathrm{d}r\frac{V'^2}{V^{5/2}},\quad \int_R^\infty \mathrm{d}r\frac{V''}{V^{3/2}}\quad \text{对于某些 } R; \tag{2.287}$$

则存在一个方程 $u'' = (V - E)u$ 的解，对所有复值的 E 具有渐进行为

$$u(r,E) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{\exp\left(-\int_R^r \mathrm{d}r' \sqrt{V(r') - E}\right)}{(V-E)^{1/4}} = u_0(r,R). \tag{2.288}$$

证明 解 $u_0(r,E)$ 满足含一个修改势的薛定谔方程. u 的薛定谔方程可以变换成积分方程，其非齐次项恰好是 u_0. 方程式(2.287) 的有限性容许由此得出的核是有界的，从而可证明迭代手续的一致收敛性. 此外，$u(r,E)$ 和 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)u(r,E)$ 具有对 E 的级数展开的各项的解析性质. □

定理 假定 $V(r)$ 是局域可积的，并满足式(2.287). 则

$$R(E) = \left.\frac{\mathrm{d}u(r,E)/\mathrm{d}r}{u(r,E)}\right|_{r=0} \tag{2.289}$$

是一个 Herglotz 函数，并容许以下的表示：

$$-\frac{1}{R(E)} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{|u(0,E_i')|^2}{E_i' - E}, \quad \int_0^\infty \mathrm{d}r u^2(r,E_i') = 1, \tag{2.290}$$

$$R(E) = C + E\sum_{i=1}^{\infty} \frac{|u'(0,E_i)|^2}{E_i(E_i - E)}, \quad \int_0^\infty \mathrm{d}r u^2(r,E_i) = 1, \tag{2.291}$$

其中 E_i' 是非物理的谱，E_i 是物理的谱.

证明 因我们假定了 V 是局域可积的(不幸的是，这排除了库仑位势的情形)，直到下限 $r = 0$ 的积分都是容许的. 对较大的 r 值我们利用以上引理，而对较小的值我们利用 Poincaré 引理得出结论，$R(E)$ 是 E 的亚纯函数. 把式(2.282) 和复共轭组合并求积分，我们得到

$$\frac{\mathrm{Im}R(E)}{\mathrm{Im}E} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r\ |u|^2}{|u(0)|^2} > 0. \tag{2.292}$$

这意味着 $R(E)$ 是一个 Herglotz 函数. 先验地，这样一个函数至多如 $|E|$ 那样增长，而且在 ∞ 处也至多如 $l/|E|$ 那样递减. 它只有一些极点和零点，交错出现在实轴上. 这些零点给出非物理的谱 E_i'，而极点给出物理的谱. 为计算极点处的留数，只需构建解在两个相邻能量处的朗斯基行列式：

$$\begin{aligned} &u'(0,E+\Delta E)u(0,E) - u'(0,E)u(0,E+\Delta E) \\ &= -\Delta E\int_0^\infty \mathrm{d}r u(r,E)u(r,E+\Delta E). \end{aligned} \tag{2.293}$$

对 $E = E_i$，我们得到

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}R^{-1}(E)\right|_{E=E_i} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r u^2(r,E_i)}{u'^2(0,E_i)}, \tag{2.294}$$

以及类似地，对 $E = E_i'$：

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}R(E)\right|_{E=E_i'} = -\frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r u^2(r,E_i')}{u^2(0,E_i')}. \tag{2.295}$$

在继续进一步证明中，我们用到下列引理.

引理　设 V 是局域可积的；则 R 的渐进行为如下式所示：

$$|R(E)+\sqrt{-E}|\to 0,\quad E\to-\infty.$$

其证明参见参考文献[115]的附录A. 主要思想是证明 $E\to-\infty$ 时WKB近似有效. 这个引理分两步可得到证明：第一步针对有下界的 V，然后针对一般情形.

因为当 $E\to-\infty$ 时 $R(E)$ 的行为如同 $-\sqrt{-E}$，我们可以写下对 $-1/R(E)$ 的一个未减除的表示式(式(2.290)) 和 $R(E)$ 的一个一次减除表示式(式(2.291)).

评注　如果我们将式(2.290) 写成一个 Stieltjes 积分，则其测度恰好是式(2.284) 中提及的谱测度. u/u' 完全由 E_i' 及 $|u_i(0)|^2$ 确定而无需减除的事实解释了为何首先要处理此情形. 在我们考虑的量和 Wigner R 矩阵之间有一个准确的类似，它就是通过由 $r=0$ 向上积分至原子核边界而同时我们对薛定谔方程是从 ∞ 向下积分到零求得的 $u(R)/u'(R)$.

该引理说明，减除常数实际上并非自由常数. 现在我们给出求得它的一个具体步骤.

引理　设 V 有下界，并且在大 r 处比 r^ϵ 快而比 r^M 慢地单调趋于无穷. 则方程式(2.291) 中的常数由下式给出：

$$C=\lim_{N\to\infty}C_N,\quad C_N=\sum_{i=1}^{N}\frac{|u'(0,E_i)|^2}{E_i}-\frac{2}{\pi}\sqrt{E'_{N+1}}. \tag{2.296}$$

证明　我们要提及的是，对于波函数和能级的半经典近似将会立即给出式(2.296). 为证明式(2.296)，我们通过计算 $R(E)/E$ 沿半径为 $|E'_{N+1}|$、中心位于原点并包含极点 $E_1,\cdots,E_N$ 的圆 Γ_N 的一个回路积分来计算 $R(0)$. 这给出：

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_N}\frac{\mathrm{d}ER(E)}{E}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{|u'(0,E_i)|^2}{E_i}+C. \tag{2.297}$$

接下来，我们证明对 $|\arg(-E)|<\pi-\epsilon$，其中 ϵ 足够小，以至方程左边接近 $2\sqrt{E'_{N+1}}/\pi$(见文献[115])，$R(E)$ 可由 $\sqrt{-E}$ 来很好地近似. □

我们已经通过具体计算检验式(2.296)，发现了一种非常好的符合，即 $C\sim C_N$，甚至对小的 N 也如此.

定理　设 V 局域可积并满足最后一个引理的假定. 则 $\ell=0$ 束缚态能量 E_i 和 $|u'(0,E_i)|^2$ 唯一地确定了位势.

证明　取前述的常数来固定减除常数式(2.296)；因此方程式(2.291) 中的 $R(E)$ 便确定了. 接着取式(2.290) 的逆，从而给出依照 Gasymov 和 Levitan 的做法来解逆问题所需要的谱测度. □

评注　因我们现在知道，E_i 及 $|u_i'(0)|^2$ 的知识也决定了 E_i'，要求解径向问题，只要证明 QRT 手续在一维和一个对称位势情形的收敛性便足够了.

定理　设 V 满足定理式(2.289) ～ 式(2.291) 的假定；设 $\delta V(r)$ 是一连续函数，其零点对有限的 r 没有聚点，则 E_i 和 $|u'(0)|$ 唯一地确定了位势($\delta V=0$).

证明 设 $u(r,E)$ 和 $v(r,E)$ 是位势为 $V(r)$ 和 $V(r)+\delta V(r)$ 的薛定谔方程的递减解.我们由定理式(2.282) ～ 式(2.286) 得知,u 和 v 二者联系着同一个 $R(E)$.

$$R(E) = u'(0,E)/u(0,E) = v'(0,E)/v(0,E). \tag{2.298}$$

设 r_1 是 $\delta V(r)$ 的第一个零点;那么,把 u 和 v 的朗斯基行列式组合在一起,并利用式(2.298) 给出

$$u(r_1,E)v'(r_1,E) - u'(r_1,E)v(r_1,E) = \int_0^{r_1} \mathrm{d}r\delta V(r)u(r,E)v(r,E). \tag{2.299}$$

对大而负的 E,若推广最后的一个引理到任意的 r,则我们得到

$$u(r,E)/u(0,E) = \exp(-\sqrt{-E}r)(1+O(1)) \tag{2.300}$$

以及 v 的一个类似方程,还有

$$u'(r,E)/u(r,E) \simeq -\sqrt{-E} + O(1). \tag{2.301}$$

我们由式(2.299) 得到

$$\int_0^{r_1} \mathrm{d}r\delta V(r)\frac{u(r,E)v(r,E)}{u(0,E)v(0,E)} = O(\sqrt{-E}\exp(-2\sqrt{-E}r_1)). \tag{2.302}$$

然而,因为 δV,u 和 v 具有恒定的符号,则式(2.302) 的左边对任何的 $0<\alpha<1$ 必然大于

$$\exp(-2\sqrt{-E}\alpha r_1)\int_0^{\alpha r_1} \mathrm{d}r\delta V(r). \tag{2.303}$$

因此若令 E 趋于 $-\infty$ 则给出矛盾,除非对 $0<r<r_1$ 有 $\delta V=0$,我们推论出式(2.299) 的左边等于零.我们可以重复该论证从而证明对 $r_1<r<r_2$ 有 $\delta V=0$,等等. □

评注 我们可以稍微减弱关于 δV 的假设.若 $\int \mathrm{d}r\delta V(r)$ 没有零点的聚点,则论证依然成立,因为对 u 和 v 的估算也适用于高阶导数.

命题 如果两个位势对有限的 r 是有限的,像 r^n 那样趋于无穷,且拥有共同能级 E_m 的一个无穷集合,使得 $\sqrt{E_{m+1}}-\sqrt{E_m}\to 0$,则它们的差 δV 不可能拥有紧致的支集.

证明 假定 δV 具有紧致的支集$[0,R]$,我们在满足边界条件 $u(0,E)=v(0,E)=0$ 及 $u'(0,E)=v'(0,E)=1$ 之下从原点积分薛定谔方程.这会给出

$$\begin{aligned} u'(R,E)v(R,E) - v'(R,E)u(R,E) &= -\int_0^R \mathrm{d}r\delta V(r)u(r,E)v(r,E) \\ &= \Phi(E), \end{aligned} \tag{2.304}$$

其中 $\Phi(E)$ 是 $k=\sqrt{(E)}$ 的阶为1以及指数类型为 $2R$ 的一个整函数.根据对 $k=\pm i\sqrt{E_m}$ 的假设该函数为零,意味着虚轴上无穷渐近密度的一个集合为零.根据已知定理[120],它恒等于零.根据 Paley-Wiener 定理,乘积 $u(r,E)v(r,E)$ 现在可以

写成

$$\int_{-2r}^{2r} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{ikx} w(r,x). \tag{2.305}$$

将式(2.305)代入式(2.304),我们得到

$$\int_0^R \mathrm{d}r \delta V(r) w(r,x) = 0, \tag{2.306}$$

因为 w 的支集性质,它可看成是 δV 的 Volterra 方程,而且因此 $\delta V = 0$. □

由此命题我们推断,改变有限数目的能级将引发扩展到无穷远处的位势的一种改变.对于那个简单情形,Gelfand-Levitan 方程拥有一个简并核,而且对于手头的情况具体的解可以通过应用常规方法得到.

命题 给定一个具有能级 $E_j^{(1)}$ 和归一化常数 $\gamma_j^{(1)}$ 的位势 $V_1(r)$,则一个具有能级 $E_i^{(2)}$ 和归一化常数 $\gamma_i^{(2)}(i = 1,\cdots,M)$,而非 $E_j^{(1)}$ 和 $\gamma_j^{(1)}(j = 1,\cdots,N)$ 的位势 $V_2(r)$ 可由下式给出:

$$V_2 = V_1 - 2\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2 \ln \mathrm{Det}(1 + A), \tag{2.307}$$

其中 A 是一个 $(n + m) \times (n + m)$ 维的矩阵,其矩阵元为

$$A_{ij} = C_i \int_0^r \mathrm{d}r' u_1(k_i, r') u_1(k_j, r'),$$

$$C_i = \begin{cases} -\gamma_i^{(1)}, & i = 1,\cdots,N, \\ \gamma_i^{(2)}, & i = N+1,\cdots,N+M, \end{cases} \tag{2.308}$$

$$k_i^2 = \begin{cases} E_i^{(1)}, & i = 1,\cdots,N, \\ E_i^{(2)}, & i = N+1,\cdots,N+M, \end{cases}$$

而 u_1 表示位势 V_1 的正规波函数.

证明 因为我们使用了逆问题的标准"库",所以我们仅需要非常简略地给出步骤的轮廓.由 Wiener-Boas 定理可推知,对于正规波函数 u_1 和 u_2(对应于位势 V_1 和 V_2)的"Povzner-Levitan"表示,分别为

$$u_i(k,r) = \frac{\sin kr}{k} + \int_0^r \mathrm{d}r' K_i(r,r') \frac{\sin kr'}{k}. \tag{2.309}$$

求解 $\sin(kr)/k$ 的一个方程并将解引入另一个方程中给出

$$u_2(E,r) = u_1(E,r) + \int_0^r \mathrm{d}r' K(r,r') u_1(E,r'), \quad k^2 = E, \tag{2.310}$$

其中新的核 K 是方程式(2.309)中的 K_1 和 K_2 的函数;类似地,我们得出一个倒易关系:

$$u_1(E,r) = u_2(E,r) + \int_0^r \mathrm{d}r' \widetilde{K}(r,r') u_2(E,r'). \tag{2.311}$$

现在,以 $u_1(E,t)$ 去乘式(2.311),然后对 V_2 的谱测度 $\mathrm{d}\rho_2(E)$ 积分,并利用完备性,我们得到

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\rho_2(E) u_2(E,t) u_1(E,r) = 0, \quad \text{对于 } t > r. \tag{2.312}$$

要注意,既然这里所用的谱测度对应于原点处"正确"边界条件 $u_2(E_i,0)=0$,因而它不同于式(2.311)中所用的谱测度.然后,用 $u_1(E,t)$ 乘式(2.310)再对 $\mathrm{d}\rho_2(E)$ 积分,并利用式(2.312)给出

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\rho_2(E)u_1(E,t)u_1(E,r)+\int_0^r\mathrm{d}r'K(r,r')\times\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\rho_2(E)u_1(E,t)u_1(E,r')=0,\quad t<r. \tag{2.313}$$

将恒等式

$$K(r,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\rho_1(E)\int_0^r K(r,s)u_1(E,s)u_1(E,t)\mathrm{d}s,\quad r>t \tag{2.314}$$

加到式(2.313),导致我们获得核为 K 的 Gelfand-Levitan 方程.

$$K(r,t)+F(r,t)+\int_0^r\mathrm{d}r'K(r,r')F(r',t)=0,\quad r>t. \tag{2.315}$$

输入函数 $F(r,t)$ 现在用谱测度给出如下:

$$F(r,t)=\int_0^\infty\mathrm{d}\sigma(E)u_1(E,r)u_1(E,t),\quad \sigma(E)=\rho_2(E)-\rho_1(E). \tag{2.316}$$

□

因为我们想要改变有限个如前所述的常数,σ 可由有限求和

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(E)}{\mathrm{d}E}=\sum_{i=1}^{M}\gamma_i^{(2)}\delta(E-E_i^{(2)})-\sum_{j=1}^{N}\gamma_j^{(1)}\delta(E-E_j^{(1)}) \tag{2.317}$$

给出.对简并核的情形,众所周知,Gelfand-Levitan 方程容许解析解式(2.307)和式(2.308).

为举例说明该手续,我们由线性位势开始,通过改变一到两个束缚态能级计算了 δV(分别由图 2.4 和图 2.5 所示).

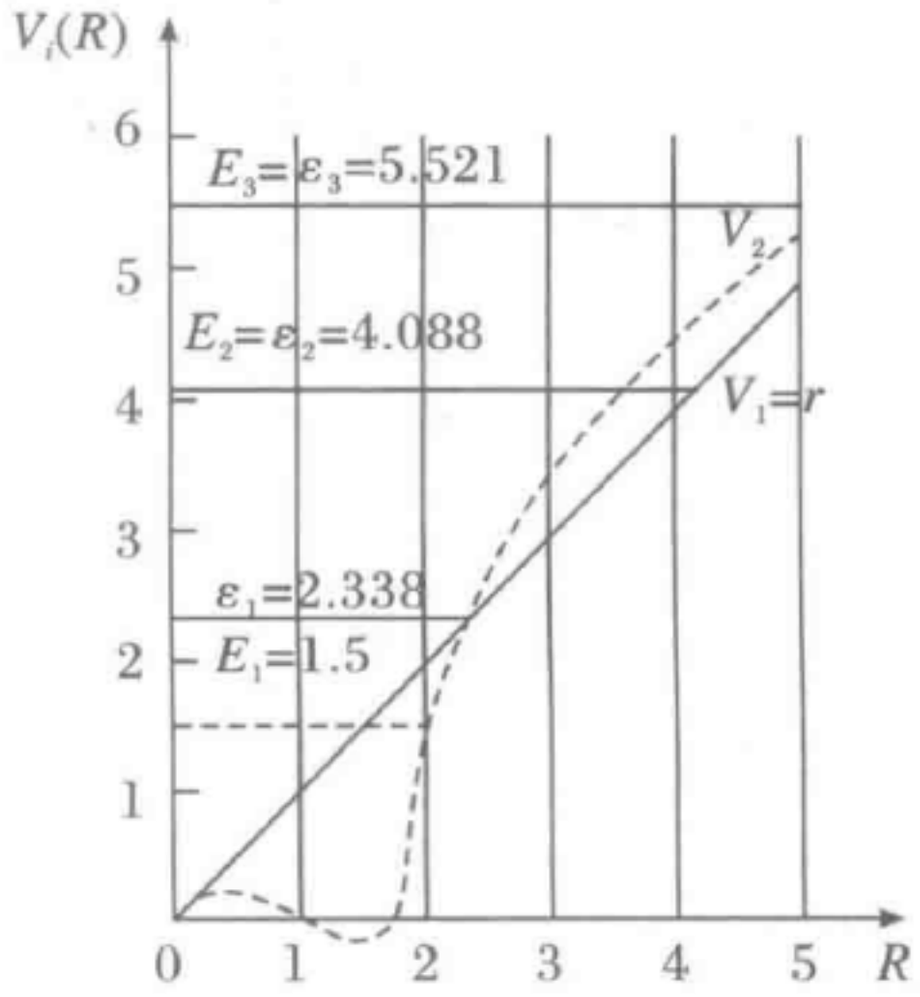

图 2.4 从线性势开始把一个能级由 2.338 改变到 1.5 时位势的变化

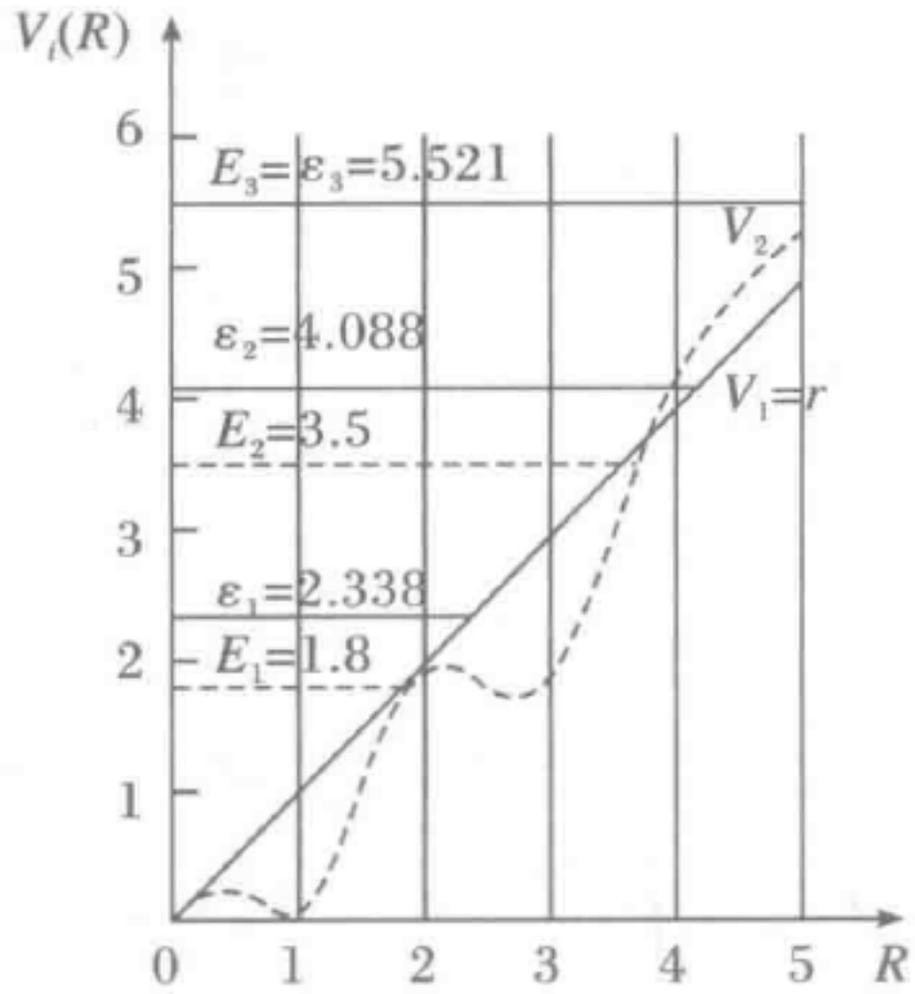

图 2.5　由于改变两个能级导致的位势改变

在转入逆 ℓ 问题之前，提请注意一下，在 WKB 近似框架内，我们已经得到一个给出所有能级的唯一的单调位势.

