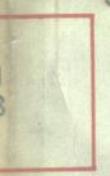


[英] C. A. 克罗克斯顿 著

# 数学物理方程导论

戴安英 钱伯初 译



高等教育出版社

# 数学物理方程导论

[英] C. A. 克罗克斯顿 著

戴安英 钱伯初 译

高等教育出版社

本书根据 John Wiley & Sons Ltd. 1974 年出版的 C. A. Croxton 著“Introductory Eigenphysics”一书译出。中译本按原书所述主要内容取名为《数学物理方程导论》。本书主要讲述如何建立和求解物理学中常见的几类重要的场方程，并说明这些场方程在不同坐标系中如何求解。全书的重点放在方程的应用及其物理意义的诠释上，而不过分要求数学的严谨性，并强调指出同一种形式的方程可描述大量的物理问题，以揭示这些问题的统一基础。

本书可作为高等学校数学物理方程课程的教学参考书，也可供有关课程师生及科技人员参考。

## 数学物理方程导论

〔英〕 C. A. 克罗克斯顿 著

戴安英 钱伯初 译

\*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

河北香河印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张9.75 字数 230,000

1982年8月第1版 1983年12月第1次印刷

印数 00,001—9760

书号 13010·0777 定价 1.50 元

# 序

当前物理学的分科越来越细,这是多种因素(其中很大成分是研究工作的迅速进展以及对教材现代化的强烈要求和充实新内容的迫切愿望)影响的结果。这样做肯定是受欢迎的,因为课程的这种改进只能激发人们的积极性,不过也就难得有机会停下来和其他学科沟通沟通。本书所阐述的正是几乎各学科都涉及到的边值问题,因为根据作者的经验,许多大学生看不出表面不同的物理问题有何共同特点。而本书特别令人满意的特点,正是用最少的物理或数学手段说明大量现象。大学生中十分常见的观点是,认为所有问题全是不同的,都要从头学习,这种状况要加以扭转。因此,本书并不打算写成物理学家用的一份数学目录,更不打算写成数学家用的物理学目录,而是力图打破各科之间的传统界限,象量子力学和经典力学之间,物理光学和电子散射之间,静电学和气体动力学之间的分界等等。我们这样做会使学生相信书中所述方法的普适性。学生的主要问题在于几乎完全不能把在数学课中学到的方法联系或运用到物理学中。例如,学生们很怕作角分布的球谐函数分析。即使他在数学上掌握这种方法,可是任你如何提醒他,说这事不会比周期函数例行的傅里叶分析更困难,但他仍执意不信。也许受到批评的应该是某些数学物理方法教科书:这些书所讲述的方法,对于物理专业的大学生来说难于应用,这些书由于单纯追求数学严格而忽视了对物理意义的诠释和在物理上的应用。

本书坚持把数学作为物理学的工具。而初次接触氢原子的波

动力学公式的大学生，则往往只记得他同时面对求解勒让德和拉盖尔微分方程的局面。很明显，在分析过程中很自然地出现了各种量子数；还有，特定的玻尔公式也建立在坚实的分析基础之上。然而，即使不去实际求解一系列微分方程，也可以得到量子化以及很多物理结论，而这只需要求波函数连续并在无限远处趋于零。既然如此，我索性把这些方程以及另外几个物理学中典型的微分方程的解法放在书末的附录中。当然，适当详尽的数学阐述也是必要的，这类细节就列入文献索引中。

用很少的微分方程描述很多物理现象不是偶然的。如果忽视本学科统一的数学基础而不去充分利用它，这是令人遗憾的。用场方法解物理问题或多或少归结为数学运算，不同问题的特点表现在边界条件的性质和数值上，表现在所研究体系的对称性和简并性上。

