

量子散射中格林函数多种围道积分的等价性*

胡先权¹, 欧红叶¹, 田立新¹, 李芳昱²

(1. 重庆师范大学 物理学与信息技术学院, 重庆 400047 ; 2. 重庆大学 数理学院, 重庆 400044)

摘 要 根据数学物理和复变函数论的相关定理,对量子散射理论中计算格林函数(Green's)时的围道积分的多种选择方式进行了细致的分析,对多样性的选择是否具有等价性的问题进行了认真的论证,得出了该围道积分的多种选择方式具有等价性的明确结论。

关键词 量子散射 格林函数 玻恩近似 积分围道 极点

中图分类号 :O562 ;O413

文献标识码 :A

文章编号 :1672-6693(2007)02-0001-04

The Equivalency Choice of Integration Contours in Green's Functions in the Quantum Scattering Theory

HU Xian-quan¹, OU Hong-ye¹, TIAN Li-xin¹, LI Fang-yu²

(1. College of Physics and Information Technology, Chongqing Normal University, Chongqing 400047 ;

2. College of Physics and Mathematics, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract : According to the theory of mathematics physics and complex function method, this article analyzes the choice of integration contours in Green's functions in the quantum scattering theory, draws the conclusion that the choice of manifold integration contours are equivalent.

Key word : quantum scattering ; Green's function ; Born approximation ; integration contour ; extremepoint

在散射问题中,对于高能粒子的散射问题^[1],用格林函数(Green's)与玻恩近似求解比较方便。在质心坐标系中可以化为一个质量为 m 的粒子在固定势场 $V(r)$ 中被散射的问题。写出粒子运动的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \right] \phi = E\phi \quad (1)$$

由于探测散射粒子的检测仪器远离散射靶,研究系统的散射规律时,只需研究粒子的渐近行为,波函数表现为入射波与散射波的叠加,一般形式的渐近解为

$$\Psi(r) = A \left[e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (2)$$

式中 $\frac{e^{ikr}}{r}$ 为向外传播的散射波, $f(\theta, \varphi)$ 称为散射幅,

$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ k 称为波矢。令 $U(r) = 2\mu V(r)/\hbar^2$, 可由

(1) 式得

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = U(r)\Psi \quad (3)$$

把(3)式右端 $U(r)\Psi$ 看成非齐次项,用格林函数方法^[2]求解(3)式得到形式解

$$\Psi(r) = \varphi(r) + \int_{-\infty}^{\infty} G(r-r')U(r')\Psi(r')d^3r' \quad (4)$$

其中 $\varphi(r)$ $G(r-r')$ 分别满足下列方程

$$(\nabla^2 + k^2)\varphi = 0 \quad (5)$$

$$(\nabla^2 + k^2)G(r-r') = \delta(r-r') \quad (6)$$

$\varphi(r)$ 代表波矢为 k , 能量为 $\hbar^2 k^2/2\mu$ 的自由粒子的波函数,可由边界条件决定。因为(5)式相当于(3)式中 $U(r) = 0$ 即 $V(r) = 0$ 这时没有散射波存在,所以 φ 代表入射

* 收稿日期 2007-01-08 修回日期 2007-03-06

基金项目 国家自然科学基金(No. 10575140) ,重庆市科委自然科学基金项目(No. 2005BB8267) ,重庆市教委基础理论研究基金项目(No. KJ060813)

作者简介 胡先权(1944-) 男 四川双流人 教授 理论物理领衔硕士生导师 研究方向为原子物理、数学物理。

平面波 $\varphi = e^{ik \cdot r} = e^{ikr}$ 。

格林函数 $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 对求解(4)式具有重要意义。虽然在一些著作^[2-9]中对求解 $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 作了推导,但积分回路的选择具有多样性,这多样性的选择是否具有等价性,未见文献资料给出明确的回答。有的甚至认为^[5-9]计算结果与积分回路的选择有关。文献^[9]认为人们只对有物理意义的结果感兴趣,把没有物理意义的结果舍去就是了,这种处理方式从数理逻辑的角度看显然不够严谨。笔者将证明多样性的积分回路选择具有等价性,换言之,无论选择何种积分回路,格林函数具有唯一性。