命题　设 $V(r)$ 单调递增，故逆函数 $r(V)$ 存在，而且所有能级都被给定. 在 WKB 近似之下我们得到：

(a) 对于 S 波情形[114]

$$r(V) = 2\int_{E_{\min}}^{V} \frac{\mathrm{d}E'}{\sqrt{V-E'}} \frac{\mathrm{d}N(E)}{\mathrm{d}E'}; \tag{2.318}$$

(b) 对于三维情形

$$r^3(V) = 6\int_0^V \frac{\mathrm{d}^2 N(E')}{\mathrm{d}E'^2} \frac{\mathrm{d}E'}{\sqrt{V-E'}}. \tag{2.319}$$

证明　(a) 在半经典近似下某个能量 E 之下束缚态的数目为

$$N(E) = \frac{1}{\pi}\int_0^E \mathrm{d}V \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}V} \sqrt{E-V}. \tag{2.320}$$

把 $N(E)$ 对于 E 微商一次，我们得到一个可看成 $r(V)$ 的 Abel 积分方程的表示式，然后求逆；于是给出式(2.318).

(b) 为了在三维情形下类似地证明，我们利用能量 E 以下束缚态总数的著名公式：

$$N(E) \cong \frac{1}{6\pi^2}\int \mathrm{d}^3 x (E - V(r))^{3/2}. \tag{2.321}$$

在文献[121] 中证明了，在强耦合极限下式(2.321) 变成精确等式，其中将 $\lambda V(r)$ 取作位势并取 $\lambda \to \infty$ 极限. 为了反解式(2.321)，对它微分两次，从而再次给出一个 Abel 积分方程.

$$\frac{\mathrm{d}^2 N}{\mathrm{d}E^2} = \frac{1}{6\pi}\int \frac{\mathrm{d}V \mathrm{d}r^3(V)/\mathrm{d}V}{(E-V)^{1/2}}. \tag{2.322}$$

反解式(2.322) 给出式(2.319). □

评注 将式(2.321) 明显地推广到对于能级求和的不同“矩”—— 或确切地说,像 $\mathrm{Tr}\theta(-H)|H|^{\alpha}$ 这样的量——文献[127]中已有讨论:也存在那种类型的如下严格约束:

$$\sum_i |E_i|^{\alpha} \leqslant C_{\alpha}\int \mathrm{d}^3x\, |V_-(x)|^{3/2+\alpha}, \tag{2.323}$$

其中 $|V_-|$ 代表位势 V 的吸引部分的绝对值. 这样的约束导致开创整个一个“行业”,因为人们公认它们对证明“物质的稳定性”(参见 2.7 节) 问题帮助巨大.

$E(\ell)$ 的逆问题

现在我们想讨论一个与禁闭位势有关联的非标准逆问题. 代替由我们自己提供针对给定角动量的一个接一个的能级,我们给出针对所有物理角动量的基态能,$E(\ell)$. 问题是,这是否唯一地确定了位势?对此问题,我们尚不能给出一个完整的回答,但可以汇集若干针对下列猜想的启示.

猜想 禁闭位势由对于全部角动量的系统基态能的知识所唯一确定.

例子 首先我们考察一个特别简单的情形:等间距能级

$$E(\ell) = A + B\ell. \tag{2.324}$$

该问题的一个解是众所周知的. 它就是简谐振子.

$$V(r) = \frac{B^2}{4}r^2 + A - \frac{3B}{2}. \tag{2.325}$$

对该逆问题的这种特解,与 $E(\ell)$ 相联系的约化波函数(在 $B = 2$ 的特殊情形下) 由下式给出:

$$u_\ell(r) = N_\ell r^{\ell+1}\exp(-r^2/2). \tag{2.326}$$

我们将满足于研究 V 的局部唯一性. 设想我们改变位势的一个无穷小量 δV. 则由 Feynman-Hellmann 定理,能级的变化将是

$$\delta E_\ell = \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\delta V\, |u_\ell(r)|^2. \tag{2.327}$$

一个等价的位势 $V + \delta V$ 将是使所有 δE_ℓ 均为零的位势. 问题于是成为一个完备性问题. 由式(2.326) 和式(2.327),令 $r\delta V(r) = W(x)$,$r^2 = x$,我们有

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}xW(x)x^{\ell}\mathrm{e}^{-x} = 0, \quad \forall \ell \in \mathbf{N}. \tag{2.328}$$

根据 Szego 所述[122],系统 $\phi_\ell = x^\ell \mathrm{e}^{-x}$ 是“封闭的”,因而任何具有有限 L^2 范数的函数 $f(x) = W(x)\mathrm{e}^{-x}$ 可以用 $\sum c_\ell\phi_\ell$ 以这样的一种方式来近似,它使得对任意小的 ϵ 都有 $\| f(x) - \sum_\ell c_\ell\phi_\ell \|_2 < \epsilon$. 我们需要对 $W(x)$ 附加一种假设,这可以这样看出来,幂函数 $x^k(k = 0,1,2,\cdots)$ 系统相对于权重 $\exp(-\ln^2|x|)$ 并非完备[123],因为对所有 k:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x x^k \mathrm{e}^{-\ln^2|x|} \sin(2\pi \ln|x|) = 0. \tag{2.329}$$

这意味着，对以上权重而言，借助于多项式实现的、具有任意封闭(close)均方近似的任何一个函数均与 $\sin(2\pi\ln|x|)$ 正交. 该例子是由 Stieltjes 提出的.

若 δV 增长慢于任何指数函数，则可确保 $f(x)$ 有有限的 L^2 范数且定理可适用. 因此条件式(2.328)保证 $\delta V \equiv 0$. 于是我们得到如下命题.

命题　若能级 $E(\ell)$ 是等间隔的，则谐振子位势组成逆问题的一个单独的解.

如果试图推广该结果到其他位势，则首先得到方程组

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r \delta V |u_\ell(r)|^2 = 0, \quad \forall \ell \in \mathbf{N};$$

然而，你将遇到一个非常难的问题，即证明函数 $|u_\ell(r)|^2$ 的集合在某种意义上是完备的；这方面的数学文献少得令人难以置信.

不过我们将试图研究这些函数 $|u_\ell(r)|^2$，并证明如下命题.

命题　设 $V(r)$ 是满足 $r \to \infty$ 时 $V(r)/r^2 \to 0$ 的一个禁闭势. 则与能级 $E(\ell)$ 相联系的，按 $\lim\limits_{r\to 0} u_\ell(r)/r^{\ell+1} = 1$ 归一化的约化波函数 $u_\ell(r)$，对任意固定的 R 满足

$$\lim_{\ell\to\infty} \frac{u_\ell(R)}{R^{\ell+1}} = 1$$

和

$$\lim_{\ell\to\infty} \frac{u'_\ell(R)}{(\ell+1)R^\ell} = 1.$$

证明　我们通过写出下面的积分方程纳入归一化条件：

$$u_\ell(r) = r^{\ell+1} + \frac{1}{2\ell+1}\int_0^r \mathrm{d}r' u_\ell(r')\left(\frac{r^{\ell+1}}{r'^\ell} - \frac{r'^{\ell+1}}{r^\ell}\right)(V(r') - E(\ell)). \tag{2.330}$$

我们定义 R_c 为使等式 $E = V(R_c)$ 成立的最小的 r. 若 $r < R_c$ 则我们由方程式(2.330)有 $u_\ell(r) < r^{\ell+1}$，同时通过迭代得到

$$u_\ell(r) > r^{\ell+1}\left(1 - \frac{E(\ell)}{2\ell+1}\int_0^r \mathrm{d}r' r'\left(1 - \left(\frac{r'}{r}\right)^{2\ell+1}\right)\right), \tag{2.331}$$

因此

$$r^{\ell+1} > u_\ell(r) > r^{\ell+1}\left(1 - \frac{E(\ell)}{2\ell+1}\frac{r^2}{2}\right). \tag{2.332}$$

因为如同我们从 2.3 节的一些考虑看到的：

$$\frac{E(\ell)}{2\ell+1} \to 0 \quad 若 \frac{V(r)}{r^2} \to 0 \quad 对\ r \to \infty,$$

则命题之第一部分得证. 关于 $u_\ell(r)$ 导数的陈述可以通过微分式(2.330)得证. □

评注　我们相信，最后的这个命题表示函数集合 $u_\ell^2(r)$ 在某种意义上，至少在一个有限区间内是完备的. 根据 Müntz 的定理[124]，一个纯的幂 r^{α_n} 的序列当 α_n 在 $n \to \infty$ 时具有有限密度时是完备的. 然而，即便我们成功地证明了有限区间内的完

备性，我们还会存在着让区间向无穷扩展的问题.

然而，我们将采用最后这个结果的另一种完全严格的应用，但是将限制 δV 的可能变化的一般性.

定理 假设能级 $E(\ell)$ 的集合由这样的两个位势 U 和 V 产生，使得 $r \to 0^*$ 时 U/r^2 和 $V/r^2 \to 0$，而 $r \to \infty$ 时 $U(r)$ 和 $V(r) \to \infty$. 此外，如果对 $r > R$，$U - V$ 具有确定的符号，则对于 $r > R$ 有 $U = V$.

证明 考虑一个给定的能级 $E(\ell)$. 分别和位势 U 和 V 相联系的，像最后的命题中那样归一化的波函数是 u_ℓ 和 v_ℓ. 通过与薛定谔方程结合起来，得到

$$u'_\ell v_\ell - u_\ell v'_\ell|_R = \int_R^\infty (V - U) u_\ell v_\ell \mathrm{d}r = \int_0^R \mathrm{d}r u_\ell v_\ell (U - V).$$

假设在 $r > R$ 区间，$V - U$ 有一个固定的符号，它可以选为正的. 那时我们有

$$u'_\ell v_\ell - u_\ell v'_\ell|_R > \int_{(1+\epsilon)R}^{(1+2\epsilon)R} \mathrm{d}r u_\ell v_\ell (V - U), \quad \epsilon > 0. \tag{2.333}$$

对大的 ℓ，最后的这个命题容许我们估计式(2.335)的两边. 左边是 $(2\ell + 1)R^{2\ell+1}$ 阶的，而右边的阶数大于

$$(1 + \epsilon)^{2\ell+2} R^{2\ell+2} \int_{(1+\epsilon)R}^{(1+2\epsilon)R} \mathrm{d}r (V - U),$$

这明显是个矛盾，除非对于 $r > R$ 有 $U = V$.

现在，我们是与一个紧致的区间打交道，并有两种可能性，其一是严格的，另一是不完整的. □

最后的这个定理的推论 另外，如果 $V - U$ 有有限次的符号改变，则 $V \equiv U$.

证明 首先对 R_n 应用该定理，它对应于 $V - U$ 符号的最后一次改变，然后对 R_{n-1} 应用该定理，等等.

赝推论 我们保留最后这个定理的条件. 我们容许我们的条件充分接近 Müntz 定理，相信集合 $u_\ell v_\ell$ 在有限区间上是完备的，并由 $\int_0^R \mathrm{d}r (U - V) u_\ell v_\ell = 0$ 推论出 $U \equiv V$.

这是迄今为止，我们在一个完全严格的基础上所能推进的结果.

现在我们将描述问题的一种半经典处理. 为简单计，假定 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)[r^3(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)] > 0$. 这保证了 $\ell(\ell+1)/r^2 + V(r)$ 具有一个唯一的极小值. 它也意味着，V 是递增的.

我们从纯的经典考虑开始，完全忽略径向动能. 那时 $E(\ell)$ 将会是离心能和势能的极小值.

$$E(\ell) = (\ell + 1/2)^2/r^2 + V(r), \tag{2.334}$$

其中 r 由下式给定：

$$2(\ell + 1/2)^2/r^3 = \mathrm{d}V/\mathrm{d}r, \tag{2.335}$$

---

* 原文此处的 $r \to \infty$ 明显有误. —— 译者

因此 r 是 ℓ 的函数. 我们可以将 $E(\ell)$ 对 ℓ 求微商，利用对 ℓ 的内插并考虑式(2.333)，得到

$$\frac{\mathrm{d}E(\ell)}{\mathrm{d}\ell} = \frac{(2\ell+1)}{r^2} \to r^2 = \frac{2\ell+1}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}\ell}. \tag{2.336}$$

评注　r^2 可以改写成$(\mathrm{d}E(\ell)/\mathrm{d}[\ell(\ell+1)])^{-1}$，按一般的凹性质，它是 ℓ 的一个增函数.

由于已知 r 为 ℓ 的函数，所以也可以从式(2.334) 得到作为 ℓ 的函数的 V：

$$V(\ell) = E(\ell) - \frac{1}{2}\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\mathrm{d}E/\mathrm{d}\ell. \tag{2.337}$$

我们看出，在这个层次上逆问题难以置信地简单. 我们将尝试看一看在何种程度上此类方案可以得到量子力学意义上的合理性证明. 对 ℓ 的内插来说，这不是问题. 在很早以前，这种内插就被 Regge 用过[125]. 我们将在下一节回到这个问题.

式(2.334) 的量子力学类似是

$$E(\ell) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\left(u_\ell'^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u_\ell^2 + V(r)u_\ell^2\right), \tag{2.338}$$

其中我们取 u_ℓ^2 按$\int_0^\infty \mathrm{d}ru_\ell^2 = 1$ 进行归一化. 因此利用著名不等式$\int_0^\infty \mathrm{d}ru^2/4r^2 \leqslant \int_0^\infty \mathrm{d}ru'^2$ 我们得到

$$E(\ell) > \min\left(\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2\Big/r^2 + V(r)\right), \tag{2.339}$$

除了它是一个不等式的事实外，该式非常类似于式(2.334). 式(2.336) 的量子力学类似是

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell} = (2\ell+1)\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{u^2}{r^2}, \tag{2.340}$$

而且若波函数充分集中在有效势的最小值附近，则上式化简为式(2.336). 我们关于位势的条件事实上容许我们做出一个准确的陈述.

命题　用

$$\frac{1}{r_0^2} = \int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{u_\ell^2}{r^2}, \quad V(r_1) = \int_0^\infty \mathrm{d}ru_\ell^2 V(r) \tag{2.341}$$

定义 r_0 和 r_1，并假设

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^3\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right) > 0,$$

则 $r_1 > r_0$.

证明　我们将满足于证明 $r_1 \neq r_0$. 如果 $r_1 = r_0$，则

$$\int_0^\infty \mathrm{d}ru_\ell^2\left(\frac{V(r)-V(r_0)}{V'(r_0)} + \frac{r_0^3}{2}\left(\frac{1}{r^2}-\frac{1}{r_0^2}\right)\right) = 0. \tag{2.342}$$

将花括号称为 $y(r)$，我们看出 $y(r_0) = y'(r_0) = 0$，但是$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^3\,\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}r} > 0$，它保证了

$y(r) \geqslant 0$. 于是 r_0 和 r_1 之间不等式的符号在直观上变得十分明显.

评注 由最后的这个命题,我们得出结论:

$$E(\ell) > V(r_0) + \frac{\ell + \frac{1}{2}}{2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{2\ell+1}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}\ell}}. \tag{2.343}$$

通过利用 $\ell(\ell+1)$ 的凹性质和避免利用非整数的 ℓ,该式可以化为更实用的形式.

我们有

$$\frac{2\ell+1}{2\ell-1}(E(\ell) - E(\ell-1)) > \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell} > \frac{2\ell+1}{2\ell+3}(E(\ell+1) - E(\ell)), \tag{2.344}$$

故我们得到定义和不等式

$$\begin{aligned} &\bar{r}_0 = \sqrt{\frac{2\ell-1}{E(\ell) - E(\ell-1)}}, \\ &V(\bar{r}_0) < E(\ell) - \frac{1}{2}\left(\ell + \frac{1}{2}\right)\frac{\ell + \frac{1}{2}}{\ell + \frac{3}{2}}(E(\ell+1) - E(\ell)). \end{aligned} \tag{2.345}$$

这是一个严格的、或许有用的不等式,但它并未告诉我们多么靠近这个位势.

现在,我们将放弃严格性,尝试用一个谐振子位势去近似等效势 $\ell(\ell+1)/r^2 + V(r)$,并计算零点能. 为了做出此估计,我们利用无量子效应情形确定的位势并计算极小值处的曲率. 这给出

$$\begin{cases} V(r) = E(\ell) - \dfrac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1}\dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell} - \sqrt{\dfrac{V''}{2} + 3\dfrac{\ell(\ell+1)}{r^4}} \\ r^2 = \dfrac{2\ell+1}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}\ell} \\ V'' = -\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\right)^2 + \left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell}\left((2\ell+1)\left(\dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\right)\right)\right)\Big/\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell}\left((2\ell+1)\Big/\left(\dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\right)\right)\right) \end{cases} \tag{2.346}$$

不幸的是,似乎很难获得一个系统的迭代方法来改进这个公式. 事实证明,它对大的 r 给出相当好的结果.

例 取 $E_0 = 2\ell + 3(V = r^2)$. 方程式(2.343) 给出 $V = r^2 + 1$,而方程式(2.346) 给出

$$V(r) = 2r^2 + 2 - \frac{r^{4-\frac{1}{4}}}{r^2} - \sqrt{1 + \frac{3\left(r^4 - \frac{1}{4}\right)}{r^4}} \simeq r^2 + \frac{1}{4r^2} + \cdots$$

因而其中没有常数项.

例 令

$$E = -\frac{1}{4(\ell+1)^2}, \quad V = -\frac{1}{r}.$$

方程式(2.346) 给出

$$V = -1/r + O(1/r^2),$$

而在首项之后，式(2.343)包含一个 $r^{-3/2}$ 贡献.

我们的结论是，从经验上讲，我们改进的半经典手续在获得位势的长距离行为时是出色的，的确可以作为搜寻精确位势的出发点. 但在另一方面，一个提法非常好但困难的数学问题依然存在.

禁闭势的 Regge 轨迹理论

前面我们曾引入了非整数 ℓ 基态能的一种解释. 在2.1节，我们也提到对 ℓ 的凸性. 就角动量复平面上的解析性而言，因为不存在连续谱，禁闭势在某种程度上比通常的位势更简单.

遵照 Regge 的做法[125]，我们可以尝试对于复的 ℓ 且 $\mathrm{Re}\,\ell > -1/2$ 的情况求解薛定谔方程：

$$\left(-\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2 + \frac{\lambda}{r^2} + V(r)\right)u(r) = E(\ell)u(r), \quad \lambda = \ell(\ell+1), \quad u(0) = 0. \tag{2.347}$$

上式乘以 u^*，然后求积分，立即得到

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\left(|u'|^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}|u|^2 + V(r)|u|^2\right) = E(\ell)\int_0^\infty \mathrm{d}r\,|u|^2, \tag{2.348}$$

它意味着，薛定谔方程可归一的解是这样的，它使得

$$\mathrm{Im}\,\lambda\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{|u|^2}{r^2} = \mathrm{Im}\,E\int_0^\infty \mathrm{d}r\,|u|^2, \tag{2.349}$$

因此对实的角动量，E 是实的. 在非禁闭的、迅速递减的位势中，对于实的且足够大的 ℓ，薛定谔方程的解不再是可归一化的，实数性的论证失效了，因而正如人们所皆知的，能量变成复数，或反过来，实的正能量对应于复的角动量.

我们认为，很有必要研究禁闭势内的 Regge 轨迹，因为除了谐振子和库仑情形以及 Yukawa 位势中的数值计算，实际上并没有已知的有关 Regge 轨迹的例子.

问题是，由式(2.347)隐含定义的能量 $E(\ell)$ 是解析的，只要导数

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell} = (2\ell+1)\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{u_\ell^2}{r^2}\Big/\int_0^\infty \mathrm{d}r u_\ell^2 \tag{2.350}$$

存在. 然而除了实的 ℓ 情形没人知道该导数何时存在，因为 $\int_0^\infty \mathrm{d}r u_\ell^2$ 可能为零. 我们所知道的是，如果 $E(\ell)$——或者 $\ell(E)$——在复的 ℓ 平面内有孤立的奇点，则这些奇点不可能是极点或者本性奇点，因为由式(2.349)得知，$\mathrm{Im}\,E/\mathrm{Im}\,\lambda > 0$，或者因 $\mathrm{Re}\,\ell > -1/2$，$\mathrm{Im}\,E(\ell)/\mathrm{Im}\,\ell > 0$.

