Pure Mathematics 理论数学, 2024, 14(4), 361-365
Published Online April 2024 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/pm
https://doi.org/10.12677/pm.2024.144144

Hans汉斯

Taylor公式在量子力学近似计算的一些应用

徐　建

上海理工大学理学院，上海

收稿日期：2024年3月8日；录用日期：2024年3月27日；发布日期：2024年4月30日

摘　要

高等数学中关于Taylor公式或者Taylor中值定理往往都是学生不好理解和消化的知识，尤其是学生不知道为什么要学习Taylor公式，在此通过几个量子力学有关的有意思的例子来说明Taylor公式的重要性，以及近似计算在学习和研究当中的重要性。

关键词

Taylor公式，近似计算，量子力学，狭义相对论

Some Applications of Taylor's Formula in Approximate Calculations of Quantum Mechanics

Jian Xu

School of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Mar. 8th, 2024; accepted: Mar. 27th, 2024; published: Apr. 30th, 2024

Abstract

In advanced mathematics, Taylor's formula or Taylor's mean value theorem are often difficult for students to understand and digest. In particular, students do not know why they should learn Taylor's formula. Here some interesting examples related to quantum mechanics are used to illustrate the importance of Taylor's formula and the importance of approximate calculations in learning and research.

Keywords

Taylor Formula, Approximate Calculation, Quantum Mechanics, Special Relativity

文章引用: 徐建. Taylor 公式在量子力学近似计算的一些应用[J]. 理论数学, 2024, 14(4): 361-365.
DOI: 10.12677/pm.2024.144144

1. 引言

18 世纪早期英国数学家 Brook Taylor 在他 1715 年出版的《正的和反的增量方法》中，称述了他在 1712 年一封信中提出的著名定理——Taylor 定理。Taylor 公式是一个用函数在某点的信息描述其附近取值的公式。如果函数足够光滑，在已知函数某一点各阶导数的前提下，Taylor 公式可以利用这些导数值作为系数构建一个多项式来近似该函数在这一点的领域中的值。1772 年，Lagrange 强调了 Taylor 公式的重要性，称其为微分学基本定理，但是 Taylor 定理的证明中并没有考虑级数的收敛性，这个工作直到 19 世纪 20 年代，才由 Cauchy 完成。Taylor 定理开创了有限差分理论，使任何单变量函数都可以展开成幂级数，因此，人们称 Taylor 为有限差分理论的奠基者。Taylor 公式是研究函数极限和估计误差等方面不可或缺的数学工具，Taylor 公式集中体现了微积分“逼近法”的精髓，在近似计算上有独特的优势。利用 Taylor 公式可以将非线性问题化为线性问题，且具有很高的精确度，因此其在微积分的各个方面都有重要的应用。

在高等数学的课程当中，两种余项的 Taylor 公式一般按照如下的方式[1] [2]给出，

带 Peano 型余项的 Taylor 公式一般定义为，如果函数 $f(x)$ 在点 x_0 处具有 n 阶导数，那么

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n+o\left((x-x_0)^n\right)。$$

带 Lagrange 型余项的 Taylor 公式一般定义为，如果函数在点 x_0 附近具有 $n+1$ 阶导数，那么

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1},$$

其中 ξ 介于 x 和 x_0 之间。

从这复杂的公式可以知道，初学 Taylor 公式的时候，往往会对其望而却步。因为不仅是上面的基本的 Taylor 公式需要记住并掌握，对于一些初等且基本的函数的 Taylor 公式或者 Maclaurin 公式都需要记住并熟练应用，这又大大加剧了学生在学习 Taylor 公式的畏难情绪。因为往往学生学了之后，往往不知道这么复杂的公式到底有何用，为什么高等数学需要学习这么复杂的公式。因此如果在初学 Taylor 公式的时候，能够知道它的应用，会给学生学习时带来更多的动力。虽然解决真正的实际问题时，需要综合运用各种知识。又鉴于初学时的基础限制，想要讲清楚真正的应用是极为困难的。同时往往由于实际教学时间的限制，不能很好地介绍一些相关的有意思的应用，只是灌输给学生 Taylor 公式的概念定义等等。而学生也因为无法了解 Taylor 公式背后的重要应用，并且由于公式本身的复杂性，对其丧失兴趣。相对而言，微积分的应用是比较直接的。在此，介绍一些 Taylor 公式用于近似计算时在狭义相对论、量子力学等方面的应用，以期能够激发学生对于 Taylor 公式学习的热情。

在近似计算中，Taylor 公式起着非常大的作用。很多应用问题中，可能只需用到一阶的 Taylor 公式(即微分)就足够了，而且由于现在数值计算都可以利用计算机，Taylor 公式的使用看起来没那么普遍了。但是 Taylor 公式在一些公式尤其是物理公式的简化当中仍然起着非常大的作用。并且，在一定条件下，从简化后的近似公式中往往能更清楚地看出问题的本质。