1 格林函数的确定

格林函数 $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 的具体形式可以通过积分回路求出。将 $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 与 $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 作傅立叶变换

$$\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} dk' \quad (7)$$

$$\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} g(k', \mathbf{r}') e^{ik' \cdot \mathbf{r}} dk' \quad (8)$$

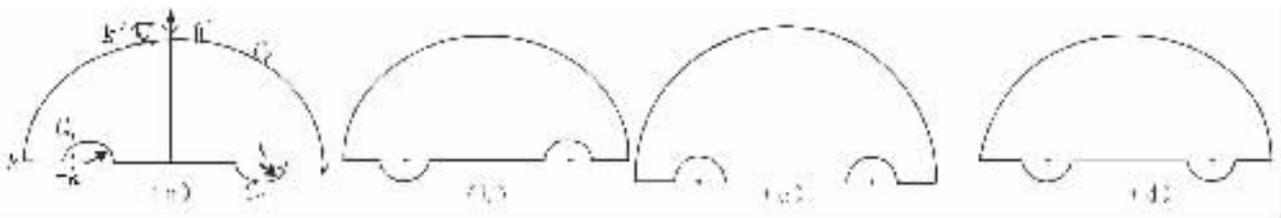


图1 4种积分回路示意图

需要说明的是,在极点 $k' = \pm k$ 附近,选择小半圆路径或任意的连续曲线路径积分的结果是相同的,因为在挖去极点后均变成解析函数的积分,由复变函数理论^[3],解析函数的积分与极点附近的路径无关,但选择小半圆路径会使积分更容易计算。对于图1所示的4种积分回路积分,有关量子理论的文献

$$\oint \mathcal{F}(k') dk' = \int_{-R}^{-k-\varepsilon_1} \mathcal{F}(k') dk' + \int_{-k+\varepsilon_1}^{k-\varepsilon_2} \mathcal{F}(k') dk' + \int_{k+\varepsilon_2}^R \mathcal{F}(k') dk' + \int_{C_R} \mathcal{F}(k') dk' + \int_{C_{\varepsilon_1}} \mathcal{F}(k') dk' + \int_{C_{\varepsilon_2}} \mathcal{F}(k') dk' \quad (11)$$

(i) (ii) (iii) (iv) (v) (vi)

取极限 $R \rightarrow \infty$, $\varepsilon_1 \rightarrow 0$, $\varepsilon_2 \rightarrow 0$ (11)式左边积分值等于 $2\pi i \sum \text{Res} \mathcal{F}(k')$, 右边第(iv)项,由约当引理^[7]可知, $\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_R} \mathcal{F}(k') dk' = 0$, 对于右边第(v)(vi)项计算如下。对于 $\int_{C_{\varepsilon_1}} \mathcal{F}(k') dk'$, 将 $\mathcal{F}(k')$ 在 $k' = -k$ 处展开为洛朗级数,由于 $k' = -k$ 是 $\mathcal{F}(k')$ 的单极点,于是有

将(7)(8)式代入(6)式得 $g_k = \frac{e^{ik \cdot r}}{k^2 - k'^2}$, 于是

$$G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k^2 - k'^2} dk'$$

选用球坐标系,先对角度积分,有

$$G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi^2 i |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k'}{k^2 - k'^2} e^{ik' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dk' \quad (9)$$

令 $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, 可将(9)式改写为

$$\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi^2 Ri} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(k') dk' \quad (10)$$