从现在起，我们将把自己限定在纯幂次势

$$V(r) = r^a. \tag{2.351}$$

这将容许我们利用复的 r 平面. 事实上，以下大多数结果是 Loeffel 和本书作者之

—(A. M.)[81,126] 关于非谐振子工作的一种改写.

对于式(2.351)类型的位势,薛定谔方程的解在大距离处的行为像 WKB 解.可以利用 WKB 解作为出发点来建立一个渐进展开:

$$u_0 = r^{-\alpha/4}\exp\left(-\frac{r^{\alpha/2+1}}{\alpha/2+1}\right)(1+O(r^{1-\alpha/2})), \quad \text{对 } \alpha>2, \tag{2.352}$$

$$u_0 = r^{\ell+1}\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right), \quad \text{对 } \alpha=2, \tag{2.353}$$

$$u_0 = r^{-\alpha/4}\exp\left(-\frac{r^{\alpha/2+1}}{\alpha/2+1}+\frac{E}{2}\frac{r^{1-\alpha/2}}{1-\alpha/2}+O(r^{1-3\alpha/2})\right), \quad \text{对 } \alpha<2. \tag{2.354}$$

在 $\alpha<0$ 情形,随着 α 靠近零,需要越来越多的展开项,如果我们想要 u_0 满足 $\lim_{r\to\infty}(u/u_0)=1$ 的话.

因为除原点之外,位势是 $z=r$ 的解析函数,所以对固定的 ℓ(实的或复的),这个解可以在复的 r 平面上被解析延拓.可以证明该解在如下分支内是递减的,即

$$-\frac{\pi}{2+\alpha}<\arg z<\frac{\pi}{2+\alpha},$$

在此区域内该解的行为类似于式(2.352) ~ 式(2.354)的解析延拓,也就是说,它由 $\exp(-z^{(\alpha/2+1)}/(\alpha/2+1))$ 所支配.

评注(a) 若 $\alpha>2$,两个独立的解行为像

$$z^{-\alpha/4}\exp\left(\pm\frac{z^{\alpha/2+1}}{(\alpha/2)+1}\right),$$

因此 $|u|^2$ 仍然是沿着射线 $\arg z=\pm\pi/(2+\alpha)$ 平方可积的.

我们需要在 $-3\pi/(\alpha+2)<\arg z<3\pi/(\alpha+2)$ 内将解进一步延拓.在分支区间 $\pi/(\alpha+2)<\arg z<3\pi/(\alpha+2)$ 内,u 先验地是如下一些解的一种线性叠加,这些解的渐进行为如同 $u_0=z^{-\alpha/4}\exp(P(z))$,$v_0=z^{-\alpha/4}\exp(-P(z))$,其中 $P(z)=-(z^{\alpha/2+1}/(\alpha/2+1))+(E/2)(z^{1-\alpha/2}/(1-\alpha/2))+\cdots$ 仅包含 z 的正幂次.但是对于 $\pi/(\alpha+2)<\arg z<3\pi/(\alpha+2)$ 有 $u_0/v_0\to\infty$,因此 $|u/u_0|<$ 常数.我们得到下列情形:对于 $|\arg z|<\pi/(2+\alpha)$ 有 $u/u_0\to1$,而对于 $|\arg z|<\min\{3\pi/(2+\alpha),\pi\}$ 有 $|u/u_0|<$ 常数.根据 Montel 定理,我们推论出

$$u/u_0\to1, \quad \text{对于 } |\arg z|<\min\{3\pi/(2+\alpha),\pi\}. \tag{2.355}$$

现在让我们描述一下我们用来建立能级 $E_n(\ell)$ 对 ℓ 或 λ 的解析性的策略.我们已经看到,令人担心的唯一奇点是那些分支点(自然边界可以在经过一番艰难的论证后抛弃,这里从略).为排除这些分支点,首先找到对于复数 ℓ 的相继能级的一个特征性描述.对于 ℓ 实部 $>-1/2$ 的情况,能级由位于正实轴上 $u(r)$ 的零点数目标记.第一步是证明在幅角满足

$$|\arg z|<\min\{\pi,3\pi/(2+\alpha)\}$$

时,对实的 ℓ 不存在其他零点.我们可以证明,对复的 ℓ 仍然有可能用 $\alpha>2$ 情况下

位于 $|\arg z|<\pi/(2+\alpha)$ 区域内，或者满足

$$-\frac{\pi}{2+\alpha}<\arg z<\frac{2\pi}{2+\alpha},\quad \text{对 } \alpha<2,\operatorname{Im}\lambda>0$$

以及

$$-\frac{2\pi}{2+\alpha}<\arg z<\frac{\pi}{2+\alpha},\quad \text{对 } \alpha<2,\operatorname{Im}\lambda<0$$

区域内的零点数来表征这些能级. 我们将证明，在这些区域内沿着复 ℓ 平面从实轴出发并返回实轴且具有 $\operatorname{Re}\ell>-1/2$ 的任何路径的零点数目不变. 这将证明分支点不存在.

第 I 步　$\operatorname{Re}\ell>-1/2$. 沿着复射线 $z=te^{i\phi}$ 写出的薛定谔方程变成

$$\left(-\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right)^2+\frac{\lambda}{t^2}+t^\alpha e^{i(2+\alpha)\phi}\right)u=e^{2i\phi}Eu. \tag{2.356}$$

$$\operatorname{Re}u'u^*=\int_0^t \mathrm{d}t'\left(|u'|^2+|u|^2\left(\frac{\lambda}{t'^2}+t'^\alpha\cos(2+\alpha)\phi-E\cos 2\phi\right)\right), \tag{2.357}$$

$$\operatorname{Im}u'u^*=\int_0^t \mathrm{d}t'(t'^\alpha\sin(2+\alpha)\phi-E\sin 2\phi)\,|u|^2. \tag{2.358}$$

若 $|\phi|<\pi/(2+\alpha)$，则在无穷远处 $u\to 0$，而且式(2.357)和式(2.358)中的积分符号 $\int_0^t$ 可用 $-\int_t^\infty$ 替换. 在此情形我们看到，因为式(2.358)中的被积函数是单调的，我们总可以以这样的方式选择积分限，使得被积函数有恒定的符号. 因此我们得到下列性质.

性质 1　对于 $\operatorname{Re}\ell>-1/2$，在下列区间内：

$$0<|\phi|<\pi/(2+\alpha),$$

u 和 u' 无零点. 现在我们尝试研究 $\pi/(2+\alpha)\leqslant|\arg\phi|$ 情形. 考虑组合

$$\operatorname{Re}(u'u^*)\cos\beta-\sin\beta\operatorname{Im}(u'u^*).$$

如果我们能够找到这样的 β，使得

$$\cos\beta>0,\quad \cos((2+\alpha)\phi+\beta)>0,\quad \cos(2\phi+\beta)<0,$$

则上述组合异于零. 如果同时有

$$|\phi|<3\pi/(\alpha+2),\quad |\phi|<2\pi/\alpha,$$

则可以做到这一点. 因此我们得到下列性质.

性质 2　对于 $\operatorname{Re}\ell>-1/2$ 和 $\alpha\leqslant 4$，在下列区间内：

$$0<|\phi|<\min\{3\pi/(\alpha+2),\pi\},$$

u 和 u' 无零点.

第 II 步　我们取 λ 为复数，如 $\operatorname{Im}\lambda>0$. 则方程式(2.356)变成

$$\operatorname{Im}u'u^*=\int_0^t \mathrm{d}t'\,|u|^2\left(\frac{\operatorname{Im}\lambda}{t'^2}+t'^\alpha\sin(2+\alpha)\phi-|E|\sin(2\phi+\arg E)\right). \tag{2.359}$$

如果 $0<\phi<\pi/(2+\alpha)$，则当 $t\to\infty$ 时积分趋于零.然而，$\sin(2+\alpha)\phi>0$；因此我们断言，$\sin(2\phi+\arg E)>0$.所以，利用连续性，我们得到

$$0<\arg E<\alpha\pi/(2+\alpha),\quad \operatorname{Im}\lambda>0. \tag{2.360}$$

接着，我们证明零点的若干性质.

性质 3 对于 $\operatorname{Im}\lambda>0$，$-\pi/(2+\alpha)<\phi<0$，$u$ 没有零点.

证明 对于在该区间内的 ϕ，式(2.359) 中的被积函数是单调的，因而可以选取积分限为$(0,t)$ 或(∞,t). □

性质 4 对于 $\operatorname{Im}\lambda>0$，$\alpha>2$，$u$ 在下列区间内没有零点：

$$\phi=\pi/(2+\alpha).$$

证明 根据评注(a)，$|u|$是平方可积的，因而我们有

$$\operatorname{Im} u'u^*=\int_0^t \mathrm{d}t'\,|u|^2\left(\frac{\operatorname{Im}\lambda}{t'^2}-|E|\sin\left(\frac{2\pi}{\alpha+2}+\arg E\right)\right)=-\int_t^\infty \mathrm{d}t'\,|u|^2(\cdots). \tag{2.361}$$

再一次，因为被积函数是单调的，所以 $\operatorname{Im} u'u^*$ 不可能为零. □

性质 5 对于 $\operatorname{Im}\lambda>0$，$\alpha<2$，$u$ 在下列区间内没有零点：

$$\phi=2\pi/(2+\alpha).$$

证明 这里，我们只能利用积分限$(0,t)$：

$$\operatorname{Im} u'u^*=\int_0^t \mathrm{d}t'\,|u|^2\left(\frac{\operatorname{Im}\lambda}{|t'|^2}-|E|\sin\left(\frac{4\pi}{2+\alpha}+\arg E\right)\right). \tag{2.362}$$

根据式(2.360) 和条件 $\alpha<2$，我们有

$$\pi<4\pi/(2+\alpha)<\frac{4\pi}{2+\alpha}+\arg E<(4+\alpha)\pi/(2+\alpha)<2\pi,$$

而以上表示式中的被积函数是正的. □

最后，我们注意到以下性质.

性质 6 对足够大的 $|t|$，u 无零点，且

$$|\phi|<\min\{\pi,3\pi/(2+\alpha)\}.$$

证明 这可由在该扇区内 $u/u_0\to 1$ 且 u_0 无零点的评注得知. □

第 Ⅲ 步 对 λ 延拓：我们从 λ 的实部 $>-1/4$ 开始连续变化 λ，而且考虑，如 $\operatorname{Im}\lambda>0$的情形.开始，由性质6我们知道，在$\alpha<4$时角区间为 $|\phi|<\min\{3\pi/(2+\alpha),\pi\}$，和在 $\alpha>2$ 时角区间为 $|\phi|<\pi/(2+\alpha)$ 的情况下，$u(r)$ 只有正实轴 $\phi=0$ 上的零点，零点的数目(不包括 $z=0$) 对第 n 个能级等于 $n-1$.

现在我们区分两种情形：

(i) $\alpha>2$.若取 λ 为复数，则由性质 3 和性质 4 知，在射线 $\phi=\pm\pi/(\alpha+2)$ 上不可能有任何零点，且根据性质6，没有零点可能来自扇区 $|\phi|<\pi/(\alpha+2)$ 内的无穷远处.因零点是 λ 的连续函数，其在扇区 $|\phi|<\pi/(\alpha+2)$ 内部的数目等于原先 $\operatorname{Re}\lambda$ 零点的数目.如果我们返回到 $\operatorname{Re}\lambda$，我们就回到相同的能级，因为零点数目未改变.因此，从 $-\infty$ 切割到 $-1/4$ 的 λ 复平面内没有分支点.

(ii) $\alpha<2$. 我们取，例如，$\mathrm{Im}\ \lambda>0$. 则在 $-\pi/(\alpha+2)<\phi\leqslant 0$ 内没有零点，在射线 $\phi=2\pi/(2+\alpha)$ 上没有零点，而在扇区 $0<\phi<\min\{3\pi/(2+\alpha),\pi\}$ 内的无穷远处也没有零点. 因此，在扇区 $-\pi/(\alpha+2)<\phi<2\pi/(\alpha+2)$ 内的零点数目再一次保持和 $\mathrm{Re}\ \lambda$ 的情况一样，因而继续表征这些能级. 我们再次推论出，$E(\lambda)$ 在从 $-\infty$ 切割到 $-1/4$ 的 λ 复平面内没有分支点存在.

我们得出的结论如下.

定理　在位势 $V=r^{\alpha}$ 中的能级 $E_n(\lambda)$ 可以延拓到复的 ℓ. 函数 $E_n(\ell)$ 在 $\mathrm{Re}\ \ell>-1/2$ 内是解析的.

评注　我们还有性质

$$\mathrm{Im}\ E_n(\lambda=\ell(\ell+1))/\mathrm{Im}\ \lambda>0,$$

它表明 $E_n(\lambda)$ 是个 Herglotz 函数，可写成

$$E_n(\lambda)=A+B\lambda+\frac{\lambda}{\pi}\int_{-\infty}^{-1/4}\frac{\mathrm{d}\lambda'\,\mathrm{Im}\ E_n(\lambda')}{\lambda'(\lambda'-\lambda)},\tag{2.363}$$

其中 $\mathrm{Im}\ E_n>0$. 容易验证这与在2.1节曾提到的 E_n 对于 $\ell(\ell+1)$ 的凹性相符合.

然而，我们有

$$|\arg E|<\alpha\pi/(2+\alpha).$$

若 $\alpha<2$，这意味着 $|\arg E|<\pi/2$. 我们推知 $(E_n(\lambda))^2$ 也是个 Herglotz 函数，故当 $\alpha\leqslant 2$ 时，$E_n(\lambda)$ 至多如同 $\lambda^{1/2}$ 那样递增. 因为 $(\lambda+1/4)^{1/2}=\ell+1/2$，人们禁不住要猜测，当 $\alpha\leqslant 2$ 时 $E_n(\lambda)$ 自己也是个 Herglotz 函数. 然而，我们需要建立 $\mathrm{Re}\ \ell<-1/2$ 时 $E_n(\ell)$ 的解析性，但这是困难的. $\alpha<2$ 时 $E_n(\ell)$ 的 Herglotz 性质和我们关于 $E_n(\ell)$ 对于 ℓ 的凹性命题相符合.

更一般地，$(E_n(\lambda))^{(2+\alpha)/\alpha}$ 是个 Herglotz 函数，因此 $E_n(\lambda)$ 的增长，对大的 ℓ 不能快于 $\ell^{2\alpha/(2+\alpha)}$. 这与方程式(2.82) 相符合. 我们也可以利用 Herglotz 函数是凹函数的事实，得到对于任意 n 有用的限制.

结　论

非常值得将这些结果拓展到幂次的叠加，至少在正的权重情形. 然而，这正是我们不能处理这些叠加的方案的弱点，因为在复 z 平面上各种临界线随 α 而变.

2.7　束缚态的计数

动机-历史

一般而言，多体问题是不容易处理的. 但是至少有一些问题可以通过研究相关

的非线性单体问题得到处理. 这点特别适用于所谓的“物质稳定性” 问题. 该问题是:为何一个以库仑力相互作用的 N 粒子体系是稳定的[5-6]?或者换一种说法:对于 $N \to \infty$ 每单位粒子的基态能会收敛于一个有限的极限吗?让我们首先引用多体哈密顿量

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_j^2}{2m} + \sum_{i<j}^{N} \frac{e_i e_j}{|x_i - x_j|}. \tag{2.364}$$

我们感兴趣的是费米子的基态能 E_N,它对应具有空间部分 $\psi(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N)$ 的全反对称波函数. 一个非常粗糙的简化论证将是这样的:若 N 个费米子占据体积 V,则可用于单个粒子的体积是 V/N 的量级;设 V 是一个边长为 R 的立方体. 因此特征长度为 $R/N^{1/3}$ 的量级. 根据不确定性原理我们估计出动能是

$$N \cdot \langle p_i^2 \rangle \simeq N \frac{N^{2/3}}{R^2} = \rho^{5/3} R^3, \tag{2.365}$$

其中我们引入了密度 $\rho = N/R^3$,它在 Thomas-Fermi 模型内变成单粒子密度

$$\rho(x_1) = \int \mathrm{d}^3 x_2 \cdots \mathrm{d}^3 x_N \, |\psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N)|^2. \tag{2.366}$$

事实上在 Thomas-Fermi 模型内,动能被密度的 5/3 次矩乘以一个适当的常数所代替:

$$T(\psi) = \left\langle \psi \middle| \sum_{j=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_j^2}{2m} \middle| \psi \right\rangle \geqslant c \int \mathrm{d}^3 x \rho^{5/3}(x). \tag{2.367}$$

为了对一个任意的反对称 ψ 推导式(2.367),我们从哈密顿量 $h_N = \sum_{j=1}^{N} h_j$ 出发,其中 $h_j = \boldsymbol{p}_j^2/2m + V(x_j)$,且单粒子位势选成 $V(x) = -\lambda \rho^{2/3}(x)$. 从变分原理我们推导出有关费米子基态能 E_0^F 的一个上限;通过填充单粒子能级可以得到一个下限

$$-\kappa \int |V(x)|^{5/2} \mathrm{d}^3 x \leqslant \sum e_i \leqslant E_0^F \leqslant \langle \psi | H_0 | \psi \rangle = T(\psi) - \lambda \int \rho^{5/3}(x) \mathrm{d}^3 x. \tag{2.368}$$

式(2.368) 的第一个不等式允许我们推出式(2.367). 这是关键性的一步,它导致整个“产业”,并引发许多尝试去获取这类限制. 更一般地,我们可去寻找加在能级矩上的限制,它们是准经典相空间积分类型的[127]:

$$\begin{aligned} \sum_i |e_i|^\alpha &\cong \int \frac{\mathrm{d}^d x \mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d} |(p^2 + \lambda V)_-|^\alpha \\ &= C\ell_{\alpha,d} \int \mathrm{d}^d x \, |\lambda V_-(x)|^{d/2+\alpha}, \end{aligned} \tag{2.369}$$

$$C\ell_{\alpha,d} = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(\alpha + 1 + d/2)}.$$

在式(2.369) 中我们对所有负能本征值求和. $|V_-(x)|$ 表示 $V(x)$ 的吸引部分的绝对值. 一个简单的移动容许我们计算一个确定能量以下的能级.

我们注意到，准经典极限 $\hbar \to 0$ 通过标度化与强耦合极限相关联. 第一个关于在一维薛定谔问题中束缚态数目的行为由式(2.367) 给出的证明，应归于 Chadan[128]. 作者之一(A. M.)[129] 曾研究了一般的 d 维情形. 进一步的评注涉及不同矩之间的关系. 我们把能量值 $\mathcal{E}$ 以下的束缚态总数记为 $N_{\mathcal{E}}$. 我们得到

$$\sum_j |e_j|^\alpha = \int_{-\infty}^0 \mathrm{d}N_{\mathcal{E}} |\mathcal{E}|^\alpha = -\int_0^\infty \mathrm{d}N_{-\mathcal{E}}\mathcal{E}^\alpha = \alpha\int_0^\infty \mathrm{d}\mathcal{E}\cdot \mathcal{E}^{\alpha-1}N_{-\mathcal{E}}, \quad (2.370)$$

并将零次矩的积分和 α 次矩相联系.

我们应提请注意，对于稳定性问题的完全解，我们还需要势能的一个估计. 一个想法简单的论证如下：正负电荷可能交替分布，近邻之间的平均距离为 $R/N^{1/3}$ 量级. 于是总能的标度行为如下：

$$E_N \simeq \frac{N^{5/3}}{R^2} - \frac{N^{4/3}}{R}, \quad (2.371)$$

在对 R 优化之后，它给出正比于 N 的 E_N. 但是，势能的估计是精细微妙的，因为 $N(N-1)/2$ 项对式(2.364) 有贡献. 有一个静电学不等式

$$\begin{aligned}\sum_{i<j}^N \frac{1}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|} \geqslant \sum_i^N \int \frac{\mathrm{d}^3 x\rho(x)}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i|} - \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 x\mathrm{d}^3 y \frac{\rho(x)\rho(y)}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|} \\ - c_1\int \mathrm{d}^3 x\rho^{5/3}(x) - \frac{N}{2}c_2,\end{aligned} \quad (2.372)$$

其中

$$\int \mathrm{d}^3 x\rho(x) = N,$$

(其中 c_1 和 c_2 是适当的常数)，它容许势能有下界. 我们将不详述技术细节，只是指出式(2.368) 和式(2.372) 一起容许我们证明稳定性结果. 一个式(2.368) 类型的改进约束也将改进稳定性的限制.

