

Levinson 定理及其在相对论量子力学中的推广

倪光炯

(复旦大学)

摘 要

本文先用 Green 函数方法证明非相对论量子力学中的 Levinson 定理有如下形式:

$$n_l = \frac{1}{\pi} [\delta_l(0) - \delta_l(\infty)] - \frac{(-1)^l}{2} \sin^2 \delta_l(0),$$

然后导出了它在 Dirac 方程中的推广形式为:

$$n_\kappa^{(+)} - n_\kappa^{(-)} = \frac{1}{\pi} [\delta_\kappa(m) - \delta_\kappa(\infty) + \delta_\kappa(-\infty) - \delta_\kappa(-m)] \\ - \frac{\kappa}{|\kappa|} \frac{(-1)^\kappa}{2} [\sin^2 \delta_\kappa(m) + \sin^2 \delta_\kappa(-m)].$$

对于 Klein-Gordon 方程,则可以有两种形式:

$$n_l^{(+)} \pm n_l^{(-)} = \frac{1}{\pi} \{ \delta_l(m) - \delta_l(\infty) \pm [\delta_l(-m) - \delta_l(-\infty)] \} \\ - \frac{(-1)^l}{2} [\sin^2 \delta_l(m) \pm \sin^2 \delta_l(-m)].$$

文中对此定理的含义、应用范围及有关问题作了讨论,并就方势阱的 s 态问题,检验了这些公式。

一、引 言

非相对论量子力学中的 Levinson 定理^[1,2]可叙述如下:一粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动, $V(r)$ 满足条件 $\int_0^a r |V(r)| dr < \infty$ 及 $\int_b^\infty r^2 |V(r)| dr < \infty$, 则散射态波函数在零动能(零动量)下之分波相移 $\lim_{k \rightarrow 0} \delta_l(k) = \delta_l(0)$ 与粒子在该势场中具有同一轨道角动量 l 的束缚态能级数目 n_l (不计磁量子数的简并度),有如下的联系:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_l(0) = \pi \left(n_l + \frac{1}{2} \right), \quad \text{如 } l = 0, \text{ 且 } \lim_{k \rightarrow 0} f_0(k) = 0, \\ \delta_l(0) = \pi n_l, \quad \text{其它情形.} \end{array} \right\} \quad (1.1)$$

在通常的证明方法中, Jost 函数 $f_l(k)$ 的解析性是十分重要的。

看来,在实际应用中,对 Levinson 定理往往注意不够。例如在低能 s 波散射的有效方程分析法中,常定义一个散射长度 a :

$$-\frac{1}{a} = \lim_{k \rightarrow 0} [k \cot \delta_0(k)]. \quad (1.2)$$

有时把此式进一步简化成

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k} \quad (1.3)$$

并从势场 $V(r)$ 能容纳束缚态波函数的分析指明 $a > 0$, 则由 (1.3) 式 $\delta_0(0) < 0$, 这就与吸力势场中相移必定为正的一般规则(见下面定理二)矛盾,也与 (1.1) 式不符。为了避免这种含糊情形的发生,我们希望对这个定理给一个比较直观的证明。本文采用的 Green 函数方法,在精神上同 Jauch^[3] 和 Martin^[4] 的证明方法有类似之处,但可能更简捷一些,并较易于推广到相对论方程的情形,因为在后面的情形中,看来是很难采用解析性的严格证明方法的。我们的讨论将都限于定域的中心势场 $V(r)$ 是无奇性的短程势而行为良好的情形。

二、Schrödinger 方程的情形

我们证明 Levinson 定理的方法分两步走,先证明在吸引力势场增强时具有角动量 l 的束缚态增加的数目等于散射态中减少的数目,再给出后一数目与散射相移的联系。

1. 数学准备

记无势场情形下定态 Schrödinger 方程之解为 $\phi(\mathbf{r})$:

$$H_0 \phi(\mathbf{r}) \equiv - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

有中心势场 $V(r)$ 时之定态解为 $\psi(\mathbf{r})$:

$$H \psi(\mathbf{r}) \equiv - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

用球坐标作分波展开后, $\psi(\mathbf{r})$ 的渐近行为是

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l)}{kr}. \quad (2.3)$$

这里定义了相移 $\delta_l \equiv \delta_l(k) = \delta_l(E)$. (2.1) 式的推迟 Green 函数由下式定义:

$$(E - H_0 + i\eta) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.4)$$

$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ 的 Fourier 变换 (令 $\hbar = c = 1$)

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) e^{-iE(t-t')} dE, \quad (2.5)$$

$$\text{满足方程} \quad \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (2.6)$$

它们都可用(2.1)式解出的本征函数展开:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{\nu} \frac{\phi_{\nu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\nu} + i\eta}. \quad (2.7)$$

其中 ν 标记各量子数 (可以是 \mathbf{k} 或 k, l, m), $\phi_{\nu}(\mathbf{r})$ 为归一化的本征函数.

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = -i \sum_{\nu} \phi_{\nu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}') e^{-iE_{\nu}(t-t')} \theta(t - t'), \quad (2.8)$$

以(2.7)代入(2.5)式,(2.8)代入(2.6)式,(2.7)代入(2.4)式,并用完备性定理

$$\sum_{\nu} \phi_{\nu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.9)$$

上述各式都不难证明. 对于有势场的情形, 只须改 $H_0 \rightarrow H = H_0 + V$, $\phi_{\nu}(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_{\nu}(\mathbf{r})$, 此时 $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ 变为 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$, 两者有如下的联系:^[5]

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) V(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; E) d\mathbf{r}''. \quad (2.10)$$

现在我们限于讨论中心势情况, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, 把(2.4)式及相应之方程

$$(E - H_0 - V(r) + i\eta) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.11)$$

按球坐标展开, 令

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_l \sum_m Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi') G^l(r, r'; E), \quad (2.12)$$

$$\text{即得} \quad \left[E + \frac{1}{2mr^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - V(r) - \frac{l(l+1)}{2mr^2} + i\eta \right] G^l(r, r'; E) = \frac{\delta(r-r')}{rr'}$$

$$\text{令} \quad \psi_{lv}(\mathbf{r}) = \frac{u_{lv}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$\text{则} \quad G^l(r, r'; E) = \sum_{E_{\nu}} \frac{u_{lv}(r) u_{lv}^*(r')}{rr'(E - E_{\nu} + i\eta)}. \quad (2.13)$$

$u_{lv}(r)$ 满足方程

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{lv}(r) + \left[2mE_{\nu} - 2mV - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{lv}(r) = 0. \quad (2.14)$$

$u_{lv}(r)$ 满足边界条件 $u_{lv}(0) = 0$, 当 $E_{\nu} > 0$, $2mE_{\nu} = k_v^2 = k^2$,

$$u_{lv}(r) = u_{lk}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l(k)\right), \quad (2.15)$$

(2.12)代入(2.10)式,就有

$$G^l(r, r'; E) = G_0^l(r, r'; E) + \int_0^{\infty} G_0^l(r, r''; E) V(r'') G^l(r'', r'; E) r''^2 dr''. \quad (2.16)$$

2. 渐近完备性定理

现在我们来建立状态数目和 Green 函数虚部之间的联系. 在(2.13)式中利用公式

$$\frac{1}{E - E_{\nu} \pm i\eta} = \frac{P}{E - E_{\nu}} \mp i\pi\delta(E - E_{\nu}), \quad (2.17)$$

令 $r = r'$, 乘以 $r^2 dr$ 后对 r 积分, 则

$$lm \int G^l(r, r; E) r^2 dr = -\pi \sum_{E_{\nu}} \delta(E - E_{\nu}). \quad (2.18)$$

$$\text{同理} \quad \text{Im} \int G_0^l(r, r; E) r^2 dr = -\pi \sum_{E_{\nu'}} \delta(E - E_{\nu'}), \quad (2.19)$$

