

Methods of Mathematical Physics

§专题I: 级数方法解微分方程

Lecturer: 黄志琦

<http://zhiqihuang.top/mmp>

本讲内容

How did we get Bessel functions.

1-D harmonic oscillator in quantum mechanics

Hydrogen Atom

回顾贝塞尔方程

贝塞尔方程

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{df}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) f = 0$$

的解是怎么算出来的?

一般套路

如果 $p(z)$ 和 $q(z)$ 在圆 $|z| < R$ 解析, 则二阶微分方程

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{p(z)}{z} \frac{df}{dz} + \frac{q(z)}{z^2} f = 0$$

在去心邻域 $0 < |z| < R$ 有两个线性独立的解具有如下形式:

$$f_1(z) = z^{\rho_1} \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n,$$

$$f_2(z) = \lambda f_1(z) \ln z + z^{\rho_2} \sum_{n=0}^{\infty} d_n z^n.$$

其中 ρ_1, ρ_2 是“指标方程”

$$\rho^2 + [p(0) - 1] \rho + q(0) = 0.$$

的两个解; c_0, d_0 均非零; 仅当 $\rho_1 - \rho_2$ 为整数时, λ 才有可能需要取非零值。

实战举例：贝塞尔方程

对贝塞尔方程， $p(z) = 1$ ， $q(z) = z^2 - \nu^2$ ，指标方程为

$$\rho^2 - \nu^2 = 0.$$

其解为

$$\rho_{1,2} = \pm \nu.$$

设第一个解为

$$f_1(z) = z^\nu \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n.$$

代入贝塞尔方程，比较 $z^{n+\nu}$ 的系数，得到

$$c_n = -\frac{1}{n(n+2\nu)} c_{n-2}.$$

实战举例：贝塞尔方程

由此可以递推得出

$$c_{2n+1} = 0; \quad c_{2n} = (-1)^n \frac{\nu!}{2^{2n}(\nu+n)!} c_0. \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

如果取 $c_0 = \frac{1}{2^\nu \nu!}$ ：恭喜你，得到了第一类贝塞尔函数 $J_\nu(z)$ 的级数表达式！

如果取其他的非零 c_0 值，结果无非是 $J_\nu(z)$ 的常数倍数而已。

如果 2ν 不是整数，那么你对 $\rho_2 = -\nu$ 如法炮制，可以得到线性独立的解 $J_{-\nu}(z)$ （或它的任意非零倍数）。

实战举例：贝塞尔方程

最后，还需要讨论 2ν 是整数的情形。为了更清晰地介绍方法而不是让你们迷失于纷繁复杂的计算中，我们仅以 $\nu = 0$ 的情况为例讨论：

这时 $\rho_1 = \rho_2 = 0$ ，第二个解为：

$$f_2(z) = \lambda J_0(z) \ln z + g(z)$$

其中 $g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n z^n$ 。把 f_2 代入贝塞尔方程，得到：

$$g''(z) + \frac{1}{z}g'(z) + g(z) + \frac{2\lambda J_0'(z)}{z} = 0.$$

通过对比 z^{2n-2} 的系数，得到：

实战举例：贝塞尔方程

$$d_{2n} = -\frac{1}{4n^2}d_{2n-2} - \frac{(-1)^n \lambda}{2^{2n}(n!)^2 n}.$$

从任意非零的 λ , d_0 出发，都可以得到 d_2, d_4, \dots

我们熟知的 $N_0(z)$ ，则是取 $\lambda = \frac{2}{\pi}$, $d_0 = \frac{2}{\pi}(\gamma - \ln 2)$ (这里的 $\gamma = 0.5772\dots$ 是欧拉常数)的结果。

N_0 为何对应如此古怪的 λ 和 d_0 ? 这为了凑 N_0 的无穷远处渐近公式而所做的人为约定。只要你喜欢，完全可以取不同的 λ 和 d_0 。

量子力学的谐振子问题

我们熟知的一维谐振子的定态束缚解问题对应的薛定谔方程:

$$\psi'' - x^2\psi = -2E\psi$$

其中 E 为待定的常数 (谐振子的能量)。束缚解要求波函数 $\psi(x)$ 在无穷远处趋向于零 $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$.