式(2.369) 类型的估计的历史可追溯到 1911 年韦尔(Weyl) 处理过的一问题：作为一个算符，我们取区域 $\Omega \subset R^d$ 内具有 Dirichlet 边界条件的负的拉普拉斯算符 $-\Delta_\Omega$. 在 λ 值以下频率 $N_d(\Omega,\lambda)$ 的数目随 λ 递增行为如下：

$$N_d(\Omega,\lambda) \overset{\lambda\to\infty}{\simeq} \lambda^{d/2}|\Omega|, \quad (2.373)$$

其中 $|\Omega|$ 代表区域 Ω 的体积.

若干半经典展开已在文献中得到处理并为人所熟知. Kac 曾问道，人们能否可听出一个鼓的形状? 一个简单的论证表明，正比于 m^2 的频率 λ_m 肯定来自一个圆形鼓. 我们展开 $-\Delta_\Omega$ 的热核的迹如下：

$$\mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{t\Delta\Omega} = \sum_m \mathrm{e}^{-\lambda_m t} \overset{t\searrow 0}{\simeq} \frac{c_0|\Omega|}{t} + \frac{c_1 L}{t^{1/2}} + c_2 + \cdots, \quad (2.374)$$

它带有一些已知的常数 $c_0, c_1, c_2, \cdots$. 在这里，$|\Omega|$ 代表鼓的面积，L 代表这个二维区域的边界长度，而 c_2 由 Euler 示性数决定：若所有频率已知，鼓面上洞的数目就确定了. 通常，$|\Omega|$ 和 L 由等周不等式 $|\Omega| \leqslant L^2/4\pi$ 相联系. 若鼓是圆的，该不等式

变为等式.这在实质上证明了该逆问题对于一个圆区域情形下的唯一性.普遍的逆问题要复杂得多,还没有被一般性地解决.

一维势问题的展开式(2.374)的类似情况也值得一提:为简单计,我们处理定义在一个有限区间$[0,L]$上的哈密顿量$H=-\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2+V(x)$,以便$H$具有离散谱.展开式变为

$$\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-tH}\overset{t\searrow 0}{\cong}\frac{1}{\sqrt{t}}\sum_{n=0}^{\infty}c_n t^n I_n, \tag{2.375}$$

其中I_n是$V(x)$及其导数的函数:$I_1=\int_0^L \mathrm{d}xV(x)$,$I_2=\int_0^L \mathrm{d}xV^2(x)$,$I_3=\int_0^L \mathrm{d}x(V^3+V_{,x}^2)$,…,以及一些已知常数$c_n$.因为在$K\mathrm{d}V$流作用下$H$的谱是左不变的,函数$I_n$也是不变的,并和$K\mathrm{d}V$方程更高阶守恒量相关联.

我们可以添加有关氢原子稳定性的一个有趣评注.我们从一些讲义中得知,不确定性原理"证明"了氢原子是稳定的.对$h=-\Delta-\alpha/r$,谱的下确界是有限的.不确定性原理只证明了,动量算符均方差Δp乘位置算符均方差Δx的积是有下界的:

$$\Delta p\Delta x\geqslant\frac{3\hbar}{2}, \tag{2.376}$$

但有趣的是注意到,仅用式(2.376)没有办法证明$\langle\psi|H|\psi\rangle$有下界.容易构造一个试探函数序列,它确保式(2.376)但导致趋于$-\infty$的H期望值.我们取50%维持在一个半径为R的大球面上,而50%维持在一个半径为ϵ的小球面上的波包;则$\langle x^2\rangle\approx R^2/2$但$\langle 1/r\rangle\approx 1/2\epsilon$.当$\epsilon$趋于零时,$H$的期待值$\langle H\rangle\approx 2/R^2-\alpha/2\epsilon$将趋于$-\infty$,而且$\epsilon$和$R$互不关联.这表明我们需要一个"更好的不确定性原理",它允许证明稳定性.由Sobolev于1938年给出的不等式允许人们做到这一点.它容许动能被密度的某个矩所约束

$$s^{2/3}\int \mathrm{d}^3x\,|\nabla\psi(x)|^2\geqslant\left(\int \mathrm{d}^3x\,|\psi(x)|^6\right)^{1/3},\quad s=\frac{4}{3\sqrt{3}\pi^2}\simeq 0.078\,0. \tag{2.377}$$

有关式(2.377)和Sobolev常数s的求值的更多细节将在附录C中给出.这里我们引用一点,即利用式(2.377)允许我们获得氢原子基态能量的一个有限下界.

$$\inf\left\langle\psi\middle|\left(-\Delta-\frac{\alpha}{r}\right)\psi\right\rangle\geqslant\inf\left\{s^{-2/3}\left(\int|\psi|^6\right)^{1/3}-\alpha\int\frac{|\psi|^2}{r}\right\} \tag{2.378}$$

它是有限的.实际数值为$-1.3\mathrm{Ry}$,它与精确值有30%的差别.

对于一个属于L^p类且$p>3/2$的势,关于$H=-\Delta+V(x)$的一个非平庸下界曾由作者之一(H. G.)得到:

$$H=-\Delta+V\geqslant -c_p\|V\|_p^{2p/(2p-3)},\quad p>3/2, \tag{2.379}$$

其中常数c_p由下式给出:

$$c_p = \Gamma\left(\frac{2p-3}{p-1}\right)^{\frac{2p-2}{2p-3}}\left(\frac{p-1}{p}\right)^2(4\pi)^{-\frac{2}{2p-3}}.$$

式(2.379)的约束表明,一个在原点像 $V(r)\overset{r\searrow 0}{\simeq}-1/r^{(2-\varepsilon)}$ 且 $\varepsilon>0$ 的位势的行为给出具有下界的哈密顿.

导致式(2.377)的论证和 Hölder 不等式结合在一起给出一个允许排除束缚态的判据[130].

能量泛函可以被约束为

$$\begin{aligned} E(\psi) &= \frac{\int \mathrm{d}^3x(|\nabla\psi|^2 + V(x)\,|\psi(x)|^2)}{\int \mathrm{d}^3x\,|\psi(x)|^2} \\ &\geqslant \frac{\left(\int \mathrm{d}^3x\,|\psi|^6\right)^{1/3}}{\int \mathrm{d}^3x\,|\psi|^2}\left(s^{-2/3} - \left(\int \mathrm{d}^3x\,|V_-(x)|^{3/2}\right)^{2/3}\right) \end{aligned} \tag{2.380}$$

因此,若 $s\int \mathrm{d}^3x\,|V_-|^{3/2}(x)$ 小于 1,则束缚态被排除.

局域束缚态

存在一些帮我们获得对若干情形深刻见解的一般结果.

譬如,让我们假设有两个位势 V_1 和 V_2,它们的关系为,对所有的 x,$V_1\geqslant V_2$. 那时,第一个问题中某个能量 E 之下束缚态的数目将不会超过第二种情况下束缚态数目:$N_E(V_1)<N_E(V_2)$. 这可以通过取第一种情形的真实本征函数作为第二种情形的试探函数,从极大极小原理(式(2.7))得出. 作为一个应用,我们将 $V_1(x)=V(x)$ 的势问题和另一个仅仅考虑 V 的吸引部分,即 $V_2(x)=-|V_-(x)|=+V(x)\theta(-V)$ 的势问题相比较. 那么很清楚,$V_2\leqslant V_1$,以及 $N_E(V)\leqslant N_E(-|V_-|)$.

另一个例子通过取 V_1 为半径 R 内的某个球对称吸引势,而在外部设 V_1 为无穷大而给出,这意味着取 Dirichlet 边界条件. 在半径 R 内,取 V_2 恒等于 V_1,但在外部取常数值(我们可以将其赋值为零). 那么,如果 n_0 代表具有零角动量的束缚态的数目,则 $n_0(V_1)<n_0(V_2)$,但还有 $n_0(V_2)-n_0(V_1)\leqslant 1$——因为束缚态数目等于适当能量所对应的波函数的节点数目.

有许多方法可用来估计将会有多少束缚态. 它在很大程度上依赖于维数. 一些例子如下.

我们提到过,任何满足$\int \mathrm{d}xV(x)$ 为负的一维薛定谔算符 $-\Delta+V(x)$,至少有一个束缚态. 这可以通过取一个高斯型试探函数 $\varphi_\lambda=\lambda^{1/2}\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 并观察$\langle\varphi_\lambda|\Delta\varphi_\lambda\rangle$和$\langle\varphi_\lambda|V\varphi_\lambda\rangle$的标度行为来证明. 有关对该位势求积分的条件是必要的. 具有

$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}xV(x) > 0$ 但并没有一个束缚态的反例，由这样的两个 δ-函数之和给出：$V(x) = -\lambda\delta(x+R) + \mu\delta(x-R), \lambda > 0, \mu > 0$，但是 $\mu > \lambda$. 如果 λ 足够小(依赖于 R)，则没有束缚态存在.

在二维情形有一个类似的结果. 任何具有 $\iint \mathrm{d}x\mathrm{d}yV(x,y) < \infty$ 的二维薛定谔算符 $-\Delta + V(x)$，至少有一个束缚态. 我们再次取一个试探函数，这一次其形式为 $\mathrm{e}^{-\lambda r^{\alpha}}$. 我们得到基态 E_0 的一个上限，它的形式为

$$N = T + V, \tag{2.381}$$

$$E_0 \leqslant \frac{N}{D}, \quad T_{\lambda,\alpha} = \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\, r\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{e}^{-\lambda r^{\alpha}}\right)^2,$$

$$V_{\lambda,\alpha} = \int_0^{\infty} \mathrm{d}r \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\mathrm{d}\theta}{2\pi} V\mathrm{e}^{-2\lambda r^{\alpha}},$$

$$D_{\lambda,\alpha} = \int \mathrm{d}r\, r\mathrm{e}^{-2\lambda r^{\alpha}}.$$

对于 $\lambda \to 0$，当 $0 < \alpha < 2$ 时，$V_{\lambda,\alpha}/D_{\lambda,\alpha}$ 一致地趋于 $\iint \mathrm{d}x\mathrm{d}yV$. 通过一种变量代换，$T_{\lambda,\alpha}/D_{\lambda,\alpha}$ 等于 $\alpha\int_0^{\infty} \mathrm{d}u\, u\mathrm{e}^{-2u}$，而且通过取足够小的 α 能够让它任意小.

在讨论允许对束缚态计数的方法以前，我们提醒读者在式(2.3) ～ 式(2.5) 中做的、有点令人奇怪的评注. 即便位势在无穷远处趋于零(但振荡着)，依然可能存在一个嵌在连续谱内的正能束缚态.

这只能发生在位势在无穷处振荡的情况下. 我们指出，如果在无穷处位势是有界变化的，或者是在 $\int_R^{\infty} V(r)\mathrm{d}r < \infty$ 的意义上是绝对可积的，则没有正能束缚态存在.

为证明这点，我们定义量 $y = u'^2 + (E - V)u^2$，并由薛定谔方程推出 $y' = -u^2\mathrm{d}V/\mathrm{d}r$. 我们考虑四种情形：

(a) 若超过 r 的某个值(记为 R) 以后有 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r < 0$，则 y' 对所有 $r \geqslant R$ 都为正. 我们也可以假定 $y(R)$ 是正的，因为 V 趋于零且 $E > 0$. 因此，$y(\infty) \neq 0$，它意味着没有束缚态存在.

(b) 若 r 超过 R 时有 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r > 0$，我们估计对某个 $\varepsilon > 0$，因为 $V \to 0$，故

$$\frac{y'}{y} = -\frac{u^2\mathrm{d}V/\mathrm{d}r}{u^2(E-V) + u'^2} \geqslant -\frac{\mathrm{d}V/\mathrm{d}r}{E-\varepsilon}. \tag{2.382}$$

我们积分式(2.382)，并得到 $\ln(y(\infty)/y(r)) > -(V(\infty) - V(r))/(E-\varepsilon)$，它再一次证明了这个断言.

(c) 若 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r$ 变符号，我们将 $|\mathrm{d}V/\mathrm{d}r|$ 代入以上估计中，这涵盖了一种有界变化的情形.

(d) 如果我们仅仅知道$\int_R^\infty |V(r)|\,\mathrm{d}r < \infty$，我们定义$Z = u'^2 + Eu^2$. 则$Z' = u^2 V$. 所以$|Z'/Z| < |V|/E$，并且

$$\frac{Z(\infty)}{Z(R)} > \exp -\frac{1}{E}\int_R^\infty |V(r)|\,\mathrm{d}r > 0,$$

它证明了正能束缚态的不可能性.

如果含局域(标量)位势的一个薛定谔算符有一个基态，则：(i) 它是唯一的，而且(ii) 这个基态的波函数将处处为正.

我们有个证明唯一性的简单论证. 假定有两个基态波函数对应同一能量E_0：

$$(-\Delta + V)\psi_j = E_0\psi_j, \quad j = 1,2. \tag{2.383}$$

我们可以选择ψ_1正交于ψ_2：$\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle = 0$. 如果$\psi_1$处处为正，可以由此推知$\psi_2$必须在某处变符号. 这导致削弱基态必须为正的断言. 我们还得证明最后一个断言：最简单的情形在一维给出. 假定基态波函数$\psi(x)$改变符号. 我们取$|\psi_\varepsilon(x)|$为试探波函数，其中ε代表一个小的光滑手续来绕过对于$|\psi(x)|$所得的边界. 我们因此丢失一个正比于$\delta\langle T\rangle \simeq -\varepsilon \cdot \ell$的对于动能的贡献，其中$\ell$代表我们修正了$|\psi(x)|$的区域的长度，而$\delta\langle V\rangle \simeq |\varepsilon|^2$. 把这两项合起来我们发现，通过取$|\psi_\varepsilon(x)|$为试探波函数我们降低了能量，并且这个函数处处为正. 稍稍改变一下形式，以上论证便可应用到任意维数.

Birman-Schwinger 约束

一个由 Birman 和 Schwinger 提出的有关束缚态数目的某种约束很容易求得，并且常常是有所帮助的(如，参看文献[67])，但是对大的耦合具有错误的强耦合行为. 我们将束缚态的三维薛定谔方程变换成一个积分方程

$$\psi(\boldsymbol{x}) = +\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}^3 y\,\frac{\mathrm{e}^{-\kappa|x-y|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\,|V(\boldsymbol{y})|\,\psi(\boldsymbol{y}), \tag{2.384}$$

其中$-\kappa^2 = E$，而且假定V是纯吸引势. 否则V进入式(2.384)，且$N(V) \leqslant N(V_-)$. 接着我们定义$\phi = \sqrt{V}\psi$，并将式(2.384)变换成具有一个对称核的积分方程：

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}^3 y \underbrace{\left(\frac{V^{1/2}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\kappa|x-y|}\,V^{1/2}(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)}_{K(x,y)}\phi(\boldsymbol{y}). \tag{2.385}$$

代替考虑本征函数作为一个能量函数的依赖性，我们可以把一个耦合常数λ引入式(2.385)，并研究特征值λ_i：

$$\lambda_i\phi_{\lambda_i}(\boldsymbol{x}) = \int \mathrm{d}^3 yK(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\phi_{\lambda_i}(\boldsymbol{y}). \tag{2.386}$$

作为λ_i的函数，本征值单调地移动. 如果它们经过$\lambda = 1$，则它们的确代表原始问题的本征函数. 代替去计数原始问题的零能量以下本征值的数目，我们可等价地计

数大于 $\lambda = 1$ 的特征值 λ_i 的数目.所以,K 的迹,作为诸 λ_i 的和,将给出 N 的上限.因为这个迹被证明是无穷大,我们可以用 Hilbert-Schmidt 模约束 $N < \sum_i \lambda_i^2$,它很容易计算,结果为

$$N \leqslant \int \frac{\mathrm{d}^3 x \mathrm{d}^3 y}{(4\pi)^2} \frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2}. \tag{2.387}$$

还可以证明,若式(2.385) 是有限的,则正能量处的总截面是有限的[131].

“准经典”估计

假如我们用 λV 而不是 V 作为位势,则薛定谔势问题的准经典极限 $\hbar \to 0$ 对应于强耦合极限 $\lambda \to \infty$.如前所提示的(见式(2.369)),我们期望能级的所有矩都将收敛到它们的经典相空间积分.现在的主要问题便是,式(2.369) 类型的不等式在常数可能等于或大于 $C\ell_{\alpha,d}$ 的情况下,是否成立.迄今为止对此问题的综述参见 Blanchard 和 Stubbe 的精彩文章[132].借助 Birman-Schwinger 技术[127],可得到下列结果.

定理 设 $|V_-| \in L^{\alpha+d/2}(R^d)$,且对 $d = 1$ 取 $\alpha > 1/2$,对 $d \geqslant 2$ 取 $\alpha > 0$,或对 $d \geqslant 3$ 取 $\alpha \geqslant 0$.设 $e_j \leqslant 0$ 为 $H = -\Delta + V(x)$ 的负能束缚态.则存在一些有限的常数 $L_{\alpha,d}$ 使得下式成立:

$$\sum_j |e_j|^\alpha \leqslant L_{\alpha,d} \int \mathrm{d}^d x \, |V_-|^{\alpha+d/2}. \tag{2.388}$$

评注 容易看出,对于 $d = 1$ 和 $0 \leqslant \alpha < 1/2$ 不可能存在形如式(2.388) 的约束.考虑如 $v_\epsilon(z) = \theta(\epsilon - |z|)/2\epsilon$ 那样的一个位势:对于 $\epsilon \to 0$,$v_\epsilon(z)$ 趋于一个 δ-函数势,它恰好只有一个束缚态,而相空间积分趋于零.同样的论证表明,三维薛定谔问题的S波束缚态的数目 n_0 不能被模 $\|V\|_{1/2}^{1/2}$ 所约束.Calogero 和 Cohn[133] 曾找到一个解并求得对于单调位势的一种约束:

$$n_0 \leqslant \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}r \, |V(r)|^{1/2}. \tag{2.389}$$

仅仅对于 α 和 d 的一些特定值,已知有式(2.388) 最可能的答案.针对 $d = 3$,$\alpha = 1$ 和 $\alpha = 0$,人们做了许多努力来获取最佳答案.在后一种情形,人们寻找了形如

$$N_3 \leqslant C \int \mathrm{d}^3 x \, |V_-|^{3/2} \tag{2.390}$$

的约束.经典值是 $C\ell_{0,3} = 1/6\pi^2 \simeq 0.016\,9$.人们猜想 Sobolev 常数是最可能的答案:$K = 1/3\sqrt{3}\,(2\pi)^2 \simeq 0.078$.在形如式(2.390) 的一个不等式中,最有名的常数是由 Lieb[134] 提出的:$0.116\,2 \simeq 1.49$ K.对球对称问题,我们将评述我们的约束[135],它给出式(2.390) 中的常数为 0.177 7.Li 和 Yau[136] 得到 0.549 1,而 Blanchard、Stubbe 及 Rezende[137] 得到 0.128 6.

球对称位势的束缚态计数

如果位势是转动对称(为简单计,让我们处理三维情形),则有一个简单方法可以计算束缚态数目.零能波函数将通过它为零的那些位置把半轴线分割为 $n+1$ 部分.该节点定理仅对 $d=1$ 和半轴线问题成立.我们可应用给出式(2.380)的这个不等式到每一个由这些零点决定的区间 $[r_n, r_{n+1}]$,而得到一些不等式,概括起来给出

$$n_\ell \leqslant S_p \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r (r^2 V)^p}{(2\ell+1)^{2p-1}}, \quad p \geqslant 1, \quad S_p = \frac{(p-1)^{p-1}\Gamma(2p)}{p^p \Gamma^2(p)}. \tag{2.391}$$

注意,进入式(2.377)的Sobolev常数和 $S_{3/2}: 4\pi S_{3/2} = s$ 相关联.我们写下计及角动量贡献的推广并应用指标为 p 的 Holder 不等式(见附录 C).对于 $p=1$ 我们得到旧的著名 Bargmann 约束.$p \to \infty$ 给出一个 Courant-Hilbert 的结果.

在文献[135]中,展示了一个不同的束缚态计数方法.让我们考虑一个转动对称问题并研究本征值作为 ℓ 函数的行为:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r)\right) u_{m,\ell}(r) = \varepsilon_{m,\ell} u_{m,\ell}. \tag{2.392}$$

束缚态总数由 $N = \sum_\ell (2\ell+1) n_\ell$ 给出;对固定的 m,有一个 ℓ 的极大数使得第 m 个本征值消失在连续谱中.我们记该值为 ℓ_m,而 $[\ell_m]$ 代表 ℓ_m 的整数部分.现在我们可以计数多重性了:在 $[\ell_m]$ 和 $[\ell_{m-1}]+1$ 之间可数出 $(2\ell+1)\times 1$ 个束缚态;在 $[\ell_{m-1}]$ 和 $[\ell_{m-2}]+1$ 之间可数出 $(2\ell+2)\times 2$ 个束缚态,等等.加起来给出 N 的一个公式,其中没有包含任何近似(对 $d=3$):

$$N_3 = \sum_i ([\ell_i]+1)^2, \tag{2.393}$$

其中 ℓ_i 通过零能薛定谔方程

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell_i(\ell_i+1)}{r^2} - V(r)\right) u_i = 0 \tag{2.394}$$

确定.