我们慎重地变更了所述物理问题的分类，它们不是按照逻辑关系而只是按照坐标系的对称性来划分的。这一点，与其说是作者感情用事，不如说是为了强调场方法的普适性和统一性。当然，即使能够分离变数，也只有极有限的问题有精确解。因此，本书专门用一章讲述主要的近似解法，并讨论它在地球物理学、量子化学和量子力学等各种问题中的应用。特别是因为重要的实际问题往往没有精确解，这样看来也许重点应该放在近似方法方面。可是另一方面，本书的目的显然是对某些重要的数学函数进行物理探讨，而对于大学生来说，重点无疑要放在精确解上，因为只有这样才能把按正交归一函数基展开成级数的方法推广到微扰系统中去。

第二、三、四、五章后面均有一定数量的习题，作为正文的完善和补充。这些题目主要选自剑桥大学近年来第一、二年级荣誉学位考试试题，有一定学术水平。

显然，在编写本书的过程中，作者照例要参考许多权威性的著作。这里叙述的内容，除去少量新成果以外，均可以从已出版的文献中找到。然而为了行文尽量通顺起见，做了某些必要的修改和补充。特别有用的原始资料则列入文献索引中；当然这份目录并不是详尽无遗的。

本书大部分内容是作者在德里大学物理学高等研究中心和印度邦加罗尔省拉曼研究所工作期间利用假期写成的。作者愉快地感谢社会各界的大力赞助，使本书得以问世。本书的许多内容是在大学教学过程中提出来的，当时学生们热情地提出叙述和推导中的难点、矛盾和含混之外。消除这些弊病，大有希望提高本书的使用价值（本书正是为他们写的）。对于所有在这方面有过贡献的人们，我衷心地致以谢忱。错误和疏忽在所难免，因而特别感激本书读者提出批评建议。我还感谢布赖恩·皮帕德教授和剑桥大学出版社慨允我从开文迪什经典物理学问题集以及从自然科学荣誉学位试题集的IA部和IB部中摘录一定数量的习题。我特别愉快地感谢欧文·萨克斯顿和马丁·霍纳对原稿的慷慨帮助，谨向他们再次致以最热烈的感谢。

如果读者从本书的逻辑结构中能获得简化的和统一的数学基础，则作者就如愿以偿了。

克莱夫·A·克罗克斯顿  
于剑桥开文迪什实验室  
1973年11月

# 目 录

|                               |     |
|-------------------------------|-----|
| <b>序</b> .....                | 1   |
| <b>第一章 场方程</b> .....          | 1   |
| 1.1 引言.....                   | 1   |
| 1.2 泊松方程和拉普拉斯方程.....          | 2   |
| 1.3 扩散方程.....                 | 6   |
| 1.4 波动方程.....                 | 9   |
| 1.5 边界条件和解的唯一性.....           | 10  |
| 1.6 正交性和斯特姆-刘维型方程 .....       | 12  |
| <b>第二章 直角笛卡儿坐标系</b> .....     | 16  |
| 2.1 引言.....                   | 16  |
| 2.2 紧张的均匀弦的波动方程.....          | 17  |
| 2.3 简正振动的杂化.....              | 21  |
| 2.4 自由悬垂链.....                | 24  |
| 2.5 点阵振动.....                 | 27  |
| 2.6 均匀二维膜的波动方程.....           | 35  |
| 2.7 薛定谔波动方程: 常数势的解.....       | 41  |
| 2.8 线性谐振子.....                | 55  |
| 2.9 周期势.....                  | 63  |
| 2.10 扩散方程.....                | 76  |
| 习题.....                       | 84  |
| <b>第三章 正交曲线坐标系: 柱面解</b> ..... | 90  |
| 3.1 引言.....                   | 90  |
| 3.2 紧张的均匀圆膜的波动方程.....         | 99  |
| 3.3 方形、圆形和椭圆形膜振动模式之间的关系.....  | 103 |
| 3.4 圆孔的夫琅和费衍射.....            | 109 |
| 3.5 无限长圆柱体内的扩散.....           | 112 |