注意在(2.19)式中 $E_{\nu'} > 0$ 。而在(2.18)式中,既有 $E_{\nu} > 0$, 也有 $E_{\nu} < 0$ 。由此可见势场 $V(r)$ 中束缚态数目 n_l 可表示为:

$$n_l = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} dE. \quad (2.20)$$

(2.20) 式中的 $G_0^l(r, r; E)$ 是可以去掉的, 这样写法是因为可以证明下面这个定理。

定理一

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} = n_l, \quad (2.20)$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_0^{\infty} dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} = -n_l, \quad (2.21)$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} = 0. \quad (2.22)$$

[证]: 利用(2.13)式及 $G_0^l(r, r'; E) = \sum_{E_{\nu'}} \frac{u_{l\nu'}^{(0)}(r) u_{l\nu'}^{(0)*}(r')}{rr'(E - E_{\nu'} + i\eta)}$,

$$\text{选} \quad u_{l\nu'}^{(0)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_0 \sin\left(k_{\nu'} r - \frac{l}{2} \pi\right) \quad (2.23)$$

中之 $A_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$, 使满足如下之连续谱动量归一化条件:

$$\int_0^{\infty} u_{l\nu'}^{(0)*}(r) u_{l\nu'}^{(0)}(r) dr = \delta(k_{\nu} - k_{\nu'}), \quad (2.24)$$

则(2.16)式乘 $r^2 dr$, 对 r 积分后成为 (令 $r = r'$):

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} G_0^l(r, r''; E) V(r'') G^l(r'', r; E) r''^2 r^2 dr'' dr \\ &= \sum_{E_{\nu}} \sum_{E_{\nu'}} \iint \frac{u_{l\nu'}^{(0)}(r) u_{l\nu'}^{(0)*}(r')}{E - E_{\nu'} + i\eta} V(r') \frac{u_{l\nu'}(r') u_{l\nu'}^*(r)}{E - E_{\nu'} + i\eta} dr dr' \end{aligned} \quad (2.25)$$

(式中 对 E_{ν} 或 $E_{\nu'} > 0$ 的累和理解 为 对 k_{ν} 或 $k_{\nu'}$ 积分), 此式包含两类积分:

(i) $E_{\nu} > 0, E_{\nu'} > 0$,

由方程(2.14) (改 $\nu \rightarrow \nu'$) 及 $u_{\nu'}^{(0)}(r)$ 所满足之方程, 可得

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\nu} | V | \phi_{\nu'} \rangle &\equiv \int_0^{\infty} u_{l\nu'}^{(0)*}(r') V(r') u_{l\nu'}(r') dr' \\ &= (E_{\nu'} - E_{\nu}) \left\{ \langle \phi_{\nu} | \phi_{\nu'} \rangle - e^{i\delta_l} \left[\cos \delta_l (\delta(k - k') + (-1)^{l+1} \delta(k + k')) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sin \delta_l \left(\frac{\cos(k' - k)R}{\pi(k' - k)} + (-1)^{l+1} \frac{\cos(k' + k)R}{\pi(k' + k)} \right)_{R \rightarrow \infty} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

其中已取(2.15)式中之 $A = e^{i\delta_l} \sqrt{\frac{2}{\pi}}$, 并用了 $u_{\nu}^{(0)}(0) = u_{\nu'}(0) = 0$ 。(2.26)式的推导有些与后面(2.45)–(2.47)式类似, 故不详。

而
$$\langle \phi_v | \phi_{v'} \rangle \equiv \int_0^\infty u_v^{(0)*}(r') u_{v'}(r') dr'. \quad (2.27)$$

于是(2.25)式右端出现之矩阵元当 $E_v > 0, E_{v'} > 0$ 时为:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | V | \phi_{v'} \rangle &= (E_{v'} - E_v) \\ &\times \left\{ |\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle|^2 - e^{i\delta_l} \langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \left[\cos \delta_l (\delta(k - k') + (-1)^{l+1} \delta(k + k')) \right. \right. \\ &\left. \left. + \sin \delta_l \left(\frac{\cos(k' - k)R}{\pi(k' - k)} + (-1)^{l+1} \frac{\cos(k' + k)R}{\pi(k' + k)} \right)_{R \rightarrow \infty} \right] \right\}^D. \end{aligned} \quad (2.28)$$

(ii) $E_v > 0, E_{v'} < 0$

此时 $|\phi_{v'}\rangle$ 对应于束缚态波函数, $u_{v'}(r') \xrightarrow{r' \rightarrow \infty} 0$, 上面推导结果中整个后面一项就看不见了, 我们有:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | V | \phi_{v'} \rangle &= (E_{v'} - E_v) |\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle|^2. \\ &(E_v > 0, E_{v'} < 0) \end{aligned} \quad (2.29)$$

将(2.28)和(2.29)式代入(2.25)式, 再展开

$$\begin{aligned} \frac{1}{(E - E_v + i\eta)(E - E_{v'} + i\eta')} &= \left[\frac{1}{E - E_v + i\eta} - \frac{1}{E - E_{v'} + i\eta'} \right] \frac{1}{E_v - E_{v'} + i(\eta' - \eta)} \\ &= \left[P \frac{1}{E - E_v} - i\pi\delta(E - E_v) - P \frac{1}{E - E_{v'}} \right. \\ &\left. + i\pi\delta(E - E_{v'}) \right] \left[P \frac{1}{E_v - E_{v'}} - i\pi\delta(E_v - E_{v'}) \right], \end{aligned}$$

(其中假定 $(\eta' - \eta) > 0$, 相反的情形不改变下面定理的结果), 故对 E 积分后:

$$\begin{aligned} &Im \int dE \int_0^\infty [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \\ &= -\pi \int dE \iint P \frac{\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | V | \phi_{v'} \rangle}{E_v - E_{v'}} \delta(E - E_v) dk_v dk_{v'} \\ &+ \pi \int dE \iint P \frac{\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | V | \phi_{v'} \rangle}{E_v - E_{v'}} \delta(E - E_{v'}) dk_v dk_{v'} \\ &- \pi \int dE \iint P \frac{\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | V | \phi_{v'} \rangle}{E - E_v} \delta(E_v - E_{v'}) dk_v dk_{v'} \\ &+ \pi \int dE \iint P \frac{\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | V | \phi_{v'} \rangle}{E - E_{v'}} \delta(E_v - E_{v'}) dk_v dk_{v'} \\ &+ \pi \sum_{E_{v'} < 0} \int dE \int |\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle|^2 \delta(E - E_v) dk_v \\ &- \pi \sum_{E_{v'} < 0} \int dE \int |\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle|^2 \delta(E - E_{v'}) dk_v \\ &- \pi \sum_{E_{v'} < 0} \int dE \int P \frac{(E_{v'} - E_v) |\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle|^2}{E - E_v} \delta(E_v - E_{v'}) dk_v \\ &+ \pi \sum_{E_{v'} < 0} \int dE \int P \frac{(E_{v'} - E_v) |\langle \phi_{v'} | \phi_v \rangle|^2}{E - E_{v'}} \delta(E_v - E_{v'}) dk_v. \end{aligned} \quad (2.30)$$

1) 后面为复数的含中括号的一项在下面对 k 或 k' 的积分后等于零。

这八项积分中,第七、八两项必分别为零(因有 $\delta(E_v - E_{v'})$ 而 $E_v > 0, E_{v'} < 0$). 第三及第四两项积分因都有 $\delta(E_v - E_{v'})$,亦必定互相消去. 如果对 E 的积分限从 $-\infty \rightarrow \infty$, 则第一项和第二项,第五项和第六项,也都分别抵销,这就证明了(2.22)式.