众所周知,我们可通过从 (r, u_i) 到 (z, ϕ_i) 的变换 $z = \ln r$ 和 $\phi_i(z) = (1/\sqrt{r}) u_i(r)$,将问题式(2.394)映射到定义在全轴线 $z \in (-\infty, \infty)$ 上的一个问题.我们得到

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - v(z)\right)\phi_i(z) = -\left(\ell_i + \frac{d-2}{2}\right)^2 \phi_i(z), \tag{2.395}$$

其中我们已写出了对任意 $d \geqslant 2$ 成立的一般情形.因为在 $d=3$ 情形我们可以用下式约束式(2.393):

$$N_3 \leqslant 4\sum_i \left(\ell_i + \frac{1}{2}\right)^2 = 4\sum_i |e_i|, \tag{2.396}$$

其中 e_i 是一维哈密顿量式(2.395)的本征值,则对三维求束缚态数目的约束问题就约化为一维时能级一次矩的约束问题.但这可以如文献[135]所描述的那样去完成.总而言之,我们得到下列结果:

$$N_3 \leqslant K\int \mathrm{d}^3 x \mid V_- \mid^{3/2}, \tag{2.397}$$

其中 $K \simeq 0.177\ 7$,它可以和(可能最佳的)答案 0.078 0 相比较.

顺便提一下,我们注意到,式(2.396)在 $d = 4$ 的类似情况给出

$$N_4 \leqslant \sum \mid e_i \mid^{3/2} \leqslant \frac{3}{16}\int \mathrm{d}z v^2(z). \tag{2.398}$$

式(2.398)中的第二个不等式来自一个因其对无反射位势最优而知名的求和规则[138].四维时的约束因此而是最优的.

接着,我们提一下上述程序到 d 维的推广.作为第一步,我们将 d 维势问题束缚态的数目 N_d,与一个一维能级的矩问题关联起来.

对于一个转动不变位势,类似于式(2.392)的约化波函数,满足方程

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{(\ell + (d-1)/2)(\ell + (d-3)/2)}{r^2} - V(r)\right)u(r) = \epsilon u(r). \tag{2.399}$$

每一能级的简并度由 d 维 ℓ 阶调和多项式的数目 $D_\ell = H_\ell - H_{\ell-2}$ 决定,而 d 维 ℓ 阶齐次多项式的数目为

$$H_\ell = \binom{d+\ell-1}{\ell}.$$

现在让我们再次计数多重性.若 ℓ_m 仍代表那个使得第 m 个本征值消失在连续谱中的角动量,则我们得到

$$N_d = \sum_i \sum_{\ell=0}^{[\ell_i]} (D_\ell - \ell) = \sum_i \frac{(d-2+[\ell_i])!(d-1+2[\ell_i])}{(d-1)![\ell_i]!}. \tag{2.400}$$

作为第二步,我们将问题变换成一个纯一维问题并得到式(2.395).让我们用 $e_i = -(\ell_i + (d-2)/2)^2$ 标记对应于角动量 ℓ_i 的一维问题的本征值.然后用下式约束式(2.400):

$$N_d \leqslant K_d \sum_i \mid e_i \mid^{\frac{d-1}{2}}, \quad K_d = \sup_\ell \frac{(d-2+[\ell])!(d-1+2[\ell])}{(d-1)![\ell]!([\ell]+(d-2)/2)^{d-1}}. \tag{2.401}$$

为了继续进行下去,我们需要对一维中 3/2、2、5/2、3 等阶的矩的约束.Aizenman 和 Lieb[139] 证明了,所有高于 3/2 阶的此类矩小于或等于一个适当的经典常数乘以位势的适当矩:

$$\sum \mid e_i \mid^\alpha \leqslant C\ell_{\alpha,1}\int dx \mid V(x) \mid^{\alpha+\frac{1}{2}}, \quad \alpha \geqslant 3/2, \tag{2.402}$$

$$C\ell_{\alpha,1} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\sqrt{4\pi}\Gamma(\alpha+3/2)}.$$

$C\ell_{a,d}$ 已在式(2.369) 中给出.不等式(2.401) 和式(2.402) 合起来给出我们结果.对于维数为 20 的所有结果都被概括在了表 2.3 中.

如此所求得的约束可以和 $d \leqslant 7$ 时的单粒子约束 S_d,以及和 $d \geqslant 8$ 时的经典约束 $C\ell_d$ 相比较.该约束中对应所有大于 S_d 和 $C\ell_d$ 的那些 $d \geqslant 5$.而且,对于 $d \geqslant 7$,方程式(2.401) 中用来确定 K_d 表示式右边的极大值对一个非零的 ℓ 值达到.的确,我们甚至找到了一些位势的可计算例子,它表明对 $d > 6$,N_d 的上界必然高于经典约束,但在 $d \to \infty$ 时趋于经典约束.这推翻了 Lieb 和 Thirring 的猜想[127]:该猜想认为式(2.388) 中存在一个临界的值 α,称为 $\alpha_{c,d}$,它使得

$$L_{a,d} = L^1_{a,d} \quad \text{对于} \quad \alpha \leqslant \alpha_{c,d} \quad \text{和} \quad L_{a,d} = L^c_{a,d} \quad \text{对于} \quad \alpha \geqslant \alpha_{c,d}, \tag{2.403}$$

其中 $L^1_{a,d}$ 表示 $N = 1$ 时式(2.388) 中的优化常数;$L^c_{a,d}$ 表示经典常数.已有证明表明,$\alpha_{c,1} = 3/2$;数值实验给出猜测 $\alpha_{c,2} = 1.165$ 和 $\alpha_{c,3} = 0.862\,7$.我们将在下一小节叙述反驳针对 $\alpha = 0$ 和 $d \geqslant 7$ 的这种猜测的一些例子.

表 2.3　不等式(2.401) 和式(2.407) 的例证(与 Sobelev 常数及经典常数相比较的例子和约束)

d	m_{opt}	Ex/S_d	$Ex/C\ell_d$	ℓ_{opt}	约束 $/S_d$	约束 $/C\ell_d$
3	1	1		0	2.28	
4	1	1		0	1	
5	1	1		0	1.08	
6	1	1		0	1.12	
7	3	1.16		1	1.23	
8	4		1.36	2		1.42
9	6		1.29	4		1.33
10	8		1.24	5		1.27
11	10		1.21	7		1.23
12	13		1.18	10		1.21
13	16		1.16	13		1.18
14	20		1.15	16		1.16
15	24		1.13	19		1.14
16	28		1.12	23		1.14
17	32		1.11	27		1.13
18	37		1.11	32		1.12
19	42		1.10	37		1.10
20	47		1.09	42		1.10

变 分 方 法

我们也已尝试了一种获得最优结果的方法.原则上,我们是想计算一个特定泛函,即支持许多束缚态的整体位势的上确界.如果固定该数 N_d,我们期望获得上确界$\inf_V \int \mathrm{d}^d x V^{d/2}(x)$*.很清楚,至少必须存在一个零能束缚态.不然我们或许能减少耦合常数,在不改变束缚态数目的情形下改变以上泛函.让我们假定,该零能束缚态对应角动量 L.我们推出的变分原理为

$$\delta \int \mathrm{d}^d x V^{d/2}(x) \geqslant 0, \quad \delta E_L = \int \mathrm{d}^d x \psi_L^2(x) \delta V \leqslant 0, \tag{2.404}$$

其中 E_L 代表特定束缚态的本征值.V 的变分必须是这样的,它使得该束缚态能量保持为零或者变成负值.

我们引入一个 Lagrange 乘子,并导出比例系数 $|V|^{(d-2)/2} =$ 常数 $|\psi|^2$.这意味着,对于零能波函数 ψ_L 有一个标度(和共形)不变的非线性场方程:

$$-\Delta \psi_L - |\psi_L|^{4/(d-2)} \psi_L = 0. \tag{2.405}$$

对 $d = 3$ 方程式(2.405)的所有的解都是已知的.$L = 0$ 给出最优答案,并且 Sobolev 常数导致 N_d 的约束.不幸的是,对于一个变分原理可能还存在更多其他一些解具有角动量 L_j 的零能本征值.代替式(2.405),作为结果的非线性方程变成

$$-\Delta \psi_{L_i} - \Big(\sum_j |\psi L_j|^2\Big)^{2/(d-2)} \psi_{L_i} = 0. \tag{2.406}$$

通过球极平面投影到一个 d 维球面上,并利用在此球面上球谐函数的完备性,我们获得式(2.406)的若干有趣的解.借助于这些解我们可获得对所提问题的深刻理解,但是关于我们得到与该问题有关的所有解的证明没有被给出.

正如我们已经提到的,对特定的角动量可能会有若干零能解.我们可以沿用式(2.400)的方法计算出多重性的总数,从而对于 m 个零能束缚态求得

$$\frac{N_d}{I_d C \ell_d} = \frac{2^{d-1}(d+m-2)!(d+2m-2)}{((d+2m-2)(d+2m-4))^{d/3}(m-1)!} \tag{2.407}$$

其中 $I_d = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z\, |v(z)|^{d/2}$.针对 m 的优化结果也列在表2.7中.对$3 \leqslant d \leqslant 7$,我们务必将这些结果和 Sobolev 常数 S_d 比较.对 $d \geqslant 7$,我们的例子破坏了 Sobolev 约束,它本应是零点定理为真时的结果.我们相信,从式(2.407)求得的那些数,在 m 优化之后,均为最可能的值.故新的猜想是:直到 $d = 6$,Sobolev 常数将是最有可能的值.对更大的 d,最佳答案可由优化式(2.407)中的 m 得到.而对 $d \to \infty$,将会达到经典值.

应该注意的是,$d = 3$ 时上述约束的优化答案依然缺失.在 $d = 4$ 时已证明系

---

* 原文输入有错,此处已改正.——译者

统式(2.406)是完全可积的[140].该场论涉及共形不变的瞬子方程.

Chadan类振荡位势中的束缚态数目

我们已在2.1节提到,存在一类振荡位势,其薛定谔方程有完全良好的行为.该类位势由Chadan[66]在若干年前发现,而且从原理上讲它是极不平凡的,因为Chadan所要求的是位势的**本原函数**绝对值的可积性质,而非位势自身的绝对值的可积性质.这里我们仅限于讨论在原点附近振荡,而在无穷远处足够快地降为零的位势(尽管也可以考虑无穷远处振荡的位势情况[141]).在此情形,我们定义

$$W(r) = \int_r^\infty V(r')\mathrm{d}r'. \tag{2.408}$$

而Chadan类由下式定义:

$$\begin{cases} \lim\limits_{r\to 0} rW(r) = 0, \\ \int_r^R |W(r')|\,\mathrm{d}r' < \infty \text{ 对于 } r \to 0. \end{cases} \tag{2.409}$$

我们看到,在原点附近对于$r\to 0$,$V\sim r^\alpha$且$\alpha > -2$的普通位势,将满足以上要求.此外,如果我们要求对于$r\to\infty$有$|W(r)| < r^{-\epsilon}$,那么我们就获得了所有需要的性质,特别是,所有束缚态都具有负能量这一性质.

我们将证明,在Chadan类位势情况下,很容易求得对束缚态数目的约束[142].假定在原点附近是正规的薛定谔方程,其零能解有n个节点,即我们有n个束缚态.考虑区间$r_k < r < r_{k+1}$,其中r_k和r_{k+1}是相继的节点.于是从r_k到r_{k+1}积分薛定谔方程,我们得到

$$0 = \int_{r_k}^{r_{k+1}} u'^2(r)\mathrm{d}r + \int_{r_k}^{r_{k+1}} \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r)\right) u^2(r)\mathrm{d}r.$$

然后利用W的定义分部积分,注意到积分所得项为零:

$$0 = \int_{r_k}^{r_{k+1}} \left(u'^2(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u^2(r)\right)\mathrm{d}r + 2\int_{r_k}^{r_{k+1}} W(r)u(r)u'(r)\mathrm{d}r, \tag{2.410}$$

并利用不等式

$$|2W(r)u(r)u'(r)| < \frac{1}{2}|u'(r)|^2 + 2|W(r)u(r)|^2.$$

因此,我们得到

$$0 > \int_{r_k}^{r_{k+1}} \left(\frac{1}{2}|u'(r)|^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u^2(r) - 2|W(r)|^2u^2(r)\right)\mathrm{d}r$$

或者

$$0 > \int_{r_k}^{r_{k+1}} \left(|u'(r)|^2 + \frac{L(L+1)}{r^2}u^2(r) - 4|W(r)|^2u^2(r)\right)\mathrm{d}r, \tag{2.411}$$

其中$L(L+1) = 2\ell(\ell+1)$.不等式(2.411),作为变分不等式来看待,意味着在位

势 $-4|W(r)|^2$ 内存在一个负能束缚态，其角动量为 L，且在 r_k 和 r_{k+1} 处满足 Dirichlet 边界条件. 因此，应当作必要的替换，即将 ℓ 换成 L，V 换成 $4W^2$ 时，条件式(2.391) 中的任何一个均可适用. 譬如，我们有

$$\frac{1}{2L+1}\int_{r_k}^{r_{k+1}} 4rW^2(r)\mathrm{d}r > 1,$$

于是，若重新表示 L，并将所有间隔累加起来，我们得到

$$n_\ell < \frac{1}{2\sqrt{2(\ell+1/2)^2-1/4}}\int_0^\infty 4r\,|W(r)|^2\mathrm{d}r,$$

类似地有

$$n_\ell < \frac{16}{3\sqrt{3}\pi}\frac{\int 8r^2\,|W(r)|^3\mathrm{d}r}{8(\ell+1/2)^2-1}.$$

事实上，存在某种自洽性：如果 V 是纯吸引的，即负的，则 $W(r)$ 是负的、单调递增函数. 于是对一个负的、单调递增位势成立的 Calogero 约束

$$n_0 < \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \sqrt{|U(r)|}\mathrm{d}r$$

适用. 故我们得出

$$n_0 < \frac{4}{\pi}\int_0^\infty |W(r)|\,\mathrm{d}r = \frac{4}{\pi}\int_0^\infty r\,|V(r)|\,\mathrm{d}r,$$

除了一个大于 1 的因子之外，它就是 Bargmann 约束.

这些约束并非恰好最优. 具有最优常数的约束可在原始文献中找到.

第 3 章　三体和 N 体问题的各种结果

薛定谔方程在夸克-反夸克系统中的成功应用不可避免地意味着，我们应该将它应用到由三夸克构成的重子系统，由于“色”自由度，重子系统并不限于具有一个对自旋和空间反对称的波函数. 事实上，就夸克模型首先被应用到重子[13] 的意义上讲，历史上情况刚好相反. 在此我们将不去描述模型计算的细节，而宁可描述这样的一些一般性质，它们源自相信夸克间的力是味无关的，并且假设薛定谔方程成立.

我们已经说过，如果一个哈密顿量是 $H = A + \lambda B$ 的形式，则它的基态能对 λ 是凹的，即 $\mathrm{d}^2 E(\lambda)/\mathrm{d}\lambda^2 \leqslant 0$. 对于两体问题[101,143] 一个非常简单的应用是，哈密顿量为

$$-\frac{1}{2}(m_{Q_1}^{-1} + m_{Q_2}^{-1})^{-1}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V(r)$$

的 $Q_1\bar{Q}_2$ 系统的束缚能对于 $(m_{Q_1}^{-1} + m_{Q_2}^{-1})^{-1}$ 是凹的. 这意味着

$$E_{Q_1\bar{Q}_2} \geqslant \frac{E_{Q_1\bar{Q}_1} + E_{Q_2\bar{Q}_2}}{2}, \tag{3.1}$$

添加上组分质量有

$$M_{Q_1\bar{Q}_2} \geqslant \frac{1}{2}(M_{Q_1\bar{Q}_1} + M_{Q_2\bar{Q}_2}). \tag{3.2}$$

该不等式非常有效. 譬如，假定自旋相关力不引起复杂性，我们就有

$$M_{D^*} = 2.12\ \mathrm{GeV} \geqslant \frac{1}{2}(M_{J/\psi} + M_{\phi}) = 2.06\ \mathrm{GeV}.$$

同样的凹性适用于三体系统 —— 例如，由三个夸克组成的重子. 特别地，一个重夸克和两个轻夸克体系的束缚能 $E(Q_1, q_2, q_3)$，对 $1/m_{Q_1}$ 是凹的，因为哈密顿量是

$$-\frac{1}{2m_{Q_1}}\Delta_1 - \frac{1}{2m_{q_2}}\Delta_2 - \frac{1}{2m_{q_3}}\Delta_3 + \sum V_{ij}. \tag{3.3}$$

若已有了一个给出组分夸克质量的模型，并且当包含 c 夸克和 s 夸克的类似重子质量是已知的，那时就可以得到包含 b 夸克的重子质量的上限. 例如：

$$M_{\Lambda_b} < m_b + \frac{(M_{\Lambda_c} - m_c)(1/m_c - 1/m_b)}{1/m_s - 1/m_c} - \frac{(m_\Lambda - m_s)(1/m_s - 1/m_b)}{1/m_s - 1/m_c},$$

利用 $m_s = 0.518\ \mathrm{GeV}/c^2$，$m_c = 1.8\ \mathrm{GeV}/c^2$，$m_b = 5.174\ \mathrm{GeV}/c^2$[34]，该式给出合理的估计值[144]：

$$M_{\Lambda_b} < 5.629\ \mathrm{GeV}/c^2$$

以及类似地有

$$M_{\sum_b} < 5.826\ \mathrm{GeV}/c^2.$$

目前，实验给出 Λ_b 质量为 5.625 GeV[145].

一个非常诱人的想法是，在这些凹性方面推进一步，并且改变下式中所有的质量：

$$H = -\frac{1}{2m_{Q_1}}\Delta_1 - \frac{1}{2m_{Q_2}}\Delta_2 - \frac{1}{2m_{Q_3}}\Delta_3 + V_{12} + V_{23} + V_{13}. \tag{3.4}$$

Richard 和 Taxil[44] 曾观察到，对一个“合理”的位势(无自旋相关力)，$SU(3)$ 十重态的成分

$$\left.\begin{array}{l}(q\,q\,q)\Delta\\(s\,q\,q)\Sigma^*\\(s\,s\,q)\Xi^*\\(s\,s\,s)\Omega^-\end{array}\right\} \tag{3.5}$$

的能量和质量是重子奇异性的凹函数，即

$$E(m_1,m_2,m_2) > \frac{1}{2}(E(m_2,m_2,m_2) + E(m_1,m_1,m_2)). \tag{3.6}$$

但是，什么是“合理的”呢?有一些不正确的“一般性”证明曾经被提出过，但在最后，Lieb[45] 对于一类受某些限制的位势给出了一个证明.该类型是

$$\exp(-\beta V(r))$$

应该有一个正的三维 Fourier 变换；Lieb 提出了使这种要求成立的两个充分条件：

(a) V 作为 r^2 的一个函数，应该有符号交替变化的逐次导数[45]($\mathrm{d}V/\mathrm{d}r^2 > 0$ 等).

(b)

$$V' > 0,\quad V'' < 0,\quad V''' > 0, \tag{3.7}$$

即一个先前由 Askey[146] 提出的条件.

事实上，如作者之一(A. M.)[147] 所证明，条件(b) 可以稍稍减弱成：

(c)

$$V' > 0,\quad V'' < 0,\quad rV''' - V'' \geqslant 0. \tag{3.8}$$

该后一条件在某种我们即将说明的意义上是最优的.设 F 满足 $F>0$，$F'<0$，$F''>0$.则通过逐次分部积分人们发现，F 的三维 Fourier 变换，$\tilde{F}(q)$，正比于

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\left(\frac{F''(r)}{r^2} - \frac{F'''(r)}{r}\right)\frac{[qr(1+\cos qr) - 2\sin qr]^2}{1+\cos qr}. \tag{3.9}$$

如果 $F'' - rF'''$ 的支集被限制到使方括号为零的那些点，则 Fourier 变换为零.

人们自然要问，对那些不满足这些条件的位势，凹性是否会被破坏. 正如 Lieb 在一个无限质量的粒子和一个方势阱的极端情形所证实的，情况正是如此. 而同样的情况也被 Richard，Taxil 及作者之一(A. M.)[44] **解析地**对 $V = r^5$，和**数值地**对 $V = r^{2.6}$ 证明了.