其中 $\mathcal{F}(k') = \frac{k' e^{ik'R}}{k'^2 - k^2}$ 。在(9)式的积分路径上存在两个极点 $k' = \pm k$, 均为一阶极点(9)式中的指数函数可化为三角函数^[10], 由此可判断(9)式为收敛积分,一般文献资料都是将 $\mathcal{F}(k)$ 解析延拓为复变函数,再设计如图1所示的4种积分回路进行积分,最后取极限 $R \rightarrow \infty$, $\varepsilon \rightarrow 0$ 求得计算结果。

资料都是从图1中任意选择(a)或者(b)其中一条,既然可选择(a)或者(b),为什么不可以选择(c)或者(d)有关文献资料并未指明哪一条更优越,也未明确指出4种积分回路积分是等价的,本文下面证明这4种选择方式是等价的。据图1(a)的围道 C_1 可知

$$\mathcal{F}(k') = \frac{\text{Res} \mathcal{F}(-k)}{k' + k} + P(k' + k)$$

其中 $P(k' + k)$ 为级数的解析部分,它在 C_{ε_1} 上连续有界,因此

$$\left| \int_{C_{\varepsilon_1}} P(k' + k) dk' \right| \leq \max |P(k' + k)| \int_{C_{\varepsilon_1}} |dk'| = \pi \varepsilon_1 \cdot \max |P(k' + k)|$$

所以 $\lim_{\varepsilon_1 \rightarrow \infty} \int_{C_{\varepsilon_1}} F(k' + k) dk' = 0$ 。

令 $k' = -k + \varepsilon_1 e^{i\varphi}$

$$\int_{C_{\varepsilon_1}} f(k') dk' = \int_{C_{\varepsilon_1}} \frac{Res(f(-k))}{k' + k} dk' = \int_{C_{\varepsilon_1}} \frac{Res(f(-k))}{k' + k} d(k' + k)$$

$$= i \int_{\pi}^0 \frac{Res(f(-k))}{\varepsilon e^{i\varphi}} \varepsilon e^{i\varphi} d\varphi = -i\pi Res(f(-k))$$

其中

$$Res(f(k')) = \lim_{k' \rightarrow -k} (k' + k) f(k') = \lim_{k' \rightarrow -k} e^{ik'R} \left(\frac{k'}{k' - k} \right) = \frac{1}{2} e^{-ik'R}$$

同理, 对于 $\int_{C_{\varepsilon_2}} f(k') dk'$ 有 $\int_{C_{\varepsilon_2}} f(k') dk' =$

$$\int_{C_{\varepsilon_2}} \frac{Res(f(k))}{k' - k} dk' = \pi i Res(f(k)), \text{ 其中 } Res(f(k)) = \frac{1}{2} e^{ik'R}$$

所以, 由留数定理可知

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(k') dk' = 2\pi i \sum Res(f(k')) + \pi i Res(f(-k)) - \pi i Res(f(k)) = 2\pi i Res(f(-k)) + \pi i Res(f(-k)) - \pi i Res(f(k)) = \frac{1}{2} \pi (e^{ik'R} + e^{-ik'R})$$

同理, 求出图 (b)、(c)、(d) 的围道积分主值, 将 4 种围道积分主值列于表 1。

表 1 4 种围道积分主值表

围道	C_1	C_2	C_3	C_4
积分主值	$\frac{1}{2} i\pi (e^{ik'R} + e^{-ik'R})$			

由此可见, 四种围道积分所得到的结果是相同的。于是求格林函数时, 数学上任何一种围道都允许的。这样由(10)式给出

$$\alpha(r - r') = -\frac{1}{8\pi^2 |r - r'|} i\pi (e^{ik|r-r'|} + e^{-ik|r-r'|}) = -\frac{1}{8\pi |r - r'|} (e^{ik|r-r'|} + e^{-ik|r-r'|}) \quad (12)$$