而如果我们限制 E 的积分区间为 $(-\infty, 0)$, 则第五和—、二项积分为零,留下第六项为

$$\begin{aligned} & -\pi \sum_{E_{v'} < 0} \int_0^{\infty} dk_v \int_{-\infty}^0 |\langle \psi_{v'} | \phi_v \rangle|^2 \delta(E - E_{v'}) dE \\ & = -\pi \sum_{E_{v'} < 0} \int_0^{\infty} |\langle \psi_{v'} | \phi_v \rangle|^2 dk_v = -\pi \sum_{E_{v'} < 0} \int_0^{\infty} \langle \psi_{v'} | \phi_v \rangle \langle \phi_v | \psi_{v'} \rangle dk_v \\ & = -\pi \sum_{E_{v'} < 0} |\langle \psi_{v'} | \phi_v \rangle|^2 = -\pi n_l, \end{aligned}$$

这就是(2.20)式. 如果限制 E 的积分范围为 $(0, \infty)$, 则—、二两项相消,第六项积分为零,留下第五项等于 πn_l , 这就是(2.21)式. 于是定理一证毕.

我们称定理一为“渐近完备性定理”,它告诉我们: 势场 $V(r)$ 的存在并不改变状态的总数,而只是把一部分散射态从 $E > 0$ “拉下来”,成为 $E < 0$ 的束缚态,这一点乃是本征函数系完备性的又一种表现. 由于连续谱能级不可数,我们可以用简单的模型来说明这一点. 考虑一个三维方势阱

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (2.31)$$

把它放在一个大球(半径为 $R, R \gg a$)的中央,为简单计,只看 s 态 ($l=0$). 由边界上 $r=R$ 处波函数为零的条件,一切本征态,包括 $E > 0$ 的散射态能级都分立了,于是可仿照文献[7]中的办法,具体地看到随着 V_0 的增大,那些最低的散射态能级逐个地连续地转变为束缚态能级.

3. Levinson 定理的证明

由上述可见,对一定的 l 分波而言,束缚态能级的数目就等于被势场拉下来的散射态能级数. 下一步我们要弄清楚,由于加上势场而少掉的散射态数目同相移有什么关系. 为此先证明

定理二 设在势场 $\lambda V(r)$ 中散射态的径向波函数 $u_{lk}(r, \lambda)$ 有如下的渐近行为¹⁾:

$$u_{lk}(r, \lambda) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l(k, \lambda) \right) \quad (2.32)$$

$$\text{则} \quad \frac{\partial}{\partial \lambda} \delta_l(k, \lambda) = -\frac{\pi m}{\hbar^2 k} \int_0^{\infty} V(r) [u_{lk}(r, \lambda)]^2 dr \quad (2.33)$$

[证]: 按(2.14)式分别写出 $u_{lk}(r, \lambda)$ 和 $u_{lk}(r, \lambda + \Delta\lambda)$ 所满足的方程,将前者乘上 $u_{lk}(r, \lambda + \Delta\lambda)$, 减去乘上了 $u_{lk}(r, \lambda)$ 的后一方程,对 r 从 $0 \rightarrow \infty$ 积分,利用 $u_{lk}(0, \lambda) = 0$ 及(2.32)式,再令 $\Delta\lambda \rightarrow 0$, 即得(2.33)式^[8].

定理二告诉我们,当一个吸力势场 ($V(r) < 0$) 由零逐渐增强时,各分波的相移

1) 从这里以下,我们略去因子 $e^{i\delta_l}$, 使 $u_{lk}(r)$ 为实函数,这样不影响结果而可使式子简洁些.

$\delta_l > 0$, 且单调地增大: $\frac{\partial \delta_l}{\partial \lambda} \geq 0$, 但在 $k = 0$ 处, 由(2.33)式可见, $\frac{\partial \delta_l}{\partial \lambda}$ 可能不连续.

另外, 相移的一级 Born 近似值为:

$$\tan \delta_l = -k \int_0^\infty [j_l(kr)]^2 \frac{2mV(r)}{\hbar^2} r^2 dr. \quad (2.34)$$

其高能极限

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \tan \delta_l = -\frac{1}{k} \int_0^\infty \sin^2 \left(kr - \frac{l}{2} \pi \right) \frac{2m}{\hbar^2} V(r) dr \rightarrow 0 \quad (2.35)$$

对于低能情形, 展开

$$j_l(kr) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} (kr)^l, \quad (2.36)$$

设 $V(r)$ 是力程为 a 的短程势, 对 $l > ka$ 仍可用(2.34)作近似估计, 得

$$\tan \delta_l \sim k^{2l+1}. \quad (k \text{ 小且 } l > ka) \quad (2.37)$$

由此可见, 对 $l \geq 1$ 各分波,

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_l(k) = n\pi \quad (l \geq 1) \quad (2.38)$$

而对于 $l = 0$ 的 s 波, 需另外讨论.

有了这些准备知识, 我们以势场 $\lambda V(r)$ 的中心为球心, 作一个半径 R 足够大的球, 让(2.32)式所示的散射波在球壁内形成驻波, 即由

$$kR - \frac{l}{2} \pi + \delta_l(k, \lambda) = N\pi, \quad (2.39)$$

使各 k 值分立. 根据(2.35)式, 我们可指定一个最大的 k_M , 使它的相移在 $\lambda = 1$ 时也可忽略, 于是动量比 k_M 更大的各散射波可不予考虑. 比 k_M 小一个编号的波, 它在 $0 \rightarrow R$ 范围的节点数比 k_M 波少一个. 依此类推.

现在让势场逐渐增强, 这些波的相移都随之增大, 我们特别注意能量最低的那二个 s 波, 最低的一个 k_1 , 其径向波函数 $u_{0k_1}(r)$ 除在 $r = 0$ 和 R 有二个节点外, 中间没有节点, 次最低的一个 k_2 波, 则在中间有一个节点. 当势从零增强, 而在阱内 ($r < a$) 还不足以把 $u_{0k_1}(r)$ 弯到水平之前, $\lim_{k_1 \rightarrow 0} \delta_0(k_1) = 0$ ($k_1 \rightarrow 0$ 的极限对应于 $R \rightarrow \infty$), 直到 $u_{0k_1}(r)$ 被弯成水平, $\delta_0(0) = \pi/2$. 此时势阱刚好容纳一个 $E = 0$ 的“虚态”, (散射长度 $a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k}$ 此时变为 $-\infty$), 其波函数不能在阱附近归一化, 故又叫做“半束缚态”. 在这以后, 当势阱开始能把波函数弯下来, 也就是开始能容纳一个束缚态的时候, $\delta_0(0)$ 又突变为 π , 我们注意这时在阱内形成了一个有一个节点的束缚态 ($E < 0$), 原来 $E > 0$ 的最低散射态 $u_{0k_1}(r)$ 实际上消失了, 代替它位置的正是原来的 $u_{0k_2}(r)$. 这就是说, s 波的散射态被势场拉掉了一个, 而这一过程伴随着零动量分波相移的突增: $\delta_0(0)$ 由 0 经 $\pi/2$ 跳变到 π .

对于 $l \geq 1$ 的各分波, 也可作类似的讨论, 但由(2.38)式可见 $\delta_l(0)$ 不可能为 $\pi/2$, 原因是离心势垒的存在把 $E = 0$ 这种态真的束缚住了, 于是现在 $\delta_l(0)$ 从 0 一下子跳到 π .

