实用量子力学

下册

[德] S. 福里格 著

宋孝同 高琴 梁仙翠 译

3.1

高等教育出版社

书号 13010·0847
定价 1.55 元

实用量子力学

下　册

〔德〕S. 福里格　著
宋孝同　高琴　梁仙翠　译

高等教育出版社
1983

内 容 简 介

本书根据福里格 (S. Flügge) 所著«Practical Quantum Mechanics» 1974 年英文本译出. 原书分两卷(合订为一册)出版. 中译本分上、下两册出版. 上册即原书第一卷, 内容包括两部分: I. 一般概念, II. 无自旋的单体问题, 共 128 个问题. 下册即原书第二卷, 包括五部分: III. 具有自旋的粒子, IV. 多体问题, V. 非定态问题, VI. 相对论狄拉克方程, VII. 辐射理论, 共 91 个问题. 全部问题都作了详细解答.

本书上册问题 1—66, 94—128 为宋孝同译, 67—93 为高琴译. 下册 III、IV 两部分为梁仙翠译, V 为高琴译. VI、VII 及数学附录为宋孝同译.

本书可供我国高等学校物理专业高年级学生、研究生以及其他有关专业的教师和科研工作者参考.

S. Flügge

Practical Quantum Mechanics

Springer-Verlag 1974

实 用 量 子 力 学

下 册

〔德〕S.福里格 著

宋孝同 高琴 梁仙翠 译

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

山东新华印刷厂潍坊厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 10 字数 239,000

1983 年 1 月第 1 版 1984 年 4 月第 1 次印刷

印数 00,001—8,500

书号 13010·0847 定价 1.55 元

第II卷 目 录

III. 有自旋的粒子

A. 单体问题 ……1

129. 泡利矩阵的建立 ……1

130. 泡利矩阵的本征态 ……3

131. 自旋代数 ……6

132. 旋量变换性质 ……8

133. 有心力场中的自旋电子 ……10

134. 自旋态的四极矩 ……14

135. 磁矩的期待值 ……16

136. 精细结构 ……19

137. 自旋1/2粒子的平面波 ……21

138. 自由电子的自旋共振 ……24

B. 两体和三体问题 ……26

139. 两粒子的自旋函数 ……26

140. 核子之间与自旋有关的有心力 ……29

141. 自旋算符的幂 ……31

142. 两个自旋粒子的角动量本征函数 ……31

143. 张量力算符 ……35

144. 具有张量相互作用的氘核 ……37

145. 氘核的电四极矩和磁偶极矩 ……40

146. 三粒子的自旋函数 ……44

147. 中子为氢分子所散射 ……48

IV. 多 体 问 题

A. 少数粒子 ……52

148. 在圆上的两个相斥的粒子 ……52

149. 三原子的线型分子 ……56

150. 质心运动 ……61

151. 维里定理……64
152. 斯莱特(Slater)行列式……65
153. 用斯莱特行列式表示相互作用中的交换项……68
154. 原子基态中的两个电子……69
155. 氦原子的激发态……72
156. 氦原子的 S 激发态……76
157. 锂基态……81
158. 对锂基态的交换能修正……83
159. 电介质的极化率……87
160. 氖的抗磁磁化率……89
161. 范德瓦耳斯引力……91
162. 激发简并度……93
163. 中性氢分子……96
164. 全同粒子的散射……102
165. 反常质子-质子散射……106
166. 非弹性散射……110
B. 大量的粒子：量子统计……115
167. 金属中的电子气……115
168. 金属的顺磁磁化率……118
169. 未经象力修正的场致发射……120
170. 经象力修正的场致发射……123
171. 白矮星……128
172. 托马斯-费密近似法……132
173. 中性原子的阿马耳迪(Amaldi)修正……137
174. 托马斯-费密原子的能量……139
175. 用于托马斯-费密原子的维里定理……143
176. 托马斯-费密场的梯兹(Tietz)近似法……144
177. 托马斯-费密场的变分近似法……146
178. K 电子的屏蔽……147

V. 非定态问题

179. 与时间无关微扰的二能级系统……152
180. 二能级系统的周期微扰……154

181. 狄拉克的微扰方法 ……157
182. 周期微扰：共振 ……159
183. 散射的黄金规则 ……161
184. 在动量空间中的玻恩散射 ……164
185. 原子的库仑激发 ……167
186. 光电效应 ……170
187. 光的色散，振子强度 ……174
188. 在磁共振装置中自旋取向的翻转 ……177

VI. 相对论性狄拉克方程

189. 狄拉克方程的叠代 ……181
190. 正能量的平面狄拉克波 ……183
191. 旋量的变换性质 ……187
192. 洛伦兹协变量 ……188
193. 宇称变换 ……192
194. 电荷共轭 ……194
195. 