2 结果与讨论

1) 本文通过推导证明了在量子散射理论中计算格林函数时, 虽然对围道积分有多种选择方式, 基于数学物理问题受唯一性定理的限制, 这多种选择方式是等价的。

2) 在一些参考文献资料中, 将极点稍微离开实轴^[5-9] 积分回路就可以沿实轴无障碍地通过, 形成闭合回路, 然后采用极限方法将极点返回到其原来位置上, 但采用这种方式进行计算时, 有的文献^[5, 8] 采用引入积分主值和色散关系以及 $\alpha(r - r')$ 函数的方法进行处理, 处理过程比较复杂。比较简单的处理方式是设计如图 2 所示回路, 回路已经选择了上半平面, 则极点的虚部大于零, 极点必须包含在闭合回路的内部, 不能将极点设在积分回路的外部。因为如果将极点设在积分回路的外部, 闭合回路内部均为解析点, 积分必为零, 没有物理意义。



图 2 极点包含在回路内部图

对于第一个极点 $f(k') = \frac{k' e^{ik'R}}{k'^2 - (k + i\varepsilon_1)^2}$

$$\lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0} Res(f(-k + i\varepsilon_1)) = \lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0} (k' + k - i\varepsilon_1) \frac{k' e^{ik'R}}{k'^2 - (k + i\varepsilon_1)^2} = \lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0} (k' + k - i\varepsilon_1) \frac{k' e^{ik'R}}{(k' - k - i\varepsilon_1)(k' + k + i\varepsilon_1)} = \lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0} (k' + k - i\varepsilon_1) \frac{k' e^{ik'R}}{(k' - k - i\varepsilon_1)(k' + k - i\varepsilon_1 + 2i\varepsilon_1)} = \lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0} \frac{k' e^{ik'R}}{(k' - k - i\varepsilon_1)(1 + \frac{2i\varepsilon_1}{k' + k - i\varepsilon_1})} = \frac{1}{2} e^{-ik'R}$$

同理对于第二个极点 $\lim_{\varepsilon_2 \rightarrow 0} Res(f(k + i\varepsilon_2)) = \lim_{\varepsilon_2 \rightarrow 0} (k' - k - i\varepsilon_2) f(k') = \frac{1}{2} e^{ik'R}$ 最后求得的格林函数 $\alpha(r - r') = -\frac{1}{4\pi^2 Ri} \int_{-\infty}^{\infty} f(k') dk'$ 仍然为(12)式。

3) 只要波函数的渐近形式满足(2)式, 采用一级或者二级玻恩(Bohn)近似计算粒子的散射振幅时, 虽然积分回路上有奇点, 但积分回路的各种选择是等价的, 计算值与积分回路的选择无关。

4) 由(2)式条件的限制, 即波函数表现为入射波与散射波的叠加, 这是系统的散射规律即物理条

件决定的,因此相应的格林函数围道积分只能选择上半平面的辅助大半圆曲线 C_R ,不能选择下半平面的辅助大半圆曲线 C_R ,否则围道积分将变成发散积分,使得格林函数的求解变为不可能。

参考文献:

- [1] 胡先权,欧红叶,殷霖,等. 库仑修饰势在原子散射中的引用分析[J]. 重庆师范大学学报(自然科学版) 2006, 23(4):1-2.
- [2] 曾谨言. 量子力学卷 I[M]. 北京:科学出版社,1997. 505-508.
- [3] 梁昆淼. 数学物理方法[M]. 北京:高等教育出版社, 1998. 79-80.
- [4] 喀兴林. 高等量子力学[M]. 北京:高等教育出版社, 2001. 368-372.