λ 如此增大直到 1 为止, 在这过程中除 $l = 0$ 的 s 态恰好出现一个 $E = 0$ 的半束缚能级时, 相移 $\delta_0(0)$ 需加上 $\pi/2$ 外, 属于 l 分波的散射态每减少一个, 相移 $\delta_l(0)$ 便

增加 π 。这一结论同前面关于散射态每少一个, 束缚态便增加一个的结论合起来, 就是 Levinson 定理(1-1)式。

最近, Jackiw 和 Woo 对一维情形的 Levinson 定理, 也作了类似的论证^[9]。但是下面我们要仿照 Friedel 的办法^[10], 另外作一个形式上更严谨些的证明, 这就是

定理三

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_0^{\infty} dE \left\{ \int_0^{\infty} [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} \\ = \frac{1}{\pi} [\delta_l(\infty) - \delta_l(0)] + \frac{(-1)^l}{2} \sin^2 \delta_l(0). \quad (2.40)$$

显然, 定理一、三合起来, 直接给出对非奇性势的 Levinson 定理:

$$n_l = \frac{1}{\pi} [\delta_l(0) - \delta_l(\infty)] - \frac{(-1)^l}{2} \sin^2 \delta_l(0). \quad (2.41)$$

再由上面讨论看出, (2.41) 等价于(1.1)式。

现在我们来证明(2.40)式。它的左方被积函数中的二个 Green 函数, 如果分别按(2.7)和(2.13)的分立本征函数展开式代入, 而各自的本征函数又都归一化的话, 则象(2.18)和(2.19)所示, (2.40)式左方只不过表示由于加入势场后散射态减少的数目再乘(-1), 即等于(- n_l), 就是(2.21)式。现在我们让 $u_{lk}^{(0)}(r)$ 按(2.24)式的连续谱归一化, 而要求 $u_{lk}(r)$ 在无穷远的自由边界条件下满足如下的渐近行为¹⁾:

$$u_{lk}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l(k) \right), \quad (2.42)$$

将(2.7)和(2.13)式代入(2.40)左端, 用(2.17)式, 先完成对 E 的积分, 就可改写为:

$$(2.40) \text{ 式左端} = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dk \int_0^R [u_{lk}^2(r) - u_{lk}^{(0)2}(r)] dr, \quad (2.43)$$

下一步计算 $\int_0^R u_{lk}^2(r) dr$ 和 $\int_0^R u_{lk}^{(0)2}(r) dr$ 这两个积分之差。我们利用公式^[11] (略去 l 脚标):

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R u_{k_1}(r) u_{k_2}(r) dr \\ = \frac{1}{k_2^2 - k_1^2} \lim_{R \rightarrow \infty} \left[u_{k_2}(r) \frac{d}{dr} u_{k_1}(r) - u_{k_1}(r) \frac{d}{dr} u_{k_2}(r) \right]_{r=R} \quad (2.44)$$

此式不难从方程(2.14)直接推出, 已用了边界条件 $u_k(0) = 0$ 。以(2.42)式代入, 即得:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R u_{k_1}(r) u_{k_2}(r) dr \\ = \frac{2}{\pi(k_2^2 - k_1^2)} \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{k_1 + k_2}{2} + \frac{k_1 - k_2}{2} \right) \sin \theta_2 \cos \theta_1 \right. \\ \left. - \left(\frac{k_1 + k_2}{2} - \frac{k_1 - k_2}{2} \right) \cos \theta_2 \sin \theta_1 \right] \\ = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\sin [(k_2 - k_1)R + \delta_l(k_2) - \delta_l(k_1)]}{\pi(k_2 - k_1)} \right\}$$

1) 这样做法与(2.26)–(2.28)诸式中对 u_{lv} 的选取一致。

$$-\frac{\sin[(k_2 + k_1)R - l\pi + \delta_l(k_2) + \delta_l(k_1)]}{\pi(k_1 + k_2)} \}. \quad (2.45)$$

同理

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R u_{k_1}^{(0)}(r) u_{k_2}^{(0)}(r) dr = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\sin[(k_2 - k_1)R]}{\pi(k_2 - k_1)} - \frac{\sin[(k_2 + k_1)R - l\pi]}{\pi(k_2 + k_1)} \right\}, \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \therefore \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R [u_{k_1}(r) u_{k_2}(r) - u_{k_1}^{(0)}(r) u_{k_2}^{(0)}(r)] dr \\ = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\pi(k_2 - k_1)} 2 \cos \left[(k_2 - k_1)R + \frac{\delta_l(k_2) - \delta_l(k_1)}{2} \right] \sin \left[\frac{\delta_l(k_2) - \delta_l(k_1)}{2} \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{\pi(k_2 + k_1)} 2 \cos \left[(k_2 + k_1)R + \frac{\delta_l(k_2) + \delta_l(k_1)}{2} - l\pi \right] \sin \left[\frac{\delta_l(k_2) + \delta_l(k_1)}{2} \right] \right\}. \end{aligned}$$

现在取 $k_2 \rightarrow k_1 = k$ 的极限, 并与对 R 取极限交换次序, 则

$$\begin{aligned} \lim_{k_2 \rightarrow k_1(k)} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R [u_{k_1}(r) u_{k_2}(r) - u_{k_1}^{(0)}(r) u_{k_2}^{(0)}(r)] dr \\ = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R [u_k^2(r) - u_k^{(0)2}(r)] dr \\ = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \frac{2}{\pi} \lim_{k_2 \rightarrow k_1} \cos \left[(k_2 - k_1)R + \frac{\delta_l(k_2) - \delta_l(k_1)}{2} \right] \lim_{k_2 \rightarrow k_1} \frac{\sin \left[\frac{\delta_l(k_2) - \delta_l(k_1)}{2} \right]}{k_2 - k_1} \right. \\ \left. - (-1)^l \frac{2 \cos[2k_1 R + \delta_l(k_1)]}{2\pi k_1} \sin \delta_l(k_1) \right\}_{k_1=k} \\ = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta_l}{dk} + (-1)^l \sin^2 \delta_l(k) \cdot \delta(k) - (-1)^l \sin 2\delta_l(k) \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\cos 2kR}{2\pi k} \quad (2.47) \end{aligned}$$

代入(2.43)对 k 积分, 第三项因 $R \rightarrow \infty$ 时振荡很快而无贡献¹⁾, 再注意

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \left[\frac{1}{\pi} \frac{d\delta_l}{dk} + (-1)^l \sin^2 \delta_l \cdot \delta(k) \right] dk \\ = \frac{1}{\pi} [\delta_l(\infty) - \delta_l(0)] + (-1)^l \int_0^\infty \sin^2 \delta_l(k) \cdot \delta(k) dk \quad (2.48) \end{aligned}$$

中第二个积分, 做自变量代换 $\int_0^\infty \sin^2 \delta_l(k) \cdot \delta(k) dk = \int_0^\infty \sin^2 \delta_l(E) \cdot \delta(E) dE = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \sin^2 \delta_l(E) \cdot \delta(E) dE$, 即得(2.40)式, **Levinson 定理**证毕.

三、Dirac 方程的情形

1. Dirac 方程的有效势

人们通常把中心势场 $V(r)$ 下的 Dirac 方程的解写成^[12]

1) 这一点可论证如下: 取半径为 R 的大球后, 各 k 值量子化为 $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{R}$, $n=1, 2, \dots, N, \dots$, $dk = \frac{\pi}{R}$,

$$\begin{aligned} \text{则 } \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{\cos 2kR}{k} \sin 2\delta_l(k) dk &= \lim_{R \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \frac{\cos 2n\pi}{n\pi} R \cdot \sin 2\delta_l \left(\frac{n\pi}{R} \right) \frac{\pi}{R} \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^n}{n} \sin 2\delta_l \left(\frac{n\pi}{R} \right) = \lim_{R \rightarrow \infty} \sum_{n=N}^\infty \frac{(-1)^n}{n} \sin 2\delta_l \left(\frac{n\pi}{R} \right) = 0. \\ &\left(\text{对有限的 } n < N, \text{ 因 } \lim_{R \rightarrow \infty} \sin 2\delta_l \left(\frac{n\pi}{R} \right) = \sin 2\delta_l(0) = \sin m\pi = 0 \right) \end{aligned}$$

$$\phi(r, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} f(r) & \chi_{\kappa}^{\mu} \\ g(r) & \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} u_1(r) & \chi_{\kappa}^{\mu} \\ iu_2(r) & \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

$$\text{其中} \quad \chi_{\kappa}^{\mu} = \sum_{m=\pm 1/2} \left(l, \frac{1}{2}, j | \mu - m, m, \mu \right) Y_l^{\mu - m} \chi^m \quad (3.2)$$

$$\text{量子数 } \kappa = \begin{cases} -(l+1) & j = l + 1/2 \\ l & j = l - 1/2 \end{cases} \quad (3.3)$$