|            |                    |            |
|------------|--------------------|------------|
| 3.6        | 电磁波在圆柱导体中的传播       | 114        |
| 3.7        | 椭圆坐标和双曲坐标          | 119        |
| 3.8        | 通过椭圆机翼的无旋流动        | 123        |
| 3.9        | 椭圆柱面周围的势分布         | 127        |
| 3.10       | 亥姆霍兹方程的椭圆解         | 131        |
|            | 习题                 | 134        |
| <b>第四章</b> | <b>正交曲线坐标系：球面解</b> | <b>137</b> |
| 4.1        | 引言                 | 137        |
| 4.2        | 理想流体中匀速运动的球        | 148        |
| 4.3        | 球形微小液滴的振动模式        | 151        |
| 4.4        | 静电多极矩场             | 157        |
| 4.5        | 转动气体星球内部的简正振动      | 160        |
| 4.6        | 分波分析和弹性散射          | 166        |
| 4.7        | 氢原子                | 183        |
| 4.8        | 类氢系                | 191        |
| 4.9        | 球谐振子               | 195        |
| 4.10       | 带电粒子在磁场中运动的量子化     | 197        |
| 4.11       | 液态金属的模拟势           | 200        |
| 4.12       | 地震在莫霍洛维奇契层的传播      | 207        |
| 4.13       | 转动行星内部的温度分布        | 214        |
| 4.14       | 长和扁的回转椭球坐标         | 218        |
|            | 习题                 | 225        |
| <b>第五章</b> | <b>近似方法及其应用</b>    | <b>228</b> |
| 5.1        | 引言                 | 228        |
| 5.2        | 非简并态的微扰理论          | 229        |
| 5.3        | 简并态的微扰理论           | 233        |
| 5.4        | WKBJ近似             | 235        |
| 5.5        | 变分近似               | 240        |
| 5.6        | 量子分子物理：分子轨道理论      | 248        |
| 5.7        | 量子分子物理：价键理论        | 257        |
| 5.8        | 杂化                 | 260        |
|            | 习题                 | 265        |

|        |             |     |
|--------|-------------|-----|
| 附录 I   | 傅里叶变换.....  | 266 |
| 附录 II  | 拉普拉斯变换..... | 271 |
| 附录 III | 贝塞尔函数.....  | 275 |
| 附录 IV  | 厄米多项式.....  | 283 |
| 附录 V   | 马丢方程.....   | 287 |
| 附录 VI  | 勒让德函数.....  | 292 |
| 附录 VII | 拉盖尔函数.....  | 298 |

# 第一章 场 方 程

## 1.1 引 言

在经典静电力学和引力理论中，我们总可以把相应势函数  $\psi(r)$  随空间的变化表示成微分方程的形式，然后根据微分方程的不同特点，选用不同的数学方法和坐标系来决定这势场。微分方程最后的解得出静电势或引力势的空间分布，当然，这个解要满足一定的边界条件。在静电问题和引力问题中所遇到的方程主要是泊松方程  $\nabla^2\psi(r) = f(r)$  及其齐次形式，即拉普拉斯方程  $\nabla^2\psi(r) = 0$ 。 $f(r)$  可以理解为在泊松方程满足的区域内，由电荷产生的静电“源”或“壑”或者由物质产生的引力“源”或“壑”的空间分布。起初我们主要是藉助于引力理论和静电力学建立起势和场的概念。然后，我们推广这些定义，以更抽象的方式来研究广义势，以及与之相关的广义通量或广义力场。我们会发现，不仅在静电力学和引力理论中，而且在物理学的许多分支中，都会出现很类似的方程。进一步，这些方程的解给出广义势的空间分布，它们在函数形式上是非常类似的，只是边界条件的性质不同，以及根据不同的广义参量而对解作出不同的物理解释而已。因此，学会求解某一给定的场方程，就可以同时解决整整一类表面看来无关的物理现象，只要这些物理现象都用同一种形式的场方程来描述。举例来说，圆形水盆表面驻波振幅  $\psi(r)$  的分布，在中心附近由贝塞尔方程描写，这正和圆柱形金属导体横截面上交变电流  $j(r, t)$  的分布相似。这个特例还可以推广，使之包括单色光通过圆形针孔时发生的夫琅和费衍射的振幅  $A(r)$  的径向分布情况，也能够包括圆形膜的简正振动。