- [5] 胡嗣柱,倪光炯. 数学物理方法[M]. 上海:复旦大学出版社,1989. 92-93.
- [6] 张永德. 量子力学卷[M]. 北京:科学出版社,2002. 294-295.
- [7] SCHIFF L I. Quantum Mechanics[M]. 3rd Edition. New York:Mcgraw-hill Book Company. 1978. 316-317.
- [8] 蔡建华,龚德昌,姚希贤. 量子统计中的格林函数[M]. 北京:科学出版社,1982. 38-48.
- [9] 方泉玉,颜君. 原子结构、碰撞与光谱理论[M]. 北京:国防工业出版社,2006. 296-297.
- [10] 周钰谦,刘倩,张健. 一类非线性波动方程的精确孤立波解[J]. 四川师范大学学报(自然科学版) 2005, 28(2):165-167.

(责任编辑 欧红叶)

研究快讯

关于不可微多目标规划的二阶 Mond-Weir 对称对偶性*

杨新民

(重庆师范大学 数学与计算机科学学院,重庆 400047)

关键词:二阶对偶模型;对偶性定理;不可微多目标规划问题

中图分类号:O221.6

文献标识码:B

文章编号:1672-6693(2007)02-0004-02

最近,Ahmad 和 Husain 在 Appl. Math. Lett.(18(7)(2005)pp.587-592)上发表了一篇关于不可微多目标规划的二阶 Mond-Weir 对称对偶性文章。然而这篇文章的强对偶性与逆对偶性定理有错误,即定理的假设条件与结论出现不相容性。在本文里,修正了 Ahmad 和 Husain 的文章错误,给出了正确的强对偶性与逆对偶性定理。

考虑下面不可微多目标规划的二阶 Mond-Weir 型对称模型

$$(MP) \text{ Minimize } K(x, y, \mu, p) = (K_1(x, y, \mu, p), K_2(x, y, \mu, p), \dots, K_k(x, y, \mu, p))$$

$$\text{s. t. } \sum_{i=1}^k \lambda_i [\nabla_y f_i(x, y) - C_i w_i + \nabla_{yy} f_i(x, y) p_i] \leq 0$$

$$y^t \sum_{i=1}^k \lambda_i [\nabla_y f_i(x, y) - C_i w_i + \nabla_{yy} f_i(x, y) p_i] \geq 0 \quad (1)$$

$$w_i^t C_i w_i \leq 1 \quad i = 1, 2, \dots, k$$

* 收稿日期 2007-02-28

资助项目:国家自然科学基金(No.10471159),教育部“新世纪优秀人才支持计划”,教育部留学回国人员科研启动基金,重庆市自然科学基金

作者简介:杨新民(1960-)男,四川泸州人,教授,博士,研究方向为数学规划。

$$\begin{aligned}
 & \lambda > 0 \\
 & x \geq 0 \\
 \text{(MD) Maximize } & G(u, v, z, r) = (G_1(u, v, z, r), G_2(u, v, z, r), \dots, G_k(u, v, z, r)) \\
 \text{s. t. } & \sum_{i=1}^k \lambda_i [\nabla_x f_i(u, v) + B_i z_i + \nabla_{xx} f_i(u, v) r_i] \geq 0 \\
 & u^t \sum_{i=1}^k \lambda_i [\nabla_x f_i(u, v) + B_i z_i + \nabla_{xx} f_i(u, v) r_i] \leq 0 \\
 & z_i^t B_i z_i \leq 1 \quad i = 1, 2, \dots, k \\
 & \lambda > 0 \\
 & v \geq 0
 \end{aligned} \tag{2}$$

其中

$$\begin{aligned}
 K(x, y, w, p) &= f(x, y) + (x^t B_i x)^{\frac{1}{2}} - y^t C_i w_i - \frac{1}{2} P_i^t \nabla_{yy} f_i(x, y) p_i, \\
 G_i(u, v, z, r) &= f_i(u, v) - (v^t C_i v)^{\frac{1}{2}} + u^t B_i z_i - \frac{1}{2} r_i^t \nabla_{xx} f_i(u, v) r_i
 \end{aligned}$$