(3.1) 式中的径向波函数满足如下的耦合方程:

$$\begin{cases} \frac{d}{dr} u_1 = -\frac{\kappa}{r} u_1 + (E + m - V) u_2 \\ \frac{d}{dr} u_2 = -(E - m - V) u_1 + \frac{\kappa}{r} u_2. \end{cases} \quad (3.4)$$

从(3.4)消去 u_2 , 得到 u_1 的一个二阶线性方程, 再做代换

$$u_1(r) = [m + E - V]^{1/2} v(r), \quad (3.5)$$

可导出

$$v''(r) + \left[E^2 - m^2 - V_{\text{eff}}(r) - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2} \right] v(r) = 0. \quad (3.6)$$

其中

$$V_{\text{eff}}(r) = -V^2 + 2EV + \left[\frac{1}{2} \frac{V''}{m + E - V} + \frac{3}{4} \left(\frac{V'}{m + E - V} \right)^2 - \frac{\kappa}{r} \frac{V'}{m + E - V} \right] \quad (3.7)$$

称为有效势, 它依赖于粒子的能量 E , 使我们无法象非相对论量子力学中那样, 定义有良好解析性质的 Jost 函数, 这就是把 Levinson 定理推广到 Dirac 方程时的主要困难.

2. Feynman 传播子和真空的荷密度

先定义在有外势场情形下之 Feynman 传播子^[13]

$$i S_{F\alpha\beta}(x, y) = \langle 0 | T(\hat{\phi}_{\alpha}(x) \hat{\phi}_{\beta}(y)) | 0 \rangle \quad (3.8)$$

其中场算符在 Furry 表象中写出:

$$\hat{\phi}_{\alpha}(x) = \sum_{E_{\nu} > E_F} \hat{b}_{\nu} \phi_{\nu\alpha}(\mathbf{x}, E_{\nu}) e^{-iE_{\nu}t} + \sum_{E_{\nu} < E_F} \hat{d}_{\nu}^{\dagger} \phi_{\nu\alpha}(\mathbf{x}, E_{\nu}) e^{-iE_{\nu}t} \quad (3.9)$$

$\phi_{\nu\alpha}(\mathbf{x}, E_{\nu})$ 为在势场中能量为 E_{ν} 的本征态波函数(旋量的 α 分量), 粒子填充到费米能级 E_F , \hat{b}_{ν} 为粒子湮灭算符, \hat{d}_{ν}^{\dagger} 为反粒子(空穴)产生算符, 真空 $|0\rangle$ 定义是:

$$\begin{cases} \hat{b}_{\nu} |0\rangle = 0 & E_{\nu} > E_F \\ \hat{d}_{\nu} |0\rangle = 0 & E_{\nu} < E_F \end{cases} \quad (3.10)$$

真空的荷密度可以通过传播子表达出来:

$$\rho(\mathbf{x}) = -i T_r[S_F(x, x) \gamma_0]. \quad (3.11)$$

以(3.8)和(3.9)式代入, 即得

$$\rho(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \left[\sum_{E_{\nu} > E_F} \phi_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{x}, E_{\nu}) \phi_{\nu}(\mathbf{x}, E_{\nu}) - \sum_{E_{\nu} < E_F} \phi_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{x}, E_{\nu}) \phi_{\nu}(\mathbf{x}, E_{\nu}) \right]. \quad (3.12)$$

(这里求和理解包括了角动量的求和)

当势场不存在, $V = 0$ 时, 类似地有荷密度表示式:

$$\rho_0(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \left[\sum_{E_\nu > m} \phi_\nu^{(0)\dagger}(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu^{(0)}(\mathbf{x}, E_\nu) - \sum_{E_\nu < -m} \phi_\nu^{(0)\dagger}(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu^{(0)}(\mathbf{x}, E_\nu) \right]. \quad (3.13)$$

3. Levinson 定理的推广

我们假定势场引入后, 真空在整体上仍保持为中性, 即

$$\int [\rho(\mathbf{x}) - \rho_0(\mathbf{x})] d\mathbf{x} = 0, \quad (3.14)$$

以(3.12)和(3.13)式代入(3.14)式, 便有

$$\begin{aligned} & \int \left\{ \sum_{m < E_\nu < E_F} \phi_\nu^\dagger(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu(\mathbf{x}, E_\nu) - \sum_{-m < E_\nu < E_F} \phi_\nu^\dagger(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu(\mathbf{x}, E_\nu) \right\} d\mathbf{x} \\ &= - \int \sum_{E_\nu > m} \{ \phi_\nu^\dagger(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu(\mathbf{x}, E_\nu) - \phi_\nu^{(0)\dagger}(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu^{(0)}(\mathbf{x}, E_\nu) \} d\mathbf{x} \\ &+ \int \sum_{E_\nu < -m} \{ \phi_\nu^\dagger(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu(\mathbf{x}, E_\nu) - \phi_\nu^{(0)\dagger}(\mathbf{x}, E_\nu) \phi_\nu^{(0)}(\mathbf{x}, E_\nu) \} d\mathbf{x}. \quad (3.15) \end{aligned}$$

此式的左端, 当去掉关于角动量的 $(2j+1)$ 简并度后, 就是在 $-m < E < m$ 区间内以量子数 κ 标记的正粒子能级数减去反粒子能级数 $n_\kappa^{(+)} - n_\kappa^{(-)}$. 所以下面的任务是对一定的 κ 值计算(3.15)式右端的积分.

用(3.1)式的记号, 按文献[14]中的公式:

$$\int \phi_1^\dagger(\mathbf{x}, E_1) \phi_2(\mathbf{x}, E_2) d\mathbf{x} = \frac{-i}{E_2 - E_1} \lim_{R \rightarrow \infty} R^2 (f_1^*(R) g_2(R) + f_2(R) g_1^*(R)), \quad (3.16)$$

这里已假定 $\lim_{r \rightarrow 0} r f(r) = \lim_{r \rightarrow 0} r g(r) = 0$,

对于散射态波函数有如下的渐近行为^[15]:

$$\begin{aligned} f_l(R) &\longrightarrow \frac{A_l}{r} \cos \sigma_l = \frac{A_l}{r} \cos(k_l R + \kappa \frac{\pi}{2} + \delta_\kappa(k_l)) \\ g_l(R) &\longrightarrow i \frac{A_l}{r} \eta_l \sin \sigma_l, \end{aligned} \quad (3.17)$$

这里 $\kappa < 0$ ($j = l + 1/2$), $\eta_l = \sqrt{\frac{E_l - m}{E_l + m}}$.

对于 $\kappa > 0$, (3.17) 中 $\eta_l \rightarrow \frac{1}{\eta_l}$, $\sigma_l \rightarrow \tau_l$, $\tau_l = k_l R - \kappa \frac{\pi}{2} + \delta_\kappa(k_l)$.

先看 $\kappa < 0$ 而 $E > m$ 的情况, 以(3.17)式代入(3.16)式:

$$\begin{aligned} & \int \phi_1^\dagger(\mathbf{x}, E_1) \phi_2(\mathbf{x}, E_2) d\mathbf{x} = \\ &= \frac{A_1 A_2}{2} \left\{ \frac{\eta_2 + \eta_1}{E_2 - E_1} \sin(\sigma_2 - \sigma_1) + \frac{\eta_2 - \eta_1}{E_2 - E_1} \sin(\sigma_2 + \sigma_1) \right\}_{R \rightarrow \infty}. \end{aligned}$$

现在令 $E_2 \rightarrow E_1$, $E_2 = E_1 + dE$, 又用 $dE = \frac{\hbar}{E} dk$, 并选 A_1 使括号外面的系数为 1,

于是(3.15)式右端的第一个积分(不包括负号)等于

$$\begin{aligned} & \int_{0(r>m)}^{\infty} dk \int [\phi^\dagger(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) - \phi^{(0)\dagger}(\mathbf{x}) \phi^{(0)}(\mathbf{x})] d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\pi} [\delta_\kappa(\infty) - \delta_\kappa(m)] - (-1)^\kappa \frac{1}{2} \sin^2 \delta_\kappa(m). \end{aligned} \quad (3.18)$$