情况。对于每一种情况，广义势、振幅都可以用贝塞尔函数来描写，但是在各种情况下，势函数的物理意义是不同的。在上述例子中应引起我们注意的是，对上述每一种情况，问题都具有圆柱形对称性。我们将看到，在决定势场函数形式时，问题的对称性和维数总是起着很大的作用，这为以后各章对解进行分类提供了一个有效的方法。

总的来说，本书，特别是下面几节的目的在于建立和求解物理学中常见的几类重要的场方程。我们将说明这些场方程在不同坐标系中如何求解，指出物理学不同分支中统一的方面在于求解方法，而不管问题的具体物理本质如何。

## 1.2 泊松方程和拉普拉斯方程

有一类特别重要的场  $I$ ，叫做保守场。在这连续场  $I(r)$  中，把一质点移动一段无限小的位移元  $dl$ ，场所作的功只与质点的起点、终点有关，而与中间位移的顺序和形状完全无关。由于这样的场  $I$  的环流为零，即

$$\oint I \cdot dl = 0 \quad (1.2.1)$$

也就是沿着场中一条闭合回路移动质点时场所作的功为零，这样的场又叫做无旋场。如果无旋场  $I(r)$  及其一阶导数连续，则可以根据斯托克斯定理把线积分化为面积分：

$$\oint I \cdot dl = \oint \operatorname{curl} I \cdot dA = 0 \quad (1.2.2)$$

其中第二个积分中的积分面积  $A$  是第一个积分的积分周线所包围的面积。因此，我们得出结论：对于无旋场， $\operatorname{curl} I = 0$ 。这类无旋场的明显例子是引力场和静电场，不过一般说来，场还夹杂某些象摩擦力这样的耗散作用，使场包含有旋分量。当然， $I$  仍保持无旋，

也只有这个分量的环流为零。但实际上难于分离这两部分分量，因而闭合的线积分通常大于零。电流产生的静磁场是有旋场的一个例子，我们有：

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = i \quad (\text{安培环路定理})$$

其中  $i$  是线积分的周线所包围的电流。反之，如果周线没有包围电流，磁场当然是无旋的。

对于无旋场来说，由于  $\mathbf{I} \cdot d\mathbf{l}$  的线积分只依赖起点和终点， $\mathbf{I}(\mathbf{r})$  可用下法和某一标势分布  $\psi(\mathbf{r})$  相联系。在无旋场中将质点从点  $\mathbf{r}$  移动到某一基准点  $\mathbf{r}_0$ ，场所做的功就是势能  $\psi(\mathbf{r})$ ：

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{I} \cdot d\mathbf{l} + c \quad (1.2.3)$$

其中  $c$  是常标量。

因此，从点  $\mathbf{r}_1$  移动到点  $\mathbf{r}_2$ ，势能的改变为

$$\psi(\mathbf{r}_1) - \psi(\mathbf{r}_2) = \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{I} \cdot d\mathbf{l} \quad (1.2.4)$$

这就是说，在保守力场中场所作的功等于势能的减少。对相距无穷小的两点  $(x, y, z), (x + \delta x, y, z)$ ，有

$$\delta\psi = - \int_x^{x+\delta x} \mathbf{I}_x dx$$

即

$$\mathbf{I}_x = - \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

因此，由(1.2.1)式定义的无旋场可与标势梯度联系起来

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}) = -\nabla\psi(\mathbf{r}) \quad (1.2.5)$$

因为标量场  $\psi$  满足矢量恒等式  $\nabla \times (\nabla\psi) = 0$ ，所以可以肯定无旋场满足  $\text{curl } \mathbf{I} = 0$ 。由此得出，在一个等势面上， $\psi(\mathbf{r}) = \text{常数}$ ，场矢量  $\mathbf{I}(\mathbf{r})$  处处沿法向，不存在平行于等势面的场分量。