2. Taylor 公式与量子力学的诞生

量子力学的诞生是以 Planck 建立黑体辐射公式为标志的。我们知道，任何物体都是会辐射电磁波的，例如烧红的铁棒会辐射可见光，人体主要辐射的是红外线。而有一种理想物体，任何电磁波射到其上都会被全部吸收而不会反射，成为黑体。黑体指挥按照滋生的温度辐射电磁波。

对一个固定温度(即绝对温度) T 的黑体，单位体积内的能量密度按频率 ν 有一个分布 $\rho(\nu)$。Planck 黑体辐射公式给出

$$\rho(\nu)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}}-1},$$

其中 c 表示真空中的光速，h 表示 Planck 常量，k 表示 Boltzmann 常量，T 表示黑体的绝对温度。注意这里的 c,h,k 都是准确的数，即 $c=2.99792458\times10^{8}\ \mathrm{m/s}$，$h=6.62607015\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$，$k=1.380649\times10^{-23}\ \mathrm{J\cdot K^{-1}}$。而且借助于已经定义好的时间单位“秒”，上诉三个常数分别被用来定义长度单位“米”、质量单位“千克”以及温度单位“开尔文”。但是在我们所有讨论的这里，可以不需要知道他们具体的值，只需要记住这些量是一些物理常量。

接下来，分别考虑当 ν 很小和很大的时候，Planck 黑体辐射公式的近似表达式。当 $\nu\to0$ 时，

$$\rho(\nu)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\frac{h\nu}{kT}\left(1+o(1)\right)}=\frac{8\pi kT}{c^3}\nu^2\left(1+o(1)\right)。$$

于是当 ν 很小的时候，$\rho(\nu)\approx\frac{8\pi kT}{c^3}\nu^2$，这个公式成为 Rayleigh-Jeans 公式。当 $\nu\to+\infty$ 时，

$$\rho(\nu)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}}\left(1+o(1)\right)}=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\mathrm{e}^{-\frac{h\nu}{kT}}\left(1+o(1)\right)。$$

于是当 ν 很大的时候，$\rho(\nu)\approx\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\mathrm{e}^{-\frac{h\nu}{kT}}$，这个公式成为 Wien 公式。

这两个公式都可以从经典物理理论中推导出来，这个时候，电磁波的能量还是连续的。当 Plance 利用这两个渐近公式得到黑体辐射公式之后，为了从统计力学的角度将这个公式推导出来，只能假设电磁波的能量取 $h\nu$ 的整数倍才行，后来 Einstein 根据 Planck 的理论提出了光子的概念，并由此获得了 1921 年的诺贝尔物理学奖。

3. Taylor 公式与 Einstein 质能关系式

在 Newton 的经典力学框架下，时间知识一个统一的参数，与参考系的选择没有关系。但是在狭义相对论中，时间和空间不能独立地变换，而是通过 Lorentz 变换一起变化的，从而时间和空间变量成为一个四维空间，称之为 Minkowski 思维时空，中的一个向量的分量，这个向量通常记为 $\left(x_0=ct,x_1,x_2,x_3\right)$，其中 c 表示真空中的光速，t 表示时间，x_1,x_2,x_3 表示空间坐标。相应地，经典力学中的三维向量在狭义相对论中都要变成四维向量。

对速度为 $\boldsymbol{v}=\left(v_1,v_2,v_3\right)$ 的质点，经典的动量 $\left(p_1,p_2,p_3\right)$ 在狭义相对论中要变为四维动量 $\left(p_0,p_1,p_2,p_3\right)$。利用相对论的知识可以计算得到，对于一个静止质量为 m_0 的质点

$$p_0=\frac{m_0c}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}},\quad p_j=\frac{m_0v_j}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}},\quad j=1,2,3,$$

其中 $v=|\boldsymbol{v}|$ 表示三维向量 $\boldsymbol{v}$ 的模长。当 $\frac{v}{c}\to 0$ 时，显然有 $\frac{p_j}{m_0 v_j}\to 1$，$j=1,2,3$，所以在低速的情况下 (p_1,p_2,p_3) 就是经典力学中的动量。但是 p_0 表示什么呢？

利用 Taylor 公式，当 $\frac{v}{c}\to 0$ 时，

$$cp_0=\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}=m_0c^2\left(1+\frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}+o\left(\frac{v^2}{c^2}\right)\right)\approx m_0c^2+\frac{1}{2}m_0v^2。$$

由于 m_0c^2 是常值，$\frac{1}{2}m_0v^2$ 是经典力学中的动能，所以 Einstein 将 cp_0 解释为质点的总能量。通常将 $m=\frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ 成为质点的运动质量，它是 $\frac{p_j}{v_j}$，因此描述质点的惯性，记 $E=cp_0$，于是有 $E=mc^2$。这就是所谓的 Einstein 质能方程或者 Einstein 质能关系式。