同理, (3.15) 式右端第二个积分等于

$$\begin{aligned} & \int_{0(E<-m)}^{\infty} dk \int [\phi^\dagger(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) - \phi^{(0)\dagger}(\mathbf{x}) \phi^{(0)}(\mathbf{x})] d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\pi} [\delta_\kappa(-\infty) - \delta_\kappa(-m)] + (-1)^\kappa \frac{1}{2} \sin^2 \delta_\kappa(-m). \end{aligned} \quad (3.19)$$

这里我们记相移为 $\delta_\kappa(E)$, 注意第二项的符号不同, 把此二式代回(3.15)式, 就得到

定理四 Dirac 方程中对非奇性势的 Levinson 定理可推广为

$$\begin{aligned} (n_\kappa^{(+)} - n_\kappa^{(-)}) &= \frac{1}{\pi} [\delta_\kappa(m) - \delta_\kappa(\infty) + \delta_\kappa(-\infty) - \delta_\kappa(-m)] \\ &\quad - \frac{\kappa}{|\kappa|} \frac{(-1)^\kappa}{2} [\sin^2 \delta_\kappa(m) + \sin^2 \delta_\kappa(-m)], \end{aligned} \quad (3.20)$$

这里我们已经把 $\kappa > 0$ ($j = l - 1/2$) 的情形也写在一起了。

关于此定理的应用, 我们想放在 Klein-Gordon 方程之后再讨论。

四、Klein-Gordon 方程的情形

1. Klein-Gordon 方程的有效势

在外势场 $V(r)$ 中的 Klein-Gordon 运动方程为

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - V\right)^2 \Phi(\mathbf{x}, t) = -\nabla^2 \Phi(\mathbf{x}, t) + m^2 \Phi(\mathbf{x}, t). \quad (4.1)$$

对定态解 $\Phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) e^{-iEt}$

$\phi(\mathbf{x})$ 满足一个“Schrödinger”型的方程:^[16]

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{m} \left(EV - \frac{1}{2} V^2\right)\right] \phi = \frac{1}{2m} (E^2 - m^2) \phi. \quad (4.2)$$

其中

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{m} \left(EV - \frac{1}{2} V^2\right) \quad (4.3)$$

相当于非相对论量子力学中的“有效势”, 它的形式除了定义用语的差别之外, 实际上就是(3.7)式的前二项。

2. 波函数的正交完备性质

和 Dirac 方程不同, 现在 K-G 方程的定态解并不简单地正交, 而是满足如下的积分条件:^[17]

$$\int \phi_k^*(E_k + E_l - 2V) \phi_l d\mathbf{x} = \epsilon_k \delta_{kl} \quad (4.4)$$

ϵ_k 是依赖于 ϕ_k 的一个数, 它的符号十分重要, 当 $\epsilon_k > 0$, $\phi_k(\mathbf{x})$ 描写一正粒子的态, 如 $\epsilon_k < 0$, 则 $\phi_k(\mathbf{x})$ 描写反粒子的态。显然当 $V = 0$, $E > m$ 的态都是正粒子态, 而

$E < -m$ 的态都是反粒子态。当 $V \neq 0$, 在 $-m < E < m$ 能区出现正、反粒子的束缚态。用 Green 函数可证完备性公式为^[17]:

$$\sum_k \varepsilon_k^{-1} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^*(\mathbf{x}') = 0, \quad (4.5)$$

$$\sum_k \varepsilon_k^{-1} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^*(\mathbf{x}') E_k = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (4.6)$$

$$\sum_k \varepsilon_k^{-1} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^*(\mathbf{x}') E_k^2 = 2V(x) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (4.7)$$

3. 推广的 Levinson 定理

将(4.6)式乘2, 减去(4.5)式乘 $2V$, 即得

$$\sum_k \frac{1}{\varepsilon_k} \phi_k(\mathbf{x}) (2E_k - 2V) \phi_k^*(\mathbf{x}') = 2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (4.8)$$

再写出 $V = 0$ 时相应之表达式:

$$\sum_{k'} \frac{1}{\varepsilon_{k'}} \phi_{k'}^{(0)}(\mathbf{x}) 2E_{k'} \phi_{k'}^{(0)*}(\mathbf{x}') = 2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (4.9)$$

(4.8)与(4.9)相减, 右端消去, 左端可改写为

$$\begin{aligned} & \sum_{-m < E_k < m} \frac{1}{\varepsilon_k} \phi_k(\mathbf{x}) (2E_k - 2V) \phi_k^*(\mathbf{x}') \\ & + \left[\sum_{E_k > m} \frac{1}{\varepsilon_k} \phi_k(\mathbf{x}) (2E_k - 2V) \phi_k^*(\mathbf{x}') - \sum_{E_{k'} > m} \frac{1}{\varepsilon_{k'}} \phi_{k'}^{(0)}(\mathbf{x}) (2E_{k'}) \phi_{k'}^{(0)*}(\mathbf{x}') \right] \\ & + \left[\sum_{E_k < -m} \frac{1}{\varepsilon_k} \phi_k(\mathbf{x}) (2E_k - 2V) \phi_k^*(\mathbf{x}') - \sum_{E_{k'} < -m} \frac{1}{\varepsilon_{k'}} \phi_{k'}^{(0)}(\mathbf{x}) (2E_{k'}) \phi_{k'}^{(0)*}(\mathbf{x}') \right] = 0. \end{aligned}$$

令 $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}$, 对 \mathbf{x} 积分, 如果 $\phi_k(\mathbf{x})$ 和 $\phi_k^{(0)}(\mathbf{x})$ 分别满足(4.4)形状的式子, 则我们便得到:

$$n^{(+)} + n^{(-)} = [N_0^{(+)} - N^{(+)}(E > m)] + [N_0^{(-)} - N^{(-)}(E < -m)] \quad (4.10)$$

其中 $n^{(+)}$ 和 $n^{(-)}$ 分别表示在 $-m < E < m$ 能区内的正粒子态数和反粒子态数, 右端两个括号分别表示在 $E > m$ 和 $E < -m$ 区域内由于势场 $V(r)$ 引入后能级的减少数目。

仿照前面的经验, 我们来计算(4.10)式右端的两个括号。先在(4.2)式中令 $\phi(\mathbf{x}) =$

$\frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$, 推得径向波函数 $u_l(r)$ 的方程:

$$\frac{d^2 u_{l1}}{dr^2} + \left[k_1^2 - 2 \left(E_1 V - \frac{1}{2} V^2 \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{l1} = 0, \quad (4.11)$$

这里加上脚标 1 表示属于能量 $E_1 (> 0)$ 。同样写出属于能量 E_2 的方程:

$$\frac{d^2 u_{l2}}{dr^2} + \left[k_2^2 - 2 \left(E_2 V - \frac{1}{2} V^2 \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{l2} = 0, \quad (4.12)$$

(4.11) $\times u_2 - (4.12) \times u_1$ (略去脚标中的 l), 得:

$$u_2 \frac{d^2 u_1}{dr^2} - u_1 \frac{d^2 u_2}{dr^2} = (E_2 - E_1)(E_2 + E_1 - 2V) u_1 u_2.$$

对 r 从 0 到 R 积分, 得

$$\int_0^R (E_2 + E_1 - 2V) u_1 u_2 dr = \frac{1}{E_2 - E_1} \left[u_2 \frac{du_1}{dr} - u_1 \frac{du_2}{dr} \right]_0^R.$$

利用 $u(0) = 0$ 及 $u_1(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} B \sin\left(k_1 R + \delta_l(k_1) - \frac{l}{2} \pi\right)$,

