

# 浅谈量子力学中“微扰理论”的一种讲解方法<sup>\*</sup>

王龙军

(西南大学物理科学与技术学院 重庆 400715)

(收稿日期:2023-01-30)

**摘要:**量子力学中的微扰理论无论在教学中还是在实际的科研应用中都至关重要,是量子力学教学中的重点与难点之一.本文通过重庆地图的画法与探究式提问方法,提出并探讨量子力学中“非简并态微扰理论”的一种新的讲解方法.通过具体的教学实践发现,该讲解方法可以有效地帮助本科生很快地吸收和消化微扰理论的基本思想、基本逻辑以及基本的技术应用思路.

**关键词:**量子力学;微扰理论;本征方程

## 1 引言

量子力学是很多理工科专业(如物理、材料、光信息、化学等)最重要的专业课之一,也是很多高校与科研院所物理学相关专业与方向的研究生入学考试专业课之一.然而,做为探索微观世界的基本理论,量子力学的很多基本原理、基本概念、基本思想与基本应用都与传统的经典物理知识格格不入,这导致许多初学者(本科生)往往觉得量子力学课程的概念极为抽象、内容晦涩难懂、计算复杂且学习起来很枯燥乏味.在量子力学的实际授课中,学生一般都面临畏难情绪、兴趣不高、缺乏主动学习的内驱力等问题<sup>[1-3]</sup>.

面对这些实际问题,授课教师非常有必要引入不同的讲授方法进行教学改革.笔者近几年一直从事“原子物理学”“量子力学”等课程的教学工作,在教学过程中经常思考与尝试新的讲授方法,在具体的教学实践中发现很多新的讲授方法往往可以有效地提高学生学习的积极性与实际的教学效果.

(不含时)微扰理论是量子力学课程中的“应用型”内容与技术<sup>[2]</sup>,它不仅对课程后续内容的理解至关重要,还在实际的核物理、高能物理等领域的许多理论前沿研究中起关键作用.

本文中笔者简要介绍自己在实际授课中关于非

简并态微扰理论的讲解方法.

## 2 基本思路的讲解

与量子力学中很多基本概念或基本思想一样,微扰理论也具有“基本思路难以快速掌握、学习过后很容易遗忘”等特点.因此,在教学改革中可以尝试通过形象举例与提问式来进行讲解,一方面,形象举例可以帮助初学者快速理解与掌握知识背后的思想与逻辑;另一方面,通过提问可以鼓励学生主动思考,从而加深印象.对于“微扰理论”部分内容的讲解,笔者曾尝试通过西南大学所在的重庆市的地图画法,形象地引出“微扰理论”的基本思路与逻辑,具体如下文所述.

首先,可借助近年来比较流行的科幻小说《三体》做为引子.提出问题:三体人的行星所在星系有3颗质量不等的恒星,因为恒星的无规则(混沌)运动,其文明饱受摧残.我们所熟悉的日-地-月三体系统为何比较稳定,造就了地球上年复一年、四季分明的景象?

然后,提出一个问题:一个小朋友只会画简单的图形如正方形、长方形、三角形等,如何进一步教他画复杂的图形如重庆地图(图1中白色区域所示)等?我们所期待的、较好的教育方式应该是,启发和引导小朋友思考:“你觉得这个地图大概像什么呢?”

<sup>\*</sup> 中央高校基本科研业务费,项目编号:SWU-KT22050;国家自然科学基金,基金编号:11905175,12275225.

**作者简介:**王龙军(1987-),男,博士,副教授,主要从事力学、原子物理学、量子力学、原子核理论、中外文献研读等课程的教学,以及原子核物理与核天体物理方向的科研工作.

能否用你擅长画的东西一步一步画出这个复杂的重庆地图呢？”期待的答案之一便是通过三角形一步一步来画重庆地图。首先，通过重庆地图的大致轮廓画出一个合适的大三角形[图 1(a) 中实线所示]；然后，通过细心观察在此基础上借助不同的三角形在合适的地方添加或抠去一些区域[图 1(b) 中的虚线三角形]；最后，连接起来就可以得到一个近似性非常好的、复杂的重庆地图了[图 1(c) 中的粗实线所示]。