先把目光放长远.....

解决这种问题的套路是：先分析无穷远处的渐近行为。
当 $|x|$ 很大时，可以近似认为

$$\psi'' - x^2\psi \approx 0$$

其粗略的解为

$$\psi \sim e^{\pm x^2/2}.$$

(它满足的方程是 $\psi'' - (x^2 - 1)\psi = 0$ ，差别不大)。
考虑到无穷远处的束缚条件，我们不太喜欢 $e^{x^2/2}$ 这个哥们，所以.....

只留下喜欢的

令 $\psi = f(x)e^{-x^2/2}$ (我们希望 f 是个比较有节制的家伙)。
代入原方程, 得到:

$$f'' - 2xf' + (2E - 1)f = 0.$$

我们准备用级数解法。但在动手之前——
我们应该意识到: 这个方程和原方程等价。而且级数解法根本不能保证 f 有节制。在一般情况下, 我们会求得一个解 $f \sim e^{x^2}$, 令人讨厌的 $e^{x^2/2}$ 又会回来。

动手

$p(x) = -2x^2, q(x) = (2E - 1)x^2$, 其指标方程为

$$\lambda^2 - \lambda = 0.$$

对数形式的解在 $x = 0$ 处发散, 所以无须考虑, 只要考虑如下形式的解

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n.$$

其中 c_0 或者 c_1 至少有一个非零。代入方程得到

$$c_{n+2} = \frac{2(n + \frac{1}{2} - E)}{(n+2)(n+1)} c_n.$$

一般情况下, 这个递推关系就是会给出一个解 $\sim e^{x^2}$, 除非——

量子力学的谐振子问题

$$c_{n+2} = \frac{2(n + \frac{1}{2} - E)}{(n+2)(n+1)} c_n.$$

对某个 n , 有

$$n + \frac{1}{2} - E = 0.$$

(好好一个无穷级数在 c_n 处断了香火)

这就是为什么谐振子的能量只能是 $n + \frac{1}{2}$ (放回合适的物理单位后这个结果应该是 $(n + 1/2)\hbar\omega$, ω 为固有圆频率)。

量子力学的氢原子问题

在研究氢原子的束缚能量本征态时，会遇到球坐标系的薛定谔方程：

$$\nabla^2\psi + \frac{2}{r}\psi = -2E\psi.$$

考虑角动量和哈密顿量的共同本征态——好吧你不知道我在说什么……没关系，其实就是由于一些对称性的考虑我们只需考虑形如 $\psi = f(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ 的解。
代入上述方程得到：

$$f'' + \frac{2}{r}f' + \left(2E + \frac{2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)f = 0.$$

套路又来了

在 r 巨大时，方程近似成为

$$f'' + 2Ef = 0.$$

如果 $E \geq 0$ ， f 在无穷远处很不像会足够快地趋向于零的样子，所以只能 $E < 0$ 。记 $E = -k^2/2$ ，则 $f \sim e^{\pm kr}$ 。

很明显， $f \sim e^{kr}$ 很不受待见——

只留下喜欢的

令 $f(r) = e^{-kr}u(r)$ (并祈祷 $u(r)$ 能有所节制), 代入原方程得到:

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

同样道理, 这个方程和原方程完全等价。当我们用级数解法求 $u(r)$ 时, 在一般情况下, 会得到 $u \sim e^{2kr}$ 的解, 复活刚刚被我们鄙视掉的 $f \sim e^{kr}$ 。

氢原子的能级

由指标方程得出 $\rho_1 = \ell$ ，我们来看 $u = r^\ell \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^n$ 是否可行，代入方程得到：

$$c_{n+1} = 2 \frac{k(n + \ell + 1) - 1}{(\ell + n + 1)(\ell + n + 2) - \ell(\ell + 1)} c_n$$

一般情况下，这个递推公式会给出一个无穷级数 $\sim e^{2kr}$ 。除非——

$$k = \frac{1}{n + \ell + 1}.$$

即

$$E = -\frac{1}{2m^2}.$$

($m = n + \ell + 1$ 为正整数)

思考题



对应 $\rho_2 = -\ell - 1$ 的解需要考虑吗?