$\lambda_i \in \mathbf{R}$ $p_i \in \mathbf{R}^m$ $r_i \in \mathbf{R}^n$ $i = 1, 2, \dots, k$ 和 f_i $i = 1, 2, \dots, k$ 是从 $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m$ 到 \mathbf{R} 的三次可微函数, B_i 和 C_i $i = 1, 2, \dots, k$ 是半正定矩阵 $r = (r_1, r_2, \dots, r_k)$ $w = (w_1, w_2, \dots, w_k)$ 和 $z = (z_1, z_2, \dots, z_k)$ 。

定理 1 (强对偶性) 设 f 从 $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m$ 到 \mathbf{R} 的三次可微函数且 $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{\lambda}, \bar{w}, \bar{p})$ 是 (MP) 的一个弱有效解, 在 (MD) 里 $\lambda = \bar{\lambda}$ 固定。假设

$$1) \nabla_{yy} f_i (i = 1, 2, \dots, k) \text{ 是正定矩阵且 } \sum_{i=1}^k \bar{\lambda}_i \bar{p}_i^t [\nabla_y f_i - C_i \bar{w}_i] \geq 0,$$

$$\text{或 } \nabla_{yy} f_i (i = 1, 2, \dots, k) \text{ 是负定矩阵且 } \sum_{i=1}^k \bar{\lambda}_i \bar{p}_i^t [\nabla_y f_i - C_i \bar{w}_i] \leq 0;$$

2) 向量 $\{\nabla_y f_1 - C_1 \bar{w}_1 + \nabla_{yy} f_1 \bar{p}, \nabla_y f_2 - C_2 \bar{w}_2 + \nabla_{yy} f_2 \bar{p}_2, \dots, \nabla_y f_k - C_k \bar{w}_k + \nabla_{yy} f_k \bar{p}_k\}$ 是线性无关。

其中 $f_i = f_i(\bar{x}, \bar{y})$ $i = 1, 2, \dots, k$ 则 $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{\lambda}, \bar{z}, \bar{r} = 0)$ (MD) 的可行解且 (MP) 和 (MD) 有相同的目标值。如果 Ahmad 和 Husain 的文章中定理 3.1 假设成立, 则 $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{\lambda}, \bar{z}, \bar{r} = 0)$ (MD) 的一个有效解。

定理 2 (逆对偶性) 设 f 从 $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m$ 到 \mathbf{R} 的三次可微函数且 $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}, \bar{w}, \bar{p})$ 是 (MD) 的一个弱有效解, 在 (MP) 里 $\lambda = \bar{\lambda}$ 固定。假设

$$1) \nabla_{yy} f_i (i = 1, 2, \dots, k) \text{ 是正定矩阵且 } \sum_{i=1}^k \bar{\lambda}_i \bar{r}_i^t [\nabla_x f_i + B_i \bar{z}_i] \geq 0,$$

$$\text{或 } \nabla_{yy} f_i (i = 1, 2, \dots, k) \text{ 是负定矩阵且 } \sum_{i=1}^k \bar{\lambda}_i \bar{r}_i^t [\nabla_x f_i + B_i \bar{z}_i] \leq 0;$$

2) 向量 $\{\nabla_x f_1 + B_1 \bar{z}_1 + \nabla_{xx} f_1 \bar{r}_1, \nabla_x f_2 + B_2 \bar{z}_2 + \nabla_{xx} f_2 \bar{r}_2, \dots, \nabla_x f_k + B_k \bar{z}_k + \nabla_{xx} f_k \bar{r}_k\}$ 是线性无关

其中 $f_i = f_i(\bar{u}, \bar{v})$ $i = 1, 2, \dots, k$ 。则 $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}, \bar{w}, \bar{p} = 0)$ (MP) 的可行解且 (MD) 和 (MP) 有相同的目标值。如果 Ahmad 和 Husain 的文章中定理 3.1 假设成立, 则 $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}, \bar{w}, \bar{p} = 0)$ (MP) 的一个有效解。

(责任编辑 黄颖)