然而这些位势不是“物理的”，因为它们对 r 不是凹的[46]. 人们还发现，最弱的条件涉及位势的三阶导数. 尚不知这是否是由于数学物理学家的不足还是需求更深层次的数学. 我们倾向于前一种推断. 十重态的“等间距”源于凹形的中心能和自旋相关力之间的一种补偿.

根据 Richard 的建议，将式(3.6) 推进一步并尝试证明不等式

$$E(m_1,m_2,m_3) > \frac{1}{3}(E(m_1,m_1,m_1) + E(m_2,m_2,m_2) + E(m_3,m_3,m_3)) \tag{3.10}$$

是十分诱人的. 利用 Lieb[45] 的方法，该式很容易证明，在相同的条件 —— 如式(3.8) 之下，Lieb 能够证明比式(3.6) 更一般的一个不等式

$$E(m_1,m_2,m_3) > \frac{1}{2}(E(m_1,m_1,m_3) + E(m_2,m_2,m_3)). \tag{3.11}$$

也有可能找到足够快的递增位势的反例 —— 譬如，$V(r) = r^{4.9}$.

如果我们接受一个未受到完全检验的假设：在重子中，夸克-夸克势和相应的夸克-反夸克势由下式相联系：

$$V_{Q_1Q_2} = \frac{1}{2}V_{Q_1\bar{Q}_2}, \tag{3.12}$$

则可以得到有关三体系统的其他一些非常有趣的不等式. 这个“信念”的基础在于，它对单胶子交换势成立. 同时，若在一个重子中两个夸克彼此靠得很近，它们将形成一个处在 $\bar{3}$ 表示的双夸克(diquark)，因为它必须和剩下夸克的 3 表示组合在一起. 在所有方面，双夸克的行为都像一个反夸克，它和夸克的相互作用势为 $V_{Q\bar{Q}}$. 因有两个夸克，故除以2得到规则式(3.12). 从唯象的角度说，该规则导致 Richard[41] 完全基于夸克偶素的拟合[34] 给出 Ω^- 质量的一个漂亮的预言，即 $M_{\Omega^-} = 1\,666\ \mathrm{MeV}/c^2$(而实验给出 $1\,672\ \mathrm{MeV}/c^2$).

一旦接受该规则，它将给出一些很妙的结论. 三体哈密顿量

$$H_{123} = -\sum \frac{1}{2m_{Q_i}}\Delta_i + \sum V_{ij} \tag{3.13}$$

可以写成

$$H_{123} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} H_{ij}, \tag{3.14}$$

其中

$$H_{ij} = -\frac{1}{2m_i}\Delta_i - \frac{1}{2m_j}\Delta_j + 2V_{ij}. \tag{3.15}$$

根据规则式(3.12)，H_{ij} 是一个夸克-反夸克的哈密顿量.我们有

$$\inf H_{123} > \frac{1}{2}(\inf H_{12} + \inf H_{23} + \inf H_{13}).$$

现在把组分质量包括进来，我们得到[40]

$$E(Q_1, Q_2, Q_3) > \frac{1}{2}(E(Q_1, \bar{Q}_2) + E(Q_1, \bar{Q}_3) + E(Q_2, \bar{Q}_3))$$

以及

$$M(Q_1, Q_2, Q_3) > \frac{1}{2}(M(Q_1, \bar{Q}_2) + M(Q_1, \bar{Q}_3) + M(Q_2, \bar{Q}_3)). \quad (3.16)$$

严格来说，该关系对无自旋粒子成立.但它对自旋平行的粒子也成立.这样，我们得到

$$M_\Delta > 3/2M_\rho,$$
$$M_{\Omega^-} > 3/2M_\phi.$$

在文献[149]中，Richard 和作者之一(A. M.)得以把自旋作为微扰纳入进来.我们求得：

自旋 3/2 态

$$\Omega^- = 1.672 > 3/2\phi = 1.530$$
$$\Delta = 1.232 > 3/2\rho = 1.155$$
$$\Sigma^* = 1.385 > K^* + 1/2\rho = 1.275$$
$$\Xi^* = 1.532 > \rho + 1/2\phi = 1.280$$
$$\Sigma_b^* > B^* + 1/2\rho = 5.710$$

自旋 1/2，类 Σ 态

$$\mathrm{N} = 0.938 > 3/4\rho + 3/4\pi = 0.681$$
$$\Sigma = 1.190 > 1/2\rho + 3/4K + 1/4K^* = 0.979$$
$$\Xi = 1.319 > 1/2\phi + 3/4K + 1/4K^* = 1.104$$
$$\Sigma_c = 2.450 > 1/2\rho + 3/4D + 1/4D^* = 2.288$$
$$\Sigma_b > 1/2\rho + 3/4B + 1/4B^* = 5.670$$

自旋 1/2，类 Λ 态

$$\Lambda = 1.116 > 1/2\pi + 3/4K^* + 1/4K = 0.863$$
$$\Lambda_c = 2.286 > 1/2\pi + 3/4D^* + 1/4D = 2.042 \quad (3.17)$$
$$\Lambda_b > 1/2\pi + 3/4B^* + 1/4B = 5.379.$$

我们看到，方程式(3.17)的左边和右边之间的偏离在 100 MeV 和 250 MeV 之间振荡.问题是能否比这做得更好?也就是说：我们能改进由式(3.16)所给的下限吗?回答是肯定的.

事实上，我们将采用的方法是非常普遍的，并且可以推广到 N 体情形，而无需把自己限制在三体情形.然而，它的最简单形式对于**等质量**的情形有效.非相等质

量情形仅对三体情形才被完全解决.

我们从 N 个等质量粒子开始.我们用记号 $E_N(M,V)$ 来标记质量为 M、相互作用势为 V 的 N 个粒子的能量.按此语言,对于等质量的原来不等式为

$$E_3\left(M,\frac{V}{2}\right)>\frac{3}{2}E_2(M,V). \tag{3.18}$$

注意到

$$E_N(M,V)\equiv\frac{1}{\lambda}E_N\left(\frac{M}{\lambda},\lambda V\right). \tag{3.19}$$

新不等式[9,150] 基于关于动能的一个非常简单的恒等式:

$$\sum_{i>j}(p_i-p_j)^2+\left(\sum p_i\right)^2=N\sum p_i^2. \tag{3.20}$$

于是,忽略掉质心能量$(\sum p_i)^2$后,我们可以将 $H_N(M,V)$,即具有成对的位势 V、质量为 M 的 N 个粒子的哈密顿量,写成:

$$\left.\begin{aligned}H_N(M,V)&=\sum h_{ij}\\ \text{其中}\quad h_{ij}&=\frac{(p_i-p_j)^2}{2MN}+V(r_{ij})\end{aligned}\right\}, \tag{3.21}$$

但是 $p_i-p_j=2\pi_{ij}$ 是 r_{ij} 共轭动量的两倍:

$$h_{ij}=\frac{2(\pi_{ij})^2}{MN}+V(r_{ij}). \tag{3.22}$$

因此 h_{ij} 是对应于一个约化质量为 $MN/4$,即两个质量为 $MN/2$ 的粒子的哈密顿量.于是我们得到

$$E_N(M,V)>\frac{N(N-1)}{2}E_2\left(\frac{MN}{2},V\right). \tag{3.23}$$

易见,在谐振子力的情形[151],式(3.23) 变成等式.对 $N=3$,该式给出

$$E_3(M,V)>3E_2\left(\frac{3}{2}M,V\right),$$

或者,利用标度性质:

$$E_3\left(M,\frac{V}{2}\right)>\frac{3}{2}E_2\left(\frac{3}{4}M,V\right). \tag{3.24}$$

如果我们将这个结果和式(3.18) 相比较,我们看到 M 被$(3/4)M$ 所替换.这个质量是约化的质量,所以下限更高了.

由该不等式所得收获可以从数值和解析两个方面来评价.在数值方面,我们可以计算对于幂次势的极其精确的变分上限,然后和新旧下限比较.这在表 3.1 中列出.

表 3.1　新旧下限比较

β	$\frac{3}{2}E_2(1)$	$\frac{3}{2}E_2\left(\frac{3}{4}\right)$	E_3	$\tilde{E}_3$
−1	−0.375 00	−0.281 25	−0.266 75	−0.238 73
−0.5	−0.657 59	−0.597 46	−0.591 73	−0.579 64
0.1	1.853 59	1.879 16	1.880 19	1.882 78
0.5	2.750 09	2.912 96	2.916 54	2.925 90
1	3.507 16	3.860 13	3.863 09	3.871 14
2	4.5	5.196 15	5.196 15	5.196 15
3	5.175 84	6.150 98	6.155 91	6.171 47

注：$H_3 = \sum (1/2)p_i^2 + (1/2)\epsilon(\beta)\sum r_{ij}^{\beta}$ 的基态能 E_3 与朴素的极限 $(3/2)E_2(1;r^{\beta})$、改进的下限 $(3/2)E_2(3/4;r^{\beta})$ 以及一个用高斯波包得到的简单变分近似 $\tilde{E}_3$ 的比较.

在解析方面，利用在 2.4 节推得的关于动能的不等式：

$$\langle T\rangle > \frac{3}{4}(E_{\mathrm{p}} - E_{\mathrm{s}}), \tag{3.25}$$

其中 E_{s} 代表两体系统 $\ell = 0$ 的基态能量，E_{p} 代表最低的 $\ell = 1$ 态能量，有一些方法计算 $E_2(3M/4, V) - E_2(M, V)$，以及由 Feynman-Hellmann 定理：

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\mu}(M, V) = -\frac{\langle T\rangle}{\mu} \tag{3.26}$$

得到的性质. 通过包含 $\mu\langle T\rangle$ 的一些进一步的凹性质，可以积分式(3.26) 并得到有关两个质量为 $(3/4)M$ 和两个质量为 M 的两体系统之间束缚能之差的一个下限界. 于是有

$$E_3\left(M, \frac{V}{2}\right) > \frac{3}{2}\Big(E_2(M, V, \ell = 0) + \frac{3}{16}(E_2(M, V, \ell = 1) - E_2(M, V, \ell = 0))\Big). \tag{3.27}$$

对 Ω^- 系统一个相当引人入胜的应用有：以前的不等式给出

$$M_{\Omega^-} > 1\ 530\ \mathrm{GeV};$$

新不等式给出

$$M_{\Omega^-} > 1\ 659\ \mathrm{MeV}.$$

它们可以和如下实验值比较：

$$M_{\Omega^-} = 1\ 672\ \mathrm{MeV}.$$

所有这些都可以推广到不等质量的三粒子情形[151]. 为此，我们必须利用哈密顿量可以自由添加一个形如 $(P \cdot \sum \alpha_i p_i)$ 的项. 其中

$$P = \sum_{i=1}^{3} p_i .$$

对于幂次势的数值实验结果也是相当惊人的，如表 3.2 和表 3.3 所示.

表 3.2　对于 $V = r$ 和质量$(1,1,M)$ 的诸下限的比较

M	变分法	朴素的	优化的
0.05	5.717 8	5.379 5	5.714 1
0.1	4.872 4	4.530 3	4.869 3
0.2	4.255 0	3.884 5	4.222 0
0.5	3.614 7	3.289 4	3.612 0
1	3.304 5	3.000 0	3.301 9
2	3.097 6	2.817 1	3.095 3
5	2.940 8	2.686 9	2.938 6
10	2.879 5	2.638 6	2.877 3
20	2.846 6	2.613 4	2.844 4

注：我们展示了比值 $E^{(3)}/E^{(2)}$. 变分法下限对应于直到大轨道角动量 $L = 8$ 的超球计算.

表 3.3　对于 $V = -r^{-1}$ 和质量$(1,1,M)$ 的诸下界比较

M	变分法	朴素的	优化的
0.05	0.675 00	1.190 5	0.693 32
0.1	0.846 93	1.363 6	0.868 68
0.2	1.118 3	1.666 7	1.160 9
0.5	1.648 4	2.333 3	1.734 1
1	2.134 0	3.000 0	2.250 0
2	2.604 5	3.666 7	2.742 7
5	3.078 7	4.333 3	3.234 1
10	3.299 0	4.636 4	3.462 0
20	3.426 8	4.809 5	3.594 4

注：我们展示了比值 $E^{(3)}/E^{(2)}$，所以下限变成了上限，反之亦然.

现在，让我们回到一般的 N 体系统. 一个特别引人注目的应用是通过引力势相互作用的 N 粒子系统[9]：

$$H = \sum_{i}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i>j}^{N} \frac{x}{r_{ij}}, \tag{3.28}$$

其中 $x = Gm^2$，而 G 为牛顿常数. 该 N 体系统能量的一个上限，或者可以通过取变量 $\sqrt{\sum |r_{ij}|^2}$ 的类氢原子试探函数(它对小的 N 较佳)，或者可以通过取 Hartree

波函数 $\Pi_i(f(r_i))$(它对大的 N 和质心能量可忽略的情形较佳).

这给出

$$E_3 < -1.037\,5\ G^2 m^5$$

$$E_N < -0.054\,2\ N(N-1)^2 G^2 m^5,$$

利用

$$f(r) = \exp(-\sqrt{ar^2 + b});$$

新的下限给出

$$E_3 > -1.125\ G^2 m^5$$

$$E_N > -0.062\,5\ N^2(N-1) G^2 m^5.$$

我们看出,上下限在 15% 以内相符,这是相当了不起的.

为结束本章,我们想介绍一下由 Gonzalez-Garcia[152] 给出的一个非常有趣和吸引人的进展.他将不等式(3.23) 及式(3.24) 和能量的 $1/d$ 展开相结合,其中 d 是空间维数.

$1/d$ 展开的思想是,如果我们在 d 维空间,$d \gg N$,取 N 个粒子,倘若力被适当地标度(这对幂次势是很容易的),则系统被"冻结",粒子之间距离固定.对此平衡位置的偏离可由简谐运动描述,它引起 $1/d$ 修正.迄今为止,还没有对于这些 $1/d$ 展开的严格控制.

Gonzalez-Garcia 的贡献是比值

$$R = \frac{E_N(M,V)}{E_2(NM/2,V)N(N-1)/2} \tag{3.29}$$

不仅当 V 变成谐振子势,而且当 $d \to \infty$ 时,趋于 1.这时的想法是,把 R 用 $1/d$ 的幂展开,而不是展开个别的一些能量.若按此计算到 $1/d$ 的最低的非平凡阶,则对具有两体位势为 $\epsilon(\beta)r^\beta$(见表 3.1) 的等质量三体系统得到表 3.4 中所示的结果.

表 3.4　方程式(3.29) 的 R 展开到 $1/d$ 的最低阶与数值的比较

β	$R_{1/d}$	$R_{数值}$(表 3.1)	相对误差 ‰
−1	0.946	0.948	2
−0.5	0.989 8	0.990 4	0.6
0.5	1.001 6	1.001 2	0.3
1	1.001 1	1.000 8	0.3
2	1	1	0
3	1.001 3	1.000 8	0.4

这些结果的确令人印象深刻,尽管我们全然不知 $1/d$ 展开的收敛性(或渐进特性).

类似地，对于一个引力作用的粒子系统，Gonzalez-Garcia 得到

$$\lim_{N\to\infty}\frac{E_N}{N^3G^2m}=-0.053\,9,$$

它可以与我们的上限，$-0.054\,2$，相比较.

理解 $1/d$ 展开方法成功的原因，无疑是非常值得的. 这是一个有趣但困难的问题.

我们仅给出三体和 N 体问题的若干事实，我们推荐读者去阅读 Richard 有关重子作为三体系统的综述文献[153].

附录 A　超对称量子力学

这里，我们介绍适宜的代数方案，并指出它和我们关于能级排序的讨论中用到的薛定谔算符因子化的联系.

我们从物理中已知的最简单体系，即简谐振子入手，我们可称它为具有如下哈密顿量的玻色子体系，即

$$H_{\mathrm{B}} = -\frac{\omega}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\omega}{2}x^2. \tag{A.1}$$

为简单计，我们令 $m = 1/\omega$. 把式(A.1) 改写成如下“因子化”形式：

$$H_{\mathrm{B}} = \omega\left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right), \quad a = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a^{\dagger} = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)\frac{1}{\sqrt{2}}, \tag{A.2}$$

其中 $a^{\dagger}$ 和 a 表示谐振子量子的产生和湮灭算符. 它们的对易关系

$$[a, a^{\dagger}] = 1, \quad [H_{\mathrm{B}}, a^{\dagger}] = \omega a^{\dagger}, \tag{A.3}$$

显示了 H_{B} 的“玻色子”性质. 谱以及相关的本征函数由下式给出：

$$E_n = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbf{N}_0, \quad a|0\rangle = 0, \quad \frac{(a^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}\Big|n\rangle, \tag{A.4}$$

其中 $|0\rangle$ 代表基态矢量，而 $\omega/2$ 是零点能量.

在我们于势模型框架中实现超对称的最简单形式之前，我们通过添加一个第二种玻色子振子，将之前处理的体系“翻一倍”：

$$h = \frac{1}{2}(p_1^2 + \omega_1^2 q_1^2) + \frac{1}{2}(p_2^2 + \omega_2^2 q_2^2). \tag{A.5}$$

很明显，如果 $\omega_1 = \omega_2$，则这个二维振子具有一种附加的对称性. 那时，在 q_1, q_2 平面内由角动量算符

$$\ell = q_1 p_2 - q_2 p_1, \quad [\ell, h] = 0 \tag{A.6}$$

生成的转动变换之下，h 是不变的. 我们可以将两个实的坐标 q_1, q_2 替换成一个复数坐标 $q = q_1 + \mathrm{i}q_2$. 上面提及的转动变成相位变换 $q \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}q$. h 的不变性意味着存在一个守恒荷. 在上述情况下，角动量便是那个守恒量. ℓ 作用在两个玻色子自由度空间中，并且可以容易地将 ℓ 放到指数上来得到实现该变换的幺正群.

与加倍的玻色子振子相对照，现在我们添加一个“费米子”自由度到式(A.1)

的 H_B 上，得到超对称振子

$$H = \omega(a^\dagger a + c^\dagger c), \tag{A.7}$$

它作用在一对平方可积函数上. $c^\dagger$ 和 c 表示费米子的产生算符和湮灭算符，并遵从反对易关系

$$\{c, c^\dagger\} = 1, \quad c^{\dagger 2} = c^2 = 0. \tag{A.8}$$

若我们不用式(A.7)，而是从哈密顿量 $\omega_1(a^\dagger a + 1/2) + \omega_2(c^\dagger c - 1/2)$ 出发，则没有对称性会嵌在内部. 我们注意到，费米子振子的零点能是负的. 在频率相等的情况 $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ 下，玻色子振子和费米子振子的零点能互相抵消.

代数式(A.8) 可以很好地由 $\boldsymbol{\sigma}$ 矩阵表示，因为 $\{\sigma^-, \sigma^+\} = 1, (\sigma^+)^2 = (\sigma^-)^2 = 0$. 式(A.7) 中用了该表示，因而 H 可以被看成是 2×2 矩阵算符. 对于更多自由度，为了表示遵从反对易关系的这些算符的代数，我们必须借助形式为 $\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\sigma}^j \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}$ 的矩阵，引入 Klein-Jordan-Wigner 变换.

我们可将式(A.7) 改写为

$$H = \omega\{a^\dagger a(1 - c^\dagger c) + (a^\dagger a + 1)c^\dagger c\} = \omega(a^\dagger a c c^\dagger + a a^\dagger c^\dagger c) = \{Q, Q^\dagger\}, \tag{A.9}$$

其中我们通过

$$Q = \sqrt{\omega} a c^\dagger, \quad Q^\dagger = \sqrt{\omega} a^\dagger c, \tag{A.10}$$

引入了算符 Q 和 $Q^\dagger$，结果表明它们表现得像荷一样. 人们称它们为超荷；在我们的简单情况下，它们可以被改写成

$$Q = \sqrt{\omega}\begin{pmatrix} 0 & a \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \sqrt{\omega}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a^\dagger & 0 \end{pmatrix},$$
$$\{Q, Q^\dagger\} = \omega\begin{pmatrix} a a^\dagger & 0 \\ 0 & a^\dagger a \end{pmatrix} = H. \tag{A.11}$$

超荷决定了哈密顿量 H 的平方根的一个特殊情形. 一个简单的计算表明，它们和哈密顿量对易：

$$[Q, H] = \omega^{3/2}[ac^\dagger, a^\dagger a + c^\dagger c] = \omega^{3/2}(c^\dagger a - a c^\dagger) = 0. \tag{A.12}$$

超荷生成了哈密顿量的一种对称性，人们称之为“超对称性”. 在这里，我们想评注一下，H 由两个算符 $a^\dagger a$ 和 $a a^\dagger$ 的直和构成，这两个算符在“本质上”是等谱(isospectral) 的. 这个概念意味着，除了零模外，它们的谱相符合：

$$\text{谱}(a^\dagger a)\backslash\{0\} = \text{谱}(a a^\dagger)\backslash\{0\}. \tag{A.13}$$

对于纯的点状谱，式(A.13) 可由简单的观察得出：$a^\dagger a\psi = E\psi \Rightarrow a a^\dagger a\psi = Ea\psi$，因此 $a\psi$ 是 $aa^\dagger$ 的一个本征函数，只要 $a\psi \neq 0$. 另一方面，从 $aa^\dagger$ 的一个本征函数开始，将给出式(A.13). 对于连续谱，我们可以检查算符的预解式并依照 Deift 方式利用对易关系. 我们注意到，零模在指标问题和超对称破缺中起着关键性的作用.