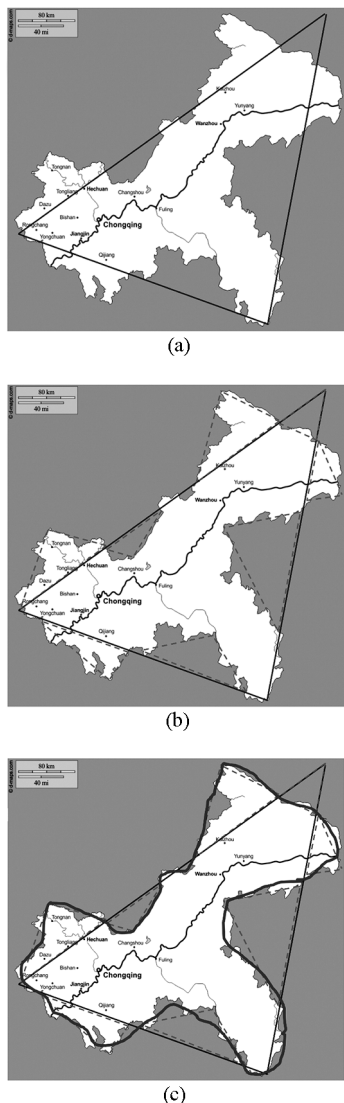


图 1 通过三角形与微扰思想画复杂的重庆地图示意图

至此，我们引导出了通过已知的简单事物一步步得到复杂事物的方法。通过这一形象的例子，可以引出“微扰理论”的主体思想与逻辑。微扰理论主要分两步。第一步，我们要解决真实的物理问题，但是这些真实的物理问题往往很难求解或者无法精确求解，怎么办呢？我们可以想办法做“微扰分解”，也就

是把复杂的真实情况分解为一个简单的情况加上一些小的扰动。微扰分解有两个要点：第一点，这些扰动必须比较小；第二点，我们必须对这些简单的情况知根知底。比如说，我们连三角形都画不好，怎么能通过一系列的三角形来画好重庆地图呢？微扰分解完了以后，就是微扰理论的第二步，也就是我们要通过知根知底的简单情况，比如图 1 中的三角形，一步一步地逼近我们想要解决的、真实的复杂问题。这里我们希望在逐级逼近的过程中，采用的方法能够快速收敛。

了解了微扰理论的思想以后，我们来分析剩下的技术问题。

### 3 基本内容的讲解

首先，还是先通过提出一个问题来引导学生思考：将一个电子放入如图 2 实线所示的一维复杂势场中，如何描述它的状态？

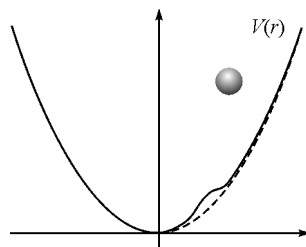


图 2 一维复杂势场中的运动

期待学生们通过讨论得到的结论是，已知（精确）势场后，通过直接求解（精确）哈密顿量的（能量）本征方程便可得到其（精确）能量与波函数，（精确）波函数有了，许多其他可观测量也进而可以得到。即（注意此处无上标，无上标皆表示精确解）

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (1)$$

然而，实际情况往往比较残酷，即学生们一般很难求得精确解。那怎么办呢？答案是我们可以通过微扰理论来求得近似解。回想微扰理论的第一步：微扰分解，即要把真实的势场分解为一个简单的大项加上一个小的微扰项。通过提问与引导，使学生们可以得到将真实的精确势场分解为一个简单的谐振子势加上一个小的微扰项的结论。考虑到动能项不变，这就对应于把精确的哈密顿量做了这样的一个微扰分解

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}' \quad (2)$$

其中  $\hat{H}^{(0)}$  为非微扰哈密顿量[上标为(0)皆表示非微扰情况],  $\lambda\hat{H}'$  为微扰项. 此时引导学生回忆微扰分解的要点是什么, 即对这一个简单的大项(非微扰项)要知根知底, 而知根知底体现在哪里呢? 答案如下[此处除了式(3)的知识外, 还可以引导学生回忆与复习量子力学中前面章节里所讲解的一维谐振子势的具体内容, 如能量与波函数的具体表达式与特点等等]:

$$\begin{cases} \hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \\ \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle = \delta_{nm} \end{cases} \quad (3)$$

至此, 我们就完成了微扰方法的第一步, 即“微扰分解”, 也就是把哈密顿量分解成了我们知根知底的一个非微扰项加上一个小的微扰项. 这里我们让微扰项乘了一个可变参数  $\lambda$ , 令其很小, 最后把它设为 1, 就可以得到想要的结果<sup>[2]</sup>. 接下来, 进行微扰理论的第二步, 即要通过已知的非微扰项来一步一步逼近我们的真实(精确)解. 为此, 我们需要把式(1)中的精确波函数与能量进行多级展开

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots \quad (4)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (5)$$

其中第一项为非微扰项, 就像图 1(a) 中的实线大三角形; 第二项为相应的一阶微扰项, 就像图 1(b) 中的虚线小三角形; 之后就是更高阶的修正了. 为了保证快速收敛, 让每一项都乘以小量  $\lambda$  的相应的幂次<sup>[2]</sup>. 至此, 可以通过提问引导学生思考下一步, 即如何得到波函数与能量的每一阶修正项的具体表达式. 通过引导期待的答案是: 解方程与合并  $\lambda$  相同阶的项. 将精确波函数与能量即将式(4)和(5)带入其所满足的本征方程即式(1)中可得

$$\begin{aligned} (\hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}')[\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots] = \\ [E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots] \cdot \\ [\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots] \end{aligned}$$

这些微扰项的表达式原则上不能依赖于可变参数  $\lambda$ . 因此, 进一步将上式展开与合并  $\lambda$  相同阶的项可得

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} + \lambda[\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(1)} + \hat{H}'\psi_n^{(0)}] + \dots = \\ E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} + \lambda[E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}] + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

首先, 让式(6)中左右两边  $\lambda$  的零阶项相等, 可以得到式(3)中的非微扰项本应该满足的能量本征

方程, 这说明了上述方法的自洽性.