第二类重要的场  $\mathbf{S}(\mathbf{r})$  叫做无散场，此时正和标势的关系式

(1. 2. 5) 类似, 可将场  $\mathbf{S}(\mathbf{r})$  和某个矢量势  $\psi(\mathbf{r})$  联系起来。无散场的特点是矢量场  $\mathbf{S}$  的散度为零, 换句话说, 通过包围点  $\mathbf{r}$  的封闭曲面的净通量密度为零, 这样,

$$\oint \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = \int_V \operatorname{div} \mathbf{S}(\mathbf{r}) dV = 0 \quad (1. 2. 6)$$

其中  $\hat{\mathbf{n}}$  是单位法矢量。

这就是高斯散度定理。无散条件  $\operatorname{div} \mathbf{S}(\mathbf{r}) = 0$  说明, 在以  $\mathbf{r}$  为中心的体积元内不存在净源-壑分布。由于任何矢量场旋度的散度恒为零, 无散场可以表成

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \nabla \times \psi(\mathbf{r}) \quad (1. 2. 7)$$

其中  $\psi(\mathbf{r})$  叫做矢势。当然, 这里矢势并没有唯一确定, 还可以在矢势  $\psi$  上加某个标势的梯度, 即

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \nabla \times (\psi(\mathbf{r}) + \nabla \phi(\mathbf{r})) \quad (1. 2. 8)$$

而由于  $\nabla \times (\nabla \phi) = 0$ , 场  $\mathbf{S}$  仍保持不变。这称为规范不变性, 而变换  $\psi \rightarrow \psi + \nabla \phi$  称为规范变换。在表 1. 2. 1 中将标势和矢势进行了对比。

表 1. 2. 1 标势和矢势的对比

| 无旋场                                      | 无散场                                     |
|--|---|
| $\oint \mathbf{I} \cdot d\mathbf{l} = 0$ | $\int_V \nabla \cdot \mathbf{S} dV = 0$ |
| $\mathbf{I} = -\nabla \phi$              | $\mathbf{S} = \nabla \times \psi$       |
| $\nabla \times \mathbf{I} = 0$           | $\nabla \cdot \mathbf{S} = 0$           |

现在我们来推导标势分布和矢势分布所满足的拉普拉斯微分方程和泊松微分方程。我们将会看到, 这些方程在物理上十分重要, 并将贯穿于本书的始终。

为一般起见, 我们研究既包含无旋分量又包含无散分量的场  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{I}(\mathbf{r}) + \mathbf{S}(\mathbf{r})$ , 并假设场是单值、连续和处处可微的。取场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  的散度, 根据定义,  $\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) = 0$ ,

$$\nabla \cdot \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot [\mathbf{I}(\mathbf{r}) + \mathbf{S}(\mathbf{r})] = \nabla \cdot \mathbf{I}(\mathbf{r}) \quad (1.2.9)$$

由(1.2.5)式,有

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot (\nabla \psi(\mathbf{r})) = -\nabla^2 \psi(\mathbf{r})$$

或

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \quad (1.2.10)$$

这是标势分布的泊松方程。 $f(\mathbf{r})$ 表示矢量场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  散度的空间分布,它一般与标量源密度有关。如果源密度为零,也就是矢量场的散度为零,就得到方程(1.2.10)的齐次形式,称拉普拉斯方程。

标量函数  $f(\mathbf{r})$  反映场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  在空间各点的内禀特性,并和势面  $\psi(\mathbf{r})$  的曲率有关<sup>①</sup>。就拉普拉斯方程来说,不存在壑和源的净分布,因而保证了  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  的散度为零,相应地保证了势面  $\psi(\mathbf{r})$  曲率为零<sup>②</sup>,虽然它一般仍具有梯度。然而,满足泊松方程的势面会有曲率,这曲率直接和标量分布  $f(\mathbf{r})$ ,即场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  的散度相联系。在静电问题中,可用由正的点电荷(源)向负的电荷(壑)引电力线的方法来形象地讨论场的散度,进而讨论势分布。由电荷分布  $f_+(\mathbf{r}), f_-(\mathbf{r})$  所决定的势分布形状如图 1.2.1 所示。