4. Taylor 公式与光谱的精细结构

根据相对论量子力学，氢原子中电子的能量为

$$E_{nl}=mc^2\left[1+\frac{\alpha^2}{\left(\sqrt{(l+1)^2-\alpha^2}+n-l-1\right)^2}\right]^{-\frac{1}{2}}，\quad n=1,2,3,\cdots，\quad l=0,1,2,\cdots,n-1$$

其中，$\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\approx\frac{1}{137}$ 称为精细结构常数，这个精细结构常数和学生中学中熟知的两大常数 e 和 π 一样，是自然界的基本常数，并且是物理学中最重要的无量纲数，c 表示真空中的光速，$\hbar=\frac{h}{2\pi}$，h 表示 Planck 常量，e 表示基本电荷，ε_0 表示真空介电常数，m 表示电子的静止质量。上述这些量，都有具体的数值，c 和 h 之前已经定义了，$e=1.602176634\times10^{-19}\,\mathrm{C}$，被用来定义电流强度单位“安培”，$\varepsilon_0\approx 8.854187817\times10^{-17}\,\mathrm{F/m}$，电子质量 $m\approx 9.10956\times10^{-31}\,\mathrm{kg}$，但是在我们所讨论的这里不需要知晓。

如果将 α 看作一个非常小的量，将 $\frac{E_{nl}}{mc^2}$ 关于 α 的 Taylor 公式保留到 α 的四次项，将会有，

$$\begin{aligned}\sqrt{(l+1)^2-\alpha^2}+n-l-1&=(l+1)\sqrt{1-\frac{\alpha^2}{(l+1)^2}}+n-l-1\\&=(l+1)\left(1-\frac{\alpha^2}{2(l+1)^2}+o\left(\alpha^2\right)\right)+n-l-1=n-\frac{\alpha^2}{2(l+1)}+o\left(\alpha^2\right)\end{aligned}。$$

所以，

$$\begin{aligned}\frac{E_{nl}}{mc^2}&=\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(1-\frac{\alpha^2}{2n(l+1)}+o\left(\alpha^2\right)\right)^{-2}\right]^{-\frac{1}{2}}\\&=\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(1+\frac{\alpha^2}{n(l+1)}+o\left(\alpha^2\right)\right)\right]^{-\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&=\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}+\frac{\alpha^4}{n^3(l+1)}+o\left(\alpha^4\right)\right]^{-\frac{1}{2}} \\
&=1-\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha^2}{n^2}+\frac{\alpha^4}{n^3(l+1)}\right)+\frac{3}{8}\left(\frac{\alpha^2}{n^2}\right)^2+o\left(\alpha^4\right) \\
&=1-\frac{\alpha^2}{2n^2}-\frac{\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+1}-\frac{3}{4}\right)+o\left(\alpha^4\right)
\end{aligned}
$$

将 $\alpha=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}$ 代入到上式得，

$$
E_{nl}=mc^2-\frac{1}{\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2}\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}\left(1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+1}-\frac{3}{4}\right)+o\left(\alpha^2\right)\right)。
$$

在这里，mc^2 是电子的静止质量，$-\dfrac{1}{\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2}\dfrac{me^4}{2\hbar^2n^2}$ 是由非相对论量子力学(也是 Bohr 轨道理论)得出的氢原子中电子的能量，后面的项则是相对论的修正。由于相对论的修正项与 l 有关，相同主量子数 n 的状态的能量按 l 的不同略有不同，因此氢原子的光谱中一根谱线分裂成非常接近的若干条谱线，这称为光谱的精细结构。

5. 结语

大多数的工科院校中，高等数学 Taylor 公式的讲授，由于其公式本身的复杂性，以及又要兼顾带 Peano 型余项和 Lagarange 余项的 Taylor 公式，都是比较困难和繁琐的。尤其对于初学之时，往往看到上面两个长长的 Taylor 公式，会望而却步，更别提要让初学者清楚的接受它，这就更加的难上加难了。而将一些听着很艰深的理论，通过一些基础知识的讲解，将其讲明白，这无疑会增加学生的兴趣。本文就希望通过在课外或者在课堂举例的过程中加入或者部分加入上述这些量子力学当中的利用 Taylor 公式近似计算的例子，能够将 Taylor 公式的广泛应用给学生展现一角，从而激起学习的热情。

参考文献

[1] 同济大学数学系. 高等数学(上册) [M]. 第 7 版. 北京: 高等教育出版社, 2014.

[2] 华东师范大学数学系. 数学分析(上册) [M]. 第 3 版. 北京: 高等教育出版社, 2001.