然后我们选 B , 使 $B^2 E_1 \pi = 1$, 对于 $E_1 > m$ (下面略去脚标 l), 把二式相减, 令 $k_2 \rightarrow k_1 = k$, 再对 k 积分, 就给出(4.10)式右端第一个括号的负值:

$$\begin{aligned} [N^{(+)}(E > m) - N_0^{(+)}] &= \int_0^\infty dk \int_0^\infty [(2E - 2V) u^2 - u^{(0)2} (2E)] dr \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\delta_l}{dk} dk + (-1)^l \int_0^\infty (1 - \cos 2\delta_l) \delta(2k) dk \\ &= \frac{1}{\pi} [\delta_l(\infty) - \delta_l(m)] + \frac{(-1)^l}{2} \sin^2 \delta_l(m). \end{aligned} \quad (4.13)$$

对于 $E < -m$, 实数 B 仍取得一样, 注意此时 $E < 0$, $\epsilon_\pm < 0$, 则可得

$$\begin{aligned} [N^{(-)}(E < -m) - N_0^{(-)}] &= - \int_0^\infty dk \int_0^\infty [(2E - 2V) u^2 - 2E u^{(0)2}] dr \\ &= \frac{1}{\pi} [\delta_l(-\infty) - \delta_l(-m)] + \frac{(-1)^l}{2} \sin^2 \delta_l(-m). \end{aligned} \quad (4.14)$$

把(4.13)和(4.14)式代入(4.10)式, 就得到

定理五 Klein-Gordon 方程中对非奇性势的 Levinson 定理的推广形式:

$$\begin{aligned} n_l^{(+)} + n_l^{(-)} &= \frac{1}{\pi} [\delta_l(m) - \delta_l(\infty) + \delta_l(-m) - \delta_l(-\infty)] \\ &\quad - \frac{(-1)^l}{2} [\sin^2 \delta_l(-m) + \sin^2 \delta_l(m)]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

我们还可以找到另一种推广形式, 这就是假定能级不但有(4.10)所示的在整体上的守恒性(完备性), 而且对于正反粒子分别也是守恒的(这一点需要势场 V 不超过一个临界值, 见下面讨论). 那末可以写出:

$$N_0^{(+)} = n^{(+)} + N^{(+)}(E > m), \quad N_0^{(-)} = n^{(-)} + N^{(-)}(E < m).$$

又当 $V = 0$ 时显然应有 $N_0^{(+)} = N_0^{(-)}$, 则可得

$$n^{(+)} - n^{(-)} = [N_0^{(+)} - N^{(+)}(E > m)] - [N_0^{(-)} - N^{(-)}(E < -m)]. \quad (4.16)$$

以(4.13)和(4.14)代入(4.16)式, 即有

定理六 Klein-Gordon 方程中 Levinson 定理的又一可能形式:

$$\begin{aligned} n_l^{(+)} - n_l^{(-)} &= \frac{1}{\pi} [\delta_l(m) - \delta_l(\infty) - \delta_l(-m) + \delta_l(-\infty)] \\ &\quad - \frac{(-1)^l}{2} [\sin^2 \delta_l(m) - \sin^2 \delta_l(-m)]. \end{aligned} \quad (4.17)$$

五、对方势阱的应用及讨论

在应用举例之前, 我们先要讨论 Dirac 方程和 K-G 方程的异同.

(1) 有效势不同.

(2) 本征函数正交性不同.

(3) 负能态的解释不同: Dirac 方程的一切能级包括正、负都被认为是属于粒子(如电子)的, 粒子填充到费米能级 E_F , E_F 以下的空穴才对应于反粒子(如正电子); 而 K-G 方程的解中只要(4.4)式 $\epsilon_k < 0$ 的, 就直接对应反粒子态.

(4) 有效势对于 E 和 V 的对称性不同:

在 K-G 方程中: $E \rightarrow -E, V \rightarrow -V$, 使 V_{eff} 不变 (5.1)

但在 Dirac 方程中: $E \rightarrow -E, V \rightarrow -V, m \rightarrow -m$, 使 V_{eff} 不变 (5.2)

此外, K-G 方程的有效势 V_{eff} 还在代换 $E \rightarrow -E, V \rightarrow V - 2E$ 下不变. (5.3)

(5) 当短程势 $\lambda V(r)$ 增强时 ($\lambda > 0, V(r) < 0$), Dirac 粒子的束缚态能级单调下降: [18], [12]

$$\frac{dE}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda} \langle \phi | V(r) | \phi \rangle < 0. \quad (5.4)$$

而对 K-G 方程, 则可证

$$\frac{dE}{d\lambda} = \frac{2}{\epsilon\lambda} \langle \phi | [EV - V^2] | \phi \rangle. \quad (5.5)$$

(ϵ 由(4.4)式定义), 故只能断定, 对 $\epsilon > 0$ 的正粒子能级, 当 $E > 0$ 时是下降的, 而 $\epsilon < 0$ 的反粒子能级当 $E > 0$ 时是上升的. 结果在 $-m < E < m$ 区域出现了正反粒子能级重叠的现象[19].

(6) 当势场增强到一个临界值 V_{cr} , Dirac 粒子的最低束缚态 $1s$ 能级降到 $E_{1s} = -m$, 继而沉入连续谱, 随即可能会发生正-反粒子对产生的过程, 中性真空转变为荷电真空[12, 16, 18, 20, 27]. 对于 K-G 方程, 当 $V = V_{cr}$, (4.4)式中 $\epsilon_k = 0$, 此时能级变为复数, 也可解释为粒子的成对产生[7, 19, 16].

(7) 在 $E = -m$ 处波函数的归一化性质也不同. 见下.

为具体应用推广的 Levinson 定理, 我们来看最简单的势阱——方阱:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (5.6)$$

实际上, 方阱势在短程势中是足够典型的[16]. 以下只考虑 s 态. 则 Dirac 方程的束缚态能级决定于方程[21], [16]:

$$\sqrt{\frac{E + V_0 + m}{E + V_0 - m}} \left[\frac{1}{a} \left(\frac{1}{E + V_0 + m} - \frac{1}{E + m} \right) - \sqrt{\frac{m - E}{m + E}} \right] \tan(a\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2}) = 1. \quad (5.7)$$

而散射相移 $\delta(E)$ 决定于方程:

$$\frac{1}{E + V_0 + m} \left[\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2} \cot \left(a\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2} - \frac{1}{a} \right) \right] = \frac{1}{E + m} \left[\sqrt{E^2 - m^2} \cot(a\sqrt{E^2 - m^2} + \delta(E)) - \frac{1}{a} \right]. \quad (5.8)$$

对于 K-G 方程,束缚态能级决定于方程^[16]:

$$\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2} \cot(a\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2}) = -\sqrt{m^2 - E^2}, \quad (5.9)$$

而散射相移 $\delta(E)$ 决定于方程:

$$\begin{aligned} &\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2} \cot(a\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2}) \\ &= \sqrt{E^2 - m^2} \cot(a\sqrt{E^2 - m^2} + \delta(E)). \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\text{在这情形下} \quad \delta(\infty) = \delta(-\infty) = 0 \quad (5.11)$$

我们对很狭的固定 a 的势阱,分析了随着 V_0 增大 $1s$ 能级从 m 降到 0 再降到 $-m$ 以下的全过程,并计算了相应的相移,结果如下表所示,表中记产生 $E_{1s} = m, 0, -m$ 之 V_0 分别为 V_1, V_2, V_3 ,而 V_4 为 K-G 方程中之临界势。

表 I

	Dirac 方 程				Klein-Gordon 方 程			
	$\cot \delta(m)$	$\delta(m)$	$\cot(-m)$	$\delta(-m)$	$\cot \delta(m)$	$\delta(m)$	$\cot \delta(-m)$	$\delta(-m)$
V_1	∞	0	∞	0	∞	0	∞	0
$V_1(E_{1s} = m)$	0	$\pi/2$	∞	0	0	$\pi/2$	∞	0
$V_2(E_{1s} = 0)$	∞	π	∞	0	$-\infty$	π	∞	0
$V_3(E_{1s} = -m)$	∞	π	∞	0	$-\infty$	π	0	$\pi/2$
$> V_3$	∞	π	$-\infty$	π	$-\infty$	π	$-\infty$	π
V_4	∞	π	$-\infty$	π	$-\infty$	π	$-\infty$	π