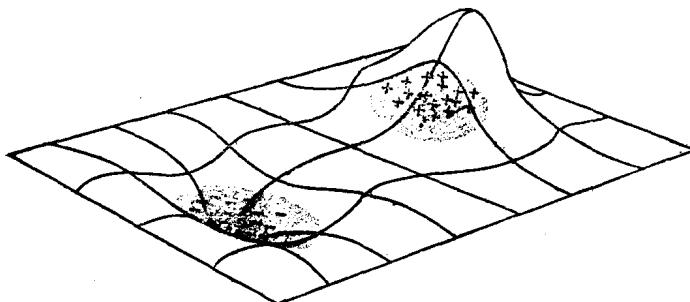


图 1.2.1 由电荷分布  $f_+(\mathbf{r}), f_-(\mathbf{r})$  产生的满足泊松方程的标势变化示意图。

<sup>①</sup> 由上下文看,标势  $\psi(\mathbf{r})$  的值的空间分布构成的曲面称为势面,如图 1.2.1。  
——译者注

<sup>②</sup> 拉普拉斯方程的解有无限多个,认为拉普拉斯方程解  $\psi(\mathbf{r})$  的势面曲率都为零,似乎不太恰当。——译者注

解的唯一性定理使我们能够由泊松方程和拉普拉斯方程确定势的分布。此定理将在 1.5 节讨论。

取场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  的旋度, 由于无旋场的旋度为零, 我们有

$$\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \nabla \times [\mathbf{I}(\mathbf{r}) + \mathbf{S}(\mathbf{r})] = \nabla \times \mathbf{S}(\mathbf{r}) \quad (1.2.11)$$

根据(1.2.7)式和矢量恒等式, 得

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) &= \nabla \times (\nabla \times \psi(\mathbf{r})) \\ &= \nabla(\nabla \cdot \psi(\mathbf{r})) - \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

为了唯一地确定场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ , 必须首先确定矢势  $\psi(\mathbf{r})$  的散度。由(1.2.8)式<sup>①</sup>看到, 可合理地选  $\nabla \cdot \psi = 0$ , 于是(1.2.12)式变为

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \quad (1.2.13)$$

这是矢势分布的泊松方程。矢势的这种特殊选择, 即  $\nabla \cdot \psi = 0$ , 称为库仑规范。 $f(\mathbf{r})$  表示矢量场  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  旋度的空间分布, 它一般和矢量源密度有关。如果  $\operatorname{curl} \mathbf{F}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$  为零, 我们又得到拉普拉斯方程:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.2.14)$$

### 1.3 扩 散 方 程

扩散方程广泛地应用于物理学的许多分支, 当浓度、温度等物理量存在空间梯度的时候, 通常出现扩散方程。扩散方程适用于宏观范围, 在此范围内固体中的热传导可以看成是连续的扩散过程, 而在分子线度上, 热能的分布是通过晶格内部声子-声子相互作用过程来进行的。在稠密流体中粒子浓度的演变是一个非常复杂的问题, 至今还没有十分满意地解决, 肯定不能按照经典扩散过程来解。然而, 扩散到一定时刻以后, 并且在宏观极限下, 这个过程就能用扩散方程很好地描写了, 因而在我们所讨论的一系列场方程中, 扩散方程也占有重要的地位。此外, 当密度、温度等分布