然后, 让式(6)中左右两边  $\lambda$  的一阶项相等, 可以很容易得到

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)}\psi_n^{(1)} + \hat{H}'\psi_n^{(0)} = \\ E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} \end{aligned} \quad (7)$$

进一步取内积(即上式每一项左乘  $\psi_n^{(0)*}$  后全空间积分)可得

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle = \\ E_n^{(0)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

上式中等号左边的第一项可以根据非微扰哈密顿量  $\hat{H}^{(0)}$  的厄米性及其本征方程式(3)而化为等号右边的第一项, 因此, 上式中等号左右两边的第一项可以相消. 根据式(3)中非微扰波函数的正交归一性可知, 式(8)中等号右边第二项中的狄拉克符号项归一了. 因此可以很容易得到能量的一阶修正项表达式为

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (9)$$

即第  $n$  个本征能量的一阶修正, 就等于微扰哈密顿量在相应非微扰波函数上的期待值(平均值).

通过类似的方法可以很容易地得出波函数的一阶修正项及其他阶修正项的具体表达式, 笔者不再赘述, 详细可参考文献[2]中的具体内容. 在实际的授课过程中, 笔者倾向于让感兴趣的学生讲解和推导此部分内容.

#### 4 应用扩展

首先, 为了加深印象, 可以安排如图 3 所示的随堂测试. 即将一个电子放入如图 3 实线所示的一维势场中, 该势场是在一维无限深方势阱中的底部加入了线性微扰  $\beta x$ , 求基态能量(及波函数)的一阶修正?

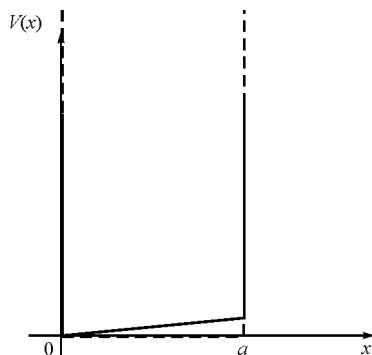


图 3 一维无限深方势阱中加微扰

然后,还可以进行一定的课外延伸.微扰理论所使用的这种通过已知的、简单的情况,一步一步逼近未知的、复杂的情况的这种思想,是很有用的工具.它被人们应用到物理研究的各个方面.比如,在天体物理中,对应于所谓的摄动理论.借助这样的理论,人们可以理解地球的运动,还曾经计算并预言了海王星的存在等.

在核物理、强子物理、高能物理等领域的微观前沿理论研究中,对应于微扰思想的理论包括量子多体微扰论<sup>[5]</sup>、有效场论<sup>[6]</sup>等等,也可以鼓励感兴趣的学生进行了解与调研.

最后,可以留一个思考题:在量子力学中如何定量地估计微扰理论到底适不适用?

## 5 总结与展望

综上所述,本文中笔者介绍了如何通过形象的重庆地图的画法与探究式提问方法讲解量子力学中的“非简并态微扰理论”知识内容与应用.笔者在多年的教学实践中发现,该方法可以帮助初学者快速理解和掌握“微扰理论”的思路、技术细节与应用,还是行之有效的.

笔者在回国后的近几年内,先后担任了力学、原

子物理学、量子力学、原子核理论等课程的教学工作,在教学过程中曾多次尝试了一些新颖的讲授方法,这些方法在具体的教学实践过程中收到了较好的教学效果,笔者也会在近期内,将这方面的内容陆续发表与讨论.

## 6 致谢

感谢与西南大学物理科学与技术学院基础物理教研室相关同事的有益探讨.

## 参考文献

- [1] 钱伯初.量子力学[M].北京:高等教育出版社,2006.
- [2] DAVID J. Griffiths, DARRELL F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics*[M]. Third Edition. United Kingdom: Cambridge University Press, 2018.
- [3] 王霞,李海凤.关于量子力学课程的教学改革与实践[J].教育教学论坛,2019(8):134-135.
- [4] 邵瀚雍.繁星无法超越——三体问题溯源[J].大学物理,2021(1):60-65.
- [5] A. Tichai, R. Roth, T. Duguet. Many-body perturbation theories for finite nuclei[J]. *Frontiers in Physics*, 2020(8):164.
- [6] R. Machleidt, D. R. Entem. Chiral effective field theory and nuclear forces[J]. *Physics Reports*, 2011(503):1-75.

# Brief Taking on a Explanation Method of “Perturbation Theory” in Quantum Mechanics

WANG Longjun

(School of Physical Science and Technology, Southwest University, Chongqing 400715)

**Abstract:** The perturbation theory in quantum mechanics plays important roles in both teaching and practical applications in scientific research, and is one of the crucial and difficult aspects for understanding. In this work I introduce a new method of teaching the nondegenerate perturbation theory based on drawing the map of Chongqing and asking questions. The method turns out to be effective and efficient for undergraduate students to understand and grasp the basic idea, basic logics and basic techniques of the perturbation theory, after many years of teaching in the Southwest University.

**Key words:** quantum mechanics; perturbation theory; eigen equation