谱和本征解是容易获得的. 设 $|0\rangle$ 是一种振子的基态波函数 $a|0\rangle = 0$. H 的基

态由$|0,0\rangle := |0\rangle \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$给出，并且满足 $a|0,0\rangle = c|0,0\rangle = 0$. H 的所有本征解由下式给出：

$$|n,m\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}(c^\dagger)^m|0,0\rangle, \quad n = 0,1,2,\cdots, \quad m = 0,1. \tag{A.14}$$

存在一个纯点状谱，且所有激发态是双重简并的. 基态不简并. 我们看到

$$Q|n,0\rangle \propto |n-1,1\rangle, \quad Q^\dagger|n,1\rangle \propto |n+1,0\rangle. \tag{A.15}$$

Q 将“玻色子”态 $|n,0\rangle$ 映射到具有相同能量的“费米子”态 $|n-1,1\rangle$. $Q^\dagger$ 给出逆映射. 我们可以引入一个计算费米子数目的算符 $N_F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Klein 算符 $K = (-1)^{N_F}$ 对下分量波函数给出本征值 1 而对上分量波函数给出本征值 -1. 我们因此得到态的 Z_2 阶化. 算符 Z_2 阶化可以通过定义和 K 对易的偶算符同时定义和 K 反对易的奇算符得到. Q 是一个奇算符. 它生成一个对称性

$$\delta_Q a^\dagger := [Q,a^\dagger] = \sqrt{\omega}\,c^\dagger, \quad \delta_Q c := \{Q,c\} = \sqrt{\omega}\,a, \tag{A.16}$$

将玻色子映射到费米子，及将费米子映射到玻色子. 我们必须在式(A.16) 中取两个奇算符 Q 和 c 之间的反对易关系.

在有关超对称量子力学的这些简短的介绍性评注之后，我们引用容许在一维问题(或半轴线问题) 中包括一般的位势相互作用的推广. $N = 2$ 的超代数

$$Q^2 = Q^{\dagger 2} = 0, \quad \{Q,Q^\dagger\} = H, \quad [H,Q] = [H,Q^\dagger] = 0 \tag{A.17}$$

可以通过令 $Q = \sigma^+ A$ 和 $Q^\dagger = \sigma^- A^\dagger$ 以 $A = (\mathrm{d}/\mathrm{d}x) + W(x)$ 方式实现. 我们得到

$$H = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + W^2(x) + \sigma_3 W'(x). \tag{A.18}$$

该哈密顿量由一对薛定谔算符组成，这些算符“本质上”是等谱的. 在 $V_\pm = W^2(x) \pm W'(x)$ 情况下的哈密顿量 $H_\pm = p^2 \pm V_\pm(x)$，其对应非零能量的本征函数是双重简并的. 此外我们看到，H 的谱是非负的. 本书的两位作者利用了(实际上重发明了) 该因子化方法，以便将具有角动量 ℓ 和位势 V 的问题映射到另一个具有角动量 $\ell+1$ 和位势 $\tilde{V}$ 的问题(见方程式(2.25) 和式(2.27)).

若 $E = \inf \mathrm{spec}\, H$ 等于零，则我们称超对称是不破缺的. 这意味着，$Q|0\rangle = 0$ 和 $H|0\rangle = 0$，其中 $|0\rangle$ 代表基态波函数. Q 湮灭基态且对称性得到实现. 破缺的超对称性意味着 $E > 0$.

上述的代数结构的根源可以追溯至 18 世纪和 19 世纪被研究过的一些问题. 如果我们从连续的 $v(x)$ 的微分方程 $\Phi_0'' = v(x)\Phi_0$ 开始，并假设 Φ_0 处处非零，则我们可引入 $W(x) = (\mathrm{d}/\mathrm{d}x)\ln \Phi_0(x)$ 并得到 $W(x)$ 的 Ricatti 方程(1724)：$W' + W^2 = v$. 早在 1702 年 Bernoulli 通过把它变换成二阶方程 $y'' + x^2 y = 0$，就解出了这个非线性方程 $W' + W^2 + x^2 = 0$.

1827 年，Cauchy 就曾问道：一个微分算符是否能够类比代数学的基本定理，因

子化成一些一阶微分算符的乘积?Jacobi 证明了,任何 $2m$ 阶正定的自伴微分算符 L 都可以写成一个 m 阶微分算符 p 乘以它的伴算符,即 $L = p\bar{p}$. Cayley(1868) 将方程 $\Phi_0'' = x^{2q-2}\Phi_0$ 变换成了 $y' + y^2 = x^{2q-2}$. Frobenius 首次证明了完全的因子化,它意味着存在这样的 $v_i(x)$,使得

$$L(y) := y^{(n)} + p_1(x)y^{(n-1)} + \cdots = \prod_{i=1}^{n}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{v_i'(x)}{v_i(x)}\right)y. \tag{A.19}$$

Darboux 定理可以追溯到 1882 年,它以

$$L\Phi_0 = \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + v(x)\right)\Phi_0 = 0$$

作为出发点. 如果 Φ_0 处处非零,则在 $A = (\mathrm{d}/\mathrm{d}x) - (\ln \Phi_0)'$ 的情况下,L 可以写成 $L = A^{\dagger}A$. 该定理断言

$$\tilde{L} = AA^{+} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + v(x) - 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\Phi_0'}{\Phi_0}\right) \tag{A.20}$$

是 $\tilde{L}(A\Phi) = 0$ 的一个解. 这个结果和 Crum 和 Krein 的变换有关并被用于反散射问题. 有关超对称量子力学的更多细节请参看,例如文献[154].

附录 B　关于角向激发的一些定理的证明

我们想给出关于角向激发的 ℓ-依赖性两个定理的证明.

定理 B1　如果

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\gtrless 0,\quad \frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}\ell^2}\gtrless 0, \tag{B.1}$$

则径向波函数满足

$$-\left(\frac{u'}{ru}\right)'-\frac{2(\ell+1)}{r^3}\gtrless 0. \tag{B.2}$$

定理 B2　如果

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\gtrless 0,\quad \frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}\ell^2}+\frac{3}{\ell+1}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\gtrless 0, \tag{B.3}$$

则径向波函数满足

$$-\left(\frac{u'}{u}\right)'-\frac{\ell+1}{r^2}\gtrless 0. \tag{B.4}$$

尽管两个证明的开头是相同的,我们却无法将它们简化成一种单一的技巧.

自然,我们从

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}=(2\ell+1)\int\frac{u^2}{r^2}\mathrm{d}r \tag{B.5}$$

开始,且如果记 $v=\partial u/\partial\ell$,则有

$$\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}\ell^2}=2\int\frac{u^2}{r^2}\mathrm{d}r+2(2\ell+1)\int\frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r \tag{B.6}$$

(我们略去了下标 ℓ).

注意到

$$\int_0^\infty uv\mathrm{d}r=0 \tag{B.7}$$

以及由 Wronski 关系

$$vu'-u'v=\int_0^r\left(\frac{2\ell+1}{s^2}-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\right)u^2\mathrm{d}s, \tag{B.8}$$

可知,v/u 是个增函数. 因此,v 对小的 r 是负的,而对大的 r 是正的,且由于式(B.7),我们可知

$$\int_0^r uv\mathrm{d}s > 0. \tag{B.9}$$

超过这点之后，我们不得不把证明分开.

定理 B1 的证明　我们必须约束式(B.6)中积分$\int (uv/r^2)\mathrm{d}r$范围.我们将处理如下情形：

$$(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)(1/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r) < 0.$$

通过分部积分，我们有

$$\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r = \int \frac{2\mathrm{d}r}{r^3}\int_0^r uv\mathrm{d}r. \tag{B.10}$$

现在，由式(B.2)和式(B.7)有

$$\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r < -\frac{1}{(\ell+1)}\int_0^\infty \left(\frac{u'}{ru}\right)'\int_0^r uv\mathrm{d}s, \tag{B.11}$$

再次用分部积分法积分

$$\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r < \frac{1}{(\ell+1)}\int_0^\infty \frac{u'v\mathrm{d}r}{r}.$$

结合

$$\int_0^\infty \left(\frac{u'v+uv'}{r} - \frac{uv}{r^2}\right)\mathrm{d}r = 0$$

以及由式(B.8)有

$$\int_0^\infty \frac{u'v-uv'}{r} - \int \frac{\mathrm{d}r}{r}\int_0^r \left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell} - \frac{2\ell+1}{s^2}\right)u^2\mathrm{d}s$$

$$= -\int \mathrm{d}r\left((2\ell+1)\frac{\log r}{r^2} - \log r\,\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}r}\right)u^2,$$

我们得到

$$\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r < \frac{1}{2(\ell+1)}\left(\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r + \int\left(\frac{\mathrm{d}r\log r}{r^2}(2\ell+1) - \log r\,\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\right)u^2\right),$$

于是利用$\log r = \lim_{\epsilon\to 0}(r^\epsilon - 1/\epsilon)$，有

$$(2\ell+1)\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r < (2\ell+1)\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}\left(\int u^2\int \frac{u^2 r^\epsilon}{r^2} - \int \frac{u^2}{r^2}\int u^2 r^\epsilon\right).$$

由

$$\frac{\int u^2 r^\nu}{\Gamma((2\ell+3+\nu)/2)}$$

的对数凹性，我们得到

$$\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r < -\frac{1}{2\ell+1}\int \frac{u^2}{r^2}\mathrm{d}r,$$

代回到式(B.6)，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}^2 E}{\mathrm{d}\ell^2} < 0.$$

很明显，对于情形

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} > 0$$

的证明完全是平行的，因而定理 B1 得以完全确立.

定理 B2 的证明　如我们在正文提到，本定理的证明需要利用 Chebyshev 不等式(2.156)：

$$\int fh\mathrm{d}x\int gh\mathrm{d}x \leqslant \int fgh\mathrm{d}x\int h\mathrm{d}x,$$

其中 h 是非负的，f 和 g 同为非递减函数，或者，同为非递增函数.

该不等式的证明是平凡的：如下的量

$$\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y h(x)h(y)(f(x)-f(y))(g(x)-g(y))$$

显然在这些假定下是非负的.

我们取

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} < 0$$

的情形. 然后我们用另一方式计算$\int (uv/r^2)\mathrm{d}r$：

$$\int \frac{uv}{r^2}\mathrm{d}r = \int \frac{1}{r}(uv)'\mathrm{d}r = 2\int_0^\infty \frac{u'v}{r}\mathrm{d}r - \int_0^\infty \log r\left(\frac{2\ell+1}{r^2} - \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\right)u_\ell^2\mathrm{d}r,$$

(B.12)

其中用到了 Wronski 行列式(B.8) 和分部积分. 另一方面，在 $f = v/u, g = u'/u - (\ell+1)/r, h = u^2/r$ 情况下，因 f 和 g 是**递增的**，故 Chebyshev 不等式给出

$$\int \frac{uv}{r}\mathrm{d}r\int\left(\frac{1}{r}uu' - \frac{\ell+1}{r^2}u^2\right)\mathrm{d}r < \int \frac{u^2\mathrm{d}r}{r}\int\left(\frac{1}{r}u'v - \frac{\ell+1}{r^2}uv\right). \quad \text{(B.13)}$$

把式(B.12) 和式(B.13) 合起来，可以消去积分$\int (u'v/r)\mathrm{d}r$；为了得到关于$\int uv\mathrm{d}r/r^2$ 的一个不等式，剩下要做的是处理$\int (uv/r)\mathrm{d}r$. 为此，除了现在我们有

$$-\left(\frac{u'}{u}\right)' - \frac{\ell+1}{r^2} < 0$$

之外，我们进行类似于对式(B.9) 和式(B.10) 所做的那些处理，所以

$$\int \frac{uv\mathrm{d}r}{r} < -\frac{1}{\ell+1}\int_0^\infty \frac{u'}{u}\mathrm{d}r\int_0^r uv\mathrm{d}s = \frac{1}{2\ell+2}\int (u'v - vu')\mathrm{d}r$$

$$= \frac{1}{2\ell+2}\int \frac{2\ell+1}{r}u^2\mathrm{d}r - \frac{1}{2\ell+2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\ell}\int ru^2\mathrm{d}r.$$

最后，我们得到关于$\int (uv/r^2)\mathrm{d}r$ **仅**包含 u^2 的矩(包括对数矩) 的不等式，对于

这些矩标准的凹形不等式可以使用. 结果，所有的不等式奇迹般地指向同一个方向，由此定理得证.

评注　通过利用求和规则式(2.19)：

$$\frac{1}{2}(E_{\ell+1}-E_{\ell})^2\int ru_{\ell}u_{\ell+1}\mathrm{d}r=\int\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}u_{\ell}u_{\ell+1}\mathrm{d}r,$$

并与 $u_{\ell+1}/u_{\ell}$ 是变量 r 的一个递增函数的事实结合在一起，可以得到定理 B1 的一个简单证明. 然而，该证明方法似乎不适用于定理 B2.

附录 C　Sobolev 不等式

这里我们将回顾一下我们对如下泛函的研究：

$$F_q(\psi) = \frac{\int \mathrm{d}^3 x \ |\nabla \psi|^2}{\left(\int \mathrm{d}^3 x r^{q-3} \ |\psi|^{2q}\right)^{1/q}}, \tag{C.1}$$

它使我们获得对于一个位势中束缚态不存在的一组最优条件[130]. 在形为 $\psi(x) \to \lambda\psi(\rho x)$ 而其中 $\lambda, \rho \neq 0$ 的标度变换之下，式(C.1) 中的 F_q 保持不变. 设 D 是具有紧致支集的无限可微函数空间. 不失一般性，我们可设这些函数取实数值. 我们想确定数

$$\mu_q = \inf_{0 \neq \psi \in D} F_q(\psi). \tag{C.2}$$

可以证实对 $1 < q \leqslant 3$ 而言 μ_q 是严格正定的. 对于能量泛函

$$H(\psi) = \int \mathrm{d}^3 x \ |\nabla \psi|^2 - \int \mathrm{d}^3 x V(x) \ |\psi(x)|^2, \tag{C.3}$$

我们可以对动能应用式(C.1)，对势能部分应用 Hölder 不等式，得到如下形式的下限：

$$H(\psi) \geqslant \{\mu_q - N_p(V, y)\} \| r^{(q-3)/2q} \psi \|_{\frac{2}{2q}}^2$$

$$N_p^p(V, y) = \int \mathrm{d}^3 x |y - x|^{2p-3} V^p(x), \tag{C.4}$$

其中 $p^{-1} + q^{-1} = 1$. 式(C.4) 是我们求得在一个势问题中束缚态不存在条件的方法的出发点.

因为泛函 F_q 在绕原点的转动下不变，我们或许可以预期式(C.2) 的下确界是在中心对称函数 $\psi(r)$ 中间被找到. 可以证实，泛函 F_q^R 的极小化(限制 F_q 为中心对称的诸函数 ψ) 是一个相对简单的任务. 可以明确地计算出数 $\mu_q^R = \inf F_q^R(\psi)$，结果证实它对于 $1 \leqslant q \leqslant \infty$ 是严格正定的(见下面).

然而，这种朴素的论证在 $q > 3$ 情形是错误的；尽管 $\mu_q^R > 0$，但对 $q > 3$ 情形，我们有 $\mu_q = 0$. 因为，假定相反的话，取具有紧致支集的一个位势，其深到足以将一个粒子束缚住. 于是，因为式(C.4) 中的 $2p - 3 < 0$，通过取 $|y|$ 足够大可以让 N_p 要多小就多小，从而使得 $H(\psi) \geqslant 0$. 这与存在一个负的束缚态的事实相矛盾. 于是

我们得知对 $q>3,\mu_q=0$.

另一方面,我们有下述命题.

命题 对于

$$1<q\leqslant 3:\inf F_q=\inf F_q^R. \tag{C.5}$$

就其证明而言,我们要说的是,我们可以将论证限制到非负的 ψ,因为将 ψ 替换成 $|\psi|$ 不会改变 F_q.其次,我们利用下述定理.

重排定理 给定 $\psi(x)\geqslant 0$,定义 $\psi_R(|\boldsymbol{x}|)$ 为 ψ 的球面递减的重排:ψ_R 是 $|\boldsymbol{x}|=r$ 的这样一个递减函数,它使得对每一个非负常数 M,都有 Lebesgue 测度 $\mu(\psi_R(|\boldsymbol{x}|)\geqslant M)=\mu(\psi(\boldsymbol{x})\geqslant M)$.于是

$$\int \mathrm{d}^3x\,|\nabla\psi|^2\geqslant\int \mathrm{d}^3x\,|\nabla\psi_R|^2 \tag{C.6}$$

且

$$\int \mathrm{d}^3x\psi\chi\leqslant\int \mathrm{d}^3x\psi_R\chi_R, \tag{C.7}$$

其中 ψ 和 χ 是两个正定函数.

现在我们取 $\chi=r^{q-3}(q\leqslant 3)$,则 χ 是递减的且 $\chi_R=\chi$.同时我们还显然地有,$\psi_R^{2q}=(\psi_R)^{2q}$,结果 $F_q(\psi)\geqslant F_q(\psi_R)$.这恰好是该命题的陈述式(C.5).

对于球对称泛函 F_q^R,我们有下述定理.

定理 对于 $1<q<\infty$,泛函 F_q^R 具有严格正定的下确界

$$\mu_q^R=\frac{p}{p-1}\cdot\left(4\pi\frac{(p-1)\Gamma^2(p)}{\Gamma(2p)}\right)^{1/p},\quad p^{-1}+q^{-1}=1, \tag{C.8}$$

它由唯一确定的函数组

$$\psi_q(r)=\frac{a}{\left(1+br^{1/(p-1)}\right)^{p-1}} \tag{C.9}$$

所达到,其中任意常数 a 和 b 反映了该问题的标度不变性.

因为证明细节有些微妙性[130],我们在这里宁愿仅给出导致式(C.8)和式(C.9)的一些形式计算.通过变量代换 $r\to x=\ln r$,和 $\psi\to\phi=\sqrt{r}\psi$,泛函 F_q^R 取如下形式:

$$\frac{F_q^R}{(4\pi)^{1/p}}=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x((\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x)^2+(1/4)\phi^2)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\phi^{2q}\right)^{1/q}}=\frac{I}{J^{1/q}}. \tag{C.10}$$

朴素的变分方程 $\delta F_q^R=0$ 给出微分方程

$$\phi''=\frac{1}{4}\phi-\kappa\phi^{2q-1},\quad \kappa=\frac{I}{J},\quad 2<2q<\infty, \tag{C.11}$$

我们必须在初始条件

$$\phi(\pm\infty)=\phi'(\pm\infty)=0 \tag{C.12}$$

下求解，因为积分 I 和 J 必须收敛. 式(C.11) 的一次积分由

$$\phi'^2 = \frac{1}{4}\phi^2 - \frac{\kappa}{q}\phi^{2q} \tag{C.13}$$

给出. 为了和式(C.12) 相一致，式(C.13) 右边的任意相加常数必须设为零. 式(C.13) 的解由积分

$$\int_{\phi}^{1} \frac{2\mathrm{d}t}{t\sqrt{1-8\kappa t^{2q-2}/q}} = |x|, \quad 1 < q < \infty \tag{C.14}$$

的反演给出，至多差一个平移项. 这是个初等积分，结果为

$$\phi_q(x) = \frac{\text{常数}}{(\cosh(q-1)x/2)^{1/(q-1)}}, \tag{C.15}$$

以旧变量表示时，它恰好是公式(C.9). 剩下要计算最小值 $F_q^R(\phi_q)$. 我们将式(C.15) 代入式(C.10)，得到可以表示成 Γ- 函数的初等积分，从而导致公式(C.8).

我们通过指出一个有趣的事实来结束这个附录，该事实阐明了这个定理的一个详细证明的必要性. 设 F_q^a 把 F_q^R 限制为这样的一些函数，它们在有限半径为 a 的球外及边界上均为零. 那时可以证明，尽管没有函数达到那个最小值，F_q^a 的下确界仍恒等于 F_q^R 的下确界.