① 原文为(1.2.11)式。——译者注

不均匀并逐渐扩散时，一般伴随有其它效应，例如同时发生热量和熵的输运，不过这里无需涉及这些方面。

显然，与泊松方程和拉普拉斯方程不同，扩散方程和时间有关。但是，如果用某种方法维持浓度的梯度，使浓度的分布保持不变，那么我们将再次得到拉普拉斯方程。

我们考察媒质中浓度梯度引起的粒子由面 1 到面 2 扩散的通量，由此来推导扩散方程。设面 1 和面 2 的空间增量为  $\Delta x$ ，则沿  $x$  方向粒子的净通量显然为

$$\mathcal{F}(x) = -D \frac{\Delta \psi}{\Delta x} \quad (1.3.1)$$

其中  $D$  是比例常数。若距离增量  $\Delta x$  很小，可以将浓度变化展成泰勒级数，取一级近似，有

$$\Delta \psi \cong + \frac{\partial \psi}{\partial x} \Delta x \quad (1.3.2)$$

结合(1.3.1)式，并设该区域各向同性，则有

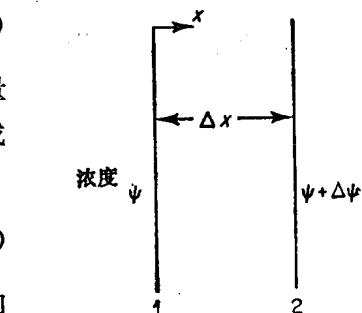


图 1.3.1 计算广义扩散通量的示意图

$$\mathcal{F} = -D \nabla \psi \quad (1.3.3)$$

可见  $D$  是扩散系数。(1.3.3)式是斐克定律的表述形式，即粒子通量和浓度梯度成正比。我们已看到，在分子线度上，特别在扩散的开始阶段，扩散过程和这方程有相当偏离，但是即使在分子线度上，(1.3.3)式仍是正确公式的渐近式，至于在宏观线度上，当粒子的浓度较小，而且密度和温度的变化也较小时，方程(1.3.3)式更是正确的了。斐克定律将粒子扩散的通量和广义势的梯度  $\nabla \psi$  联系起来了。为了进一步建立扩散方程对时间的依赖关系，我们利用守恒条件，按此条件某点扩散通量的散度是

$$\nabla \cdot \mathcal{F} = - \frac{\partial \psi}{\partial t} + c - a \quad (1.3.4)$$

$a$  和  $c$  表示势场中的产生(源)和湮灭(壑)。这样, 方程(1. 3. 4)的意义是很明白的。对斐克方程(1. 3. 3)取散度, 并与(1. 3. 4)式联立, 即得普遍的扩散方程:

$$\nabla^2 \psi(r, t) = \frac{1}{D} \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} + a(r, t) - c(r, t) \quad (1. 3. 5)$$

正如所料, 在一定的条件下( $a, c=0, \partial \psi / \partial t = 0$  或  $|a| = |c|, \partial \psi / \partial t = 0$ ), 扩散方程简化成拉普拉斯方程。如果只是分布稳定, 则方程(1. 3. 5)简化成泊松方程。

我们知道, 如果假设势分布的变数可以分离,  $\psi(r, t) = R(r)T(t)$ , 其中  $R$  和  $T$  分别只是位置和时间的函数, 又如果没有净剩的源或壑的分布, 则有

$$DT\nabla^2 R = RT$$

即

$$\frac{\nabla^2 R}{R} = D^{-1} \frac{T}{T} \quad (1. 3. 6)$$

既然方程(1. 3. 6)式两边都是单一(但不相同)变数的函数, 它们明显地都应该等于常数, 设此常数为  $-h$ , 于是我们得到下面变数分离了的方程

$$\begin{aligned} \frac{\nabla^2 R}{R} &= -h \\ \frac{T}{T} &= -hD \end{aligned} \quad (1. 3. 7)$$

$-h$  称为分离常数, 可由边界条件决定。本来, 不一定需要在方程(1. 3. 7)中保留参数  $D$ , 也不一定把分离常数选为  $-h$ , 然而, 这样的选择对以后计算比较方便。由方程(1. 3. 7)式, 浓度随时间的变化取单向的指数形式:

$$T(t) = T_0 \exp(-hDt) \quad (1. 3. 8)$$

其中  $(hD)^{-1}$  代表扩散的特征驰豫时间。