对于 Dirac 方程,我们一直取 E_F 在 $1s$ 能级之下,紧靠在 $E = -m$ 之上,所以在 $-m < E < m$ 区间内没有反粒子能级, $n_\kappa^{(-)} = 0$, 而且只有 $n_\kappa^{(+)} = 0$ 或 $1(\kappa = -1)$ 两种可能值。此时公式(3.20)是: (略去脚标 $\kappa = -1$)

$$n^{(+)} = \frac{1}{\pi} (\delta(m) - \delta(-m)) - \frac{1}{2} (\sin^2 \delta(m) + \sin^2 \delta(-m)). \quad (5.12)$$

用表 I 的相移数值代入,即见两端是符合的,但是有两点值得注意:

(1) $E = m$ 的 s 态是“半束缚态”,它的波函数不能归一化,这与非相对论情形相同,所以 $V = V_1$ 时 $n^{(+)}$ 仍为 0 。然而 $E = -m$ 的 s 态却是一个束缚态,它的波函数平方可积,因此当 $V = V_3$ 时 $n^{(+)} = 1$ 。Dirac 方程的 $E = -m$ 能级除 $P_{1/2}$ 态 ($j = 1/2, \kappa = 1$) 是不可归一化的之外,都是可归一化的^{[16],[21],[22]}。

(2) 我们形式地把公式一直用到临界势 $V_{cr} = V_3$,即产生沉潜态和荷电真空的边缘,而且照趋势看,当 $V > V_3$ 似乎仍适用。

Migdal 曾指出,荷电真空尽管能量较低,在概念上却不如中性真空优越,费米能级的选取是不应该太任意的^[23]。我们同意他的看法。在这里,在一个外势场中,粒子填充情况的改变将会直接影响束缚态数的计算,很难相信此时散射相移和束缚态数会继续满足定理的要求。

对于 K-G 方程,(4.17)式成为: (略去脚标 $l = 0$)

$$n^{(+)} - n^{(-)} = \frac{1}{\pi} (\delta(m) - \delta(-m)) - \frac{1}{2} [\sin^2 \delta(m) - \sin^2 \delta(-m)]. \quad (5.13)$$

(4.15) 则是:

$$n^{(+)} + n^{(-)} = \frac{1}{\pi} (\delta(m) + \delta(-m)) - \frac{1}{2} [\sin^2 \delta(m) + \sin^2 \delta(-m)]. \quad (5.14)$$

用表 I 对这个式子进行检验时,我们注意到和 Dirac 方程不同之点在于现在 $E = -m$ 的 s 态波函数是不可归一化的,因此和 $E = m$ 的 s 态一样,只是半束缚态. 此外,现在的反粒子能级从 $V = V_3$ 从 $E = -m$ 开始升起后, $n^{(-)} = 1$, 到 $V_0 = V_4$ 时和上面降下来的粒子能级一起消失. 看来这以后(5.13)式还可以用而(5.14)式归于无效.

最后,应该承认,本文的证明还是不够严格的,因而对 Levinson 定理能够适用的势可放宽到什么程度,可能有那些例外等问题,还很难讲清楚. 最近,关于 Levinson 定理在各种情形下的推广文章很多^{[24]-[26]}. 不过我们猜测,本文和其他作者在本质上一致的所谓渐近完备性的证明方法意味着,只要束缚态数有限,Levinson 定理可以对很一般的势成立.

杨振宁教授建议了这个题目并作了启发性的讨论,孙鑫、戴显焘等同志作了多次讨论,作者谨表示衷心的感谢.

参 考 文 献

- [1] N. Levinson, *Danske Videnskab, Selskab, Mat-fys. Medd.*, **25** (1949), No. 9.
- [2] L. Schiff, *Quantum Mechanics*;
M. Goldberger, K. Watson, *Collision Theory*.
- [3] J. M. Jauch, *Helv. Phys. Acta.*, **30** (1957), 143.
- [4] A. Martin, *Nuovo Cimento*, **7** (1958), 607.
- [5] P. Roman, *Advanced Quantum Theory*, p. 384.
- [6] 见[5], p. 300.
- [7] L. I. Schiff, H. Snyder, J. Weinberg, *Phys. Rev.*, **57** (1940), 315.
- [8] 见[5], p. 173. 但书上有误.
- [9] R. Jackiw, G. Woo, *Phys. Rev.*, **D12** (1975), 1643.
- [10] J. Fridel, *Nuovo Cimento, Suppl.*, **7** (1958), 287;
Phi. Mag., **43** (1952), 153.
R. J. Sokel, *A. J. Phys.*, **45** (1977), 676.
- [11] 戴显焘, 倪光炯, 复旦学报, (自然科学版) **3** (1977), 1.
- [12] J. Reinhardt, W. Greiner, *Reports on Progress in Phys.*, **40** (1977), No. 3.
- [13] J. Rafelski, B. Müller, W. Greiner, *Nucl. Phys.*, **B68** (1974), 585.
- [14] 戴显焘, 复旦学报(自然科学版), **1** (1977), 100.
- [15] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, **2** (1974), 210.
- [16] B. C. Попов, *ЖЭТФ.*, **59** (1970), 965.
- [17] H. Snyder, J. Weinberg, *Phys. Rev.*, **57** (1940), 307.
- [18] Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, *УФН.*, **105** (1971), 403.
- [19] A. Klein, J. Rafelski, *Phys. Rev.*, **D11** (1975), 300; **D12** (1975), 1194.
- [20] B. Müller, *ARNS*, **26** (1976), 351.
- [21] W. Pieper, W. Greiner, *Z. Physik.*, **218** (1969), 327.
- [22] А. Б. Мигдал, А. М. Переломов, В. С. Попов, *ЯФ.*, **14** (1971), 874.
- [23] А. Б. Мигдал, *УФН.*, **123** (1977), 369.
- [24] T. A. Osborn, D. Bolle, *J. Math. Phys.*, **18** (1977), 432.
- [25] R. G. Newton, *J. Math. Phys.*, **18** (1977), 1348; 1582.
- [26] B. Berg et al., *Phys. Rev.*, **D17** (1978), 1172.
- [27] J. Rafelski, L. P. Fulcher, A. Klein, *Physics Reports*, **38C** (1978), No. 5.

THE LEVINSON THEOREM AND ITS GENERALIZATION IN RELATIVISTIC QUANTUM MECHANICS

Ni Guang-jiong

(Fudan University, Shanghai)

ABSTRACT

The Levinson Theorem in non-relativistic quantum mechanics is derived by Green function method which leads to the following expression:

$$n_l = \frac{1}{\pi} [\delta_l(0) - \delta_l(\infty)] - \frac{(-1)^l}{2} \sin^2 \delta_l(0)$$

Then its generalization in Dirac equation is found as:

$$\begin{aligned} n_\kappa^{(+)} - n_\kappa^{(-)} &= \frac{1}{\pi} [\delta_\kappa(m) - \delta_\kappa(\infty) + \delta_\kappa(-\infty) - \delta_\kappa(-m)] \\ &\quad - \frac{\kappa}{|\kappa|} \frac{(-1)^\kappa}{2} [\sin^2 \delta_\kappa(m) + \sin^2 \delta_\kappa(-m)] \end{aligned}$$

There are two expressions for Klein-Gordon equation:

$$\begin{aligned} n_l^{(+)} \pm n_l^{(-)} &= \frac{1}{\pi} \{ \delta_l(m) - \delta_l(\infty) \pm [\delta_l(-m) - \delta_l(-\infty)] \} \\ &\quad - \frac{(-1)^l}{2} [\sin^2 \delta_l(m) \pm \sin^2 \delta_l(-m)] \end{aligned}$$

The implication of these theorems and the range of their validity with relevant problems are discussed. An example of S state case in square well potential is treated for testing these formulas.