参 考 文 献

[1] Jost R. Helv. Phys. Acta, 1946, 19: 246.

[2] Jost R, Pais A. Phys. Rev., 1951, 82: 84.

[3] Bargmann V. Proc. Acad. Sci. USA, 1952, 38: 961.

[4] Schwinger J. Proc. Acad. Sci. USA, 1961, 47: 122.

[5] DysonF J, Lenard A. J. Math. Phys., 1967, 8: 423.

[6] Lieb E H, Thirring W. Phys. Rev. Lett., 1975, 35: 687.

[7] Martin A. Commun. Math. Phys., 1990, 129: 161;
Helffer B, Robert J. Asymptotic Analysis, 1990, 3: 91;
Helffer B, Robert J. Ann. Inst. Henri Poincaré Phys. Théor., 1990, 53: 139;
Helffer B, Parise B. Dept. of Mathematics and Computer Sciences, Ecole Normale Supérieure, Paris, 15. 1. 1990.

[8] Levy Leblond J M. J. Math. Phys., 1969, 10: 806.

[9] Basdevant J L, Martin A, Richard J M. Nucl. Phys., 1990, B340: 60, 69.

[10] Vinh Mau R. Mesons in Nuclei. Amsterdam: North Holland, 1979(1): 151.

[11] Chew G F. The Analytic S Matrix, a Basis for Nuclear Democracy. New York: Benjamin, 1966.

[12] Gell-Mann M. Proceedings of the 1962 International Conference on High Energy Physics. Geneva: CERN, 1962: 805.

[13] Dalitz R H. Oxford International Conference on Elementary Particles. Chilton: Rutherford High Energy Laboratory, 1966: 157.

[14] Gerasimov S B, Zh. Eksper. Teor. Fiz. (USSR), 1966(50): 1559. English translation Sov. Phys. JETP, 1966, 23: 1040.

[15] Aubert J J, et al. Phys. Rev. Lett., 1974, 33: 1404.

[16] Augustin J E, et al. Phys. Rev. Lett., 1974, 33: 1406.

[17] Abrams G S, et al. Phys. Rev. Lett., 1974, 33: 1453.

[18] Eichten E, et al. Phys. Rev. Lett., 1975, 34: 369.

[19] Applequist T, et al. Phys. Rev. Lett., 1975, 34: 365.

[20] De Rujula A, Georgi H, Glashow S L. Phys. Rev., 1975, D12: 147.

[21] Zeldovitch Y B, Sakharov A D. Acta Phys. Hung., 1967, 22: 153;
Sakharov A D. Zh. Eksper. Teor. Fiz. (USSR), 1980, 78: 2112;

English translation Sov. Phys. JETP,1980,51:1059.
[22] Federman P,Rubinstein H R,Talmi I. Phys. Lett.,1966,22:208.
[23] Stanley D P,Robson D. Phys. Rev.,1980,D21:3180.
[24] Stanley D P,Robson D. Phys. Rev. Lett.,1980,45:235.
[25] Isgur N. Proceedings of the International Conference on High Energy Physics. Madison, 1980 (eds. Durand L,and Pondrom L G) (AIP Conference Proceedings,no. 68),New York:AIP,1981:30;
See also Isgur N and Kociuk P. Phys. Rev.,1980,D21:1868.
[26] Richard J M,Taxil P. Phys. Lett.,1983,B123:4531;
Ann. Phys.,New York,1983,150:267.
[27] Ono S,Schöberl F. Phys. Lett.,1982,B118:419.
[28] Basdevant J L,Boukraa S. Ann. Phys. (Fr.),1985,10:475;
Z. Phys.,1986,C30:103.
[29] DO Collaboration,Proceedings of the 27th International Conference on High Energy Physics. Glasgow,1994;Bussey P J,Knowles J G,eds. Institute of Physics. Bristol and Philadelphia,1995.
[30] Darriulat P. Conference Summary,27th International Conference on High Energy Physics. Glasgow,1994,ibid.:367.
[31] Martin A. Heavy Flavours,Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 1B,1988:133;
In this article,toponium widths should be multiplied by 2 (the fact that toponium contains 2 quarks was overlooked!).
[32] DO and CDF Collaborations,Proceedings of the Rencontres de Physics de la Vallée d'Aoste, March 1996,to be published by Editions Frontières (ed. Greco M).
[33] Buchmüller W,Grunberg G,Tye S H-H. Phys. Rev. Lett.,1980,45:103;
Buchmuller W,Tye S H-H. Phys. Rev.,1981,D24:132.
[34] Martin A. Phys. Lett.,1981,B100:511.
[35] Schröder H. Les Rencontres de Physique de la Vallée d'Aoste,La Thuile,1989:461 (ed. Greco M),Gif-sur-Yvette:Editions Frontières,1989.
[36] Martin A. Phys. Lett.,1989,B223:103.
[37] Cen Y. Proceedings of the 29th Rencontres de Moriond,QCD and High Energy Hadronic Interactions,Méribel 1994:497 (ed. Tran J Thanh Van). Gif-sur-Yvette:Editions Frontières,1994.
[38] Martin A. Heavy Flavours and High Energy Collisions in the 1-100 TeV Range (eds. Ali A and Cifarelli L). New York:Plenum,1989:141.
[39] Bjorken J D. Hadron Spectroscopy (ed. Oneda J). New York:AIP,1985:390;
See also Martin A,Heavy Flavours and High Energy Collisions in the 1-100 TeV Range (eds. Ali A and Cifarelli L). New York:Plenum,1989:141.
[40] Ader J P,Richard J M,Taxil P. Phys. Rev.,1982,D12:2370;
Nussinov S. Phys. Rev. Lett.,1983,51:2081;
Richard J M. Phys. Lett.,1984,B139:408.

[41] Richard J M. Phys. Lett., 1981, B100: 515.
[42] Barnes V E, et al. Phys. Rev. Lett., 1964, 12: 204.
[43] Godfrey S, Isgur N. Phys. Rev., 1985, D32: 232;
Capstick S, Isgur N. Phys. Rev., 1986, D34: 2809;
see also Chao K T, Isgur N and Karl G. Phys. Rev., 1981, D23: 155.
[44] Richard J M, Taxil P. Phys. Rev. Lett., 1985, 54: 847;
Martin A, Richard J M, Taxil P. Phys. Lett., 1986, B176: 224.
[45] Lieb E H. Phys. Rev. Lett., 1985, 54: 1987.
[46] Seiler E. Phys. Rev., 1978, D18: 133.
[47] Baumgartner B, Grosse H, Martin A. Phys. Lett., 1984, B146: 363;
Nucl. Phys., 1985, B254: 528;
Simplified proofs have been given by Ashbaugh M S and Benguria R D. Phys. Lett, 1988, A131: 273;
and finally by Martin A, Phys. Lett., 1990, A147: 1.
[48] Common A K, Martin A. Europhys. Lett., 1987, 4: 1349.
[49] Martin A, Richard J M, Taxil P. Nucl. Phys., 1990, B329: 327.
[50] Martin A, Stubbe J. Europhys. Lett., 1991, 14: 287;
Nucl. Phys., 1991, B367: 158.
[51] Engfer R, et al. At. Data Nucl. Data Tables, 1974, 14: 509.
[52] These figures are taken from Chpolsky E, Physique Atomique. Moscow: Mir, French translation, 1978.
[53] Bashkin S, Stoner Jr J O. Tables of Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams, vols. I, II. Amsterdam: North-Holland, 1978.
[54] Stubbe J, Martin A. Phys. Lett., 1991, B271: 208.
[55] Kwong W, Rosner J L. Phys. Rev., 1988, D38: 279.
[56] Grosse H, Martin A, Stubbe J. Phys. Lett., 1991: B255: 563.
[57] Grosse H. Phys. Lett., 1987, B197: 413.
[58] Grosse H, Martin A, Stubbe J. Phys. Lett., 1992, B284: 347.
[59] Quigg C, Rosner J L. Phys. Rep., 1979, 56: 167.
[60] Grosse H, Martin A. Phys. Rep., 1980, 60: 341.
[61] Martin A. Recent Developments in Mathematical Physics, Proceedings of the XXVI Universitätswochen für Kernphysik, Schladming, 1987 (eds. Mitter H and Pittner L). Berlin: Springer, 1987: 53.
[62] Martin A. Present and Future of Collider Physics (eds. Bacci C, et al.). Bologna: Italian Physical Society, 1990: 339.
[63] Martin A. From Superstrings to the real Superworld, Proceedings of the International School of Subnuclear Physics (ed. Zichichi A). Singapore: World Scientific, 1993: 482.
[64] Lucha W, Schöberl F. Phys. Rep., 1991, 200: 127.
[65] Falkensteiner P, Grosse H, Schöberl F, Hertel P. Comput. Phys. Commun., 1985, 34: 287.
[66] Chadan K, Bateman M L. Ann. I. H. P., 1975, XXIV(1): 1.

[67] Thirring W. A Course on Mathematical Physics Ⅲ, Quantum Mechanics of Atoms and Molecules. New York: Springer, 1981.
[68] Bessis J D. private communication.
[69] Feldman G, Fulton T, Devoto A. Nucl. Phys., 1979, B154: 441.
[70] Grosse H, Martin A. Phys. Lett., 1984, B134: 368.
[71] Baumgartner B, Grosse H, Martin A. Phys. Lett., 1984, B146: 363.
[72] Ashbaugh M S, Benguria R D. Phys. Lett., 1988, A131: 273.
[73] Martin A. Phys. Lett., 1990, A147: 1.
[74] Grosse H, Martin A, Pflug A. C. R. Acad. Sci. Paris, 1984, 299(série II): 5.
[75] Condon E U, Shortley G H. The Theory of Atomic Spectra. Cambridge: Cambridge University Press, 1953.
[76] Wheeler J A. Rev. Mod. Phys., 1949, 21: 133.
[77] Baumgartner B, Grosse H, Martin A. Fizika, 1985, 17: 279.
[78] Baumgartner B, Grosse H, Martin A. Nucl. Phys., 1985, B254: 528.
[79] Chadan K, Grosse H. J. Phys., 1983, A16: 955.
[80] Sukhatme U, Imbo T. Phys. Rev., 1983, D28: 418.
[81] Loeffel J J, Martin A, Simon B, Wightman A S. Phys. Lett., 1969, B30: 656.
[82] Flügge S. Practical Quantum Mechanics. New York: Springer, 1971, 1.
[83] Richard J M. private communication.
[84] Sternheimer R M. Progress in Atomic Spectroscopy, Part C (eds. Beyer H J and Kleinpoppen H). New York: Plenum, 1984.
[85] Common A K, Martin A. J. Phys. A: Math. Gen., 1987, 20: 4.
[86] Common A K, Martin A. J. Math. Phys., 1989, 30: 601.
[87] Prange R E, Girvin S M (eds.). The Quantum Hall Effect (Contemporary Physics). New York: Springer, 1987.
[88] Grosse H, Martin A, Stubbe J. Phys. Lett., 1993, A181: 7;
Grosse H, Stubbe J. Lett. Math. Phys., 1995, 34: 59.
[89] Cycon H L, Froese R G, Kirsch W, Simon B. Schrödinger Operators with Applications to Quantum Mechanics and Global Geometry (Texts and Monographs in Physics). Berlin: Springer, 1987.
[90] Common A K. J. Phys. A: Math. Gen., 1985, 18: 221.
[91] Common A K, Martin A, Stubbe J. Commun. Math. Phys., 1990, 134: 509.
[92] Conti R S, Hatamian S, Lapidus L, et al. Phys. Lett., 1993, A177. For a review prior to this experiment see Mills A P in Quantum Electrodynamics (ed. Kinoshita T). Singapore: World Scientific, 1990: 774.
[93] Kwong W, Rosner J, Quigg C. Annu. Rev. Nucl. Part. Sci., 1987, 37: 325.
[94] E 760 Collaboration, Armstrong T A, et al. Phys. Rev. Lett., 1992, 69: 2337;
This experiment confirms the signal first observed by Baglin C et al. Phys. Lett., 1986, B171: 135.
[95] Singh V, Biswas S N, Datta K. Phys. Rev., 1978, D18: 1901.

[96] Turbiner A V. Commun. Math. Phys., 1988, 118: 467.
[97] Krammer M, Krasemann H. Acta Phys. Austriaca, Suppl. XXI, 1979: 259.
[98] Martin A. Phys. Lett., 1977, B70: 194.
[99] Ref. [60], p. 359.
[100] Martin A. Phys. Rep., 1986, 134: 305.
[101] Bertlmann R, Martin A. Nucl. Phys., 1980, B168: 111.
[102] Common A K. Nucl. Phys., 1983, B224: 229;
Nucl. Phys., 1981, B184: 323.
[103] Common A K. Nucl. Phys., 1980, B162: 311.
[104] Common A K. J. Math. Phys., 1991, 82: 3111.
[105] Martin A, Stubbe J. Z. Phys., 1994, C62: 167.
[106] Palladino B E, Leal-Ferreira P. Phys. Lett., 1987, B185: 118.
[107] Kang J S, Schnitzer H J. Phys. Rev., 1975, D12: 841.
[108] Grosse H, Martin A, Stubbe J. Phys. Lett., 1992, B284: 347.
[109] Sukumar C V. J. Phys., 1985, A18: L697.
[110] Itzykson C, Zuber J B. Quantum Field Theory. New York: McGraw-Hill, 1985.
[111] Rose M E. Relativistic Electron Theory. New York: Wiley, 1961.
[112] Kelly R L. J. Phys. Chem. Ref. Data 16, 1987, Suppl. 1.
[113] Chadan K, Sabatier P C. Inverse Problems in Quantum Scattering Theory. 2nd ed. (Springer Texts and Monographs in Physics). New York: Springer, 1989.
[114] Thacker H B, Quigg C, Rosner J L. Phys. Rev., 1978, D18: 274, 288.
[115] Grosse H, Martin A. Nucl. Phys., 1979, B148: 413.
[116] Schonfeld J F, Kwong W, Rosner J L, et al. Thacker, Ann. Phys. New York, 1980, 128: 1.
[117] Kwong W, Rosner J L. Phys. Rev., 1988, D38: 273.
[118] Gasymov G M, Levitan B M. Russ. Math. Surv., 1964, 19: 1.
[119] Jost R, Kohn W. Phys. Rev., 1952, 88: 382.
[120] Boas R P. Entire Functions. New York: Academic Press, 1954.
[121] Martin A. Helv. Phys. Acta, 1972, 45: 140.
[122] Szegö G Orthogonal Polynomials, (A. M. S. colloquium publ. vol. 23), Providence, R. I.: Am. Math. Soc., 1975: 108.
[123] Nikol'skij N K. Functional Analysis I. Berlin: Springer, 1992.
[124] Schönhagen A. Approximationstheorie. Berlin: de Gruyter W., 1971: 49.
[125] Regge T. Nuovo Cimento, 1959, 14: 951.
[126] Loeffel J J, Martin A. Publication de la RCP No. 25, Vol. 11 (Département de Mathématiques, Université de Strasbourg, 1970).
[127] Lieb E H, Thirring W E. Studies in Mathematical Physics (eds. Lieb E H, Simon B, Wightman A S). Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1976: 269.
[128] Chadan K. Nuovo Cimento, 1968, A58: 191.
[129] Martin A. Helv. Phys. Acta, 1972, 45: 142.
[130] Glaser V, Martin A, Grosse H, Thirring W. Studies in Mathematical Physics (eds. Lieb E H,

Simon B, Wightman A S). Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1976: 169.
[131] Martin A. Commun. Math. Phys., 1979, 69: 89; 1980, 73: 79.
[132] Blanchard Ph, Stubbe J. Rev. Math. Phys., 1996, 8: 503.
[133] Calogero F. Commun. Math. Phys., 1965, 1: 80;
Cohn J H E. J. London Math. Soc., 1965, 40: 523.
[134] Lieb E H. Bull. Am. Math. Soc., 1976, 82: 751.
[135] Glaser V, Grosse H, Martin A. Commun. Math. Phys., 1978, 59: 197.
[136] Li P, Yau S T. Commun. Math. Phys., 1983, 88: 309.
[137] Blanchard Ph, Stubbe J, Rezende J. Lett. Math. Phys., 1987, 14: 215.
[138] Gardner C S, Greene J M, Kruskal M D, Miura R M. Commun. Pure Appl. Math., 1974, 27: 97.
[139] Aizenman M, Lieb E H. Phys. Lett., 1978, 66A: 427.
[140] Grosse H. Acta Phys. Austriaca, 1980, 52: 89.
[141] Chadan K, Martin A. Commun. Math. Phys., 1979, 70: 1.
[142] Chadan K, Martin A. Commun. Math. Phys., 1977, 53: 221;
Chadan K, Grosse H. J. Phys., 1983, A 16: 955.
[143] Nussinov S. Z. Phys., 1979, C3: 165.
[144] Martin A. Phys. Lett., 1981, B103: 51, and in The Search for Beauty, Charm and Truth(eds. Bellini G. and Ting S. C. C.). New York: Plenum, 1981: 501.
[145] This unofficial number from Opal and Delphi at LEP happens to agree with the previous indications of the Zichichi group at the ISR and of UA1.
[146] Askey R. Trans. Am. Math. Soc., 1973, 179: 71.
[147] Martin A. CERN preprint TH 6544/92, unpublished.
[148] Martin A. Phys. Lett., 1992, B287: 251.
[149] Martin A, Richard J M. Phys. Lett., 1987, B185: 426.
[150] Hall L, Post H R. Proc. Roy. Soc., 1967, 90: 381.
[151] Basdevant J L, Martin A, Richard J M, Wu T T. Nucl. Phys., 1993, B393: 111.
[152] Gonzalez-Garcia A. Few-Body Systems, 1990, 8: 73; 1991, 10: 73.
[153] Richard J M. Phys. Rep., 1992, 212: 1.
[154] Grosse H. Recent Developments in Quantum Mechanics (eds. Boutet de Monvel A, et al.). Dordrecht: Kluwer, 1991: 299.

索　　引

Abel 积分方程　88

Birman-Schwinger 约束　104

b 夸克　2,62,112

$c\bar{c}$　17

Chadan 类　110

Chebyshev 不等式　51,52,54,127

c 夸克　2,62,112

Darboux　29,124

Dirac 方程　12,18,19,72,80

Dirac-库仑问题　76

Feynman-Hellmann 定理　24,50,58,73,89,117

Gauss 定律　12

Gelfand-Levitan 方程　86,87

Hartree 近似　2,12,17,31

Klein-Gorden 方程　18,72～76,78,80,81

N 体问题　120

P 态劈裂　17

Regge 轨迹　23,27,55,94

Sobolev 不等式　129

Sturm-Liouville 理论　10,27

Thomas-Reiche-Kuhn　62

Van Royen-Weisskopf 公式　5,65

WKB 近似　28,38,56,60,61,84,88

Ω^- 重子　7

α 的符号　71

μ 原子　2,12,15～17,31,41,52,53,75,78

π 原子　2,75

变分方法　109

标度　24,25,66,68,100,102,116

波函数　81

超对称量子力学　29,121,123,124
狄拉克方程　1
电偶极矩阵元　57,69
顶夸克　3
动能　7,24,42,50,57,58,60,62～65,75,91,99,101,104,116,117,129
二维问题　24
费曼-海尔曼定理　47
高斯定理　78
极大极小原理　102
极矩　26
碱金属原子　12,17,31,52,78
渐近自由　4,10
阶梯算符　44,45,76,78
禁闭势　38,82,94
禁闭位势　81,89
矩　42,48～50,69,70,89,99,100,105,107,127
矩、零点径向波函数　57
均方半径　57,58,62
克莱因-高登方程　1
夸克　2,4,7,10,19,58,112,114
夸克偶素　1,2,7,10,12,26,31,41,53,57,58,65～67,72,75,81,114
夸克质量　9,65,66
拉普拉斯算符　10,12,19,28,30,31,48～51,54,58,62,67,69,73,75,78,100
朗道能级　42
锂序列　16,17
量子霍尔效应　42
零点　81
零点波函数　57,58,61
钠序列　16,17
能级的间距　48
能级间隔　5
能级间距　50,68
能级顺序　1,36
逆问题　55,81,82,84,86,89,90,92,101
轻子宽度　5,6
轻子衰变宽度　68
求和规则　25,26,44,62
三体　119,120
梯算符　43
位力定理　24,25,67,75

物质的稳定性　89
物质稳定性　1,2,99
一维问题　81,107,123
因子化　121
因子化方法　76,77,123
原点波函数　64
重排定理　130
重子　1,7,19,112,120
自旋-轨道　17,76
自旋-自旋　4,7,8,17
最小-最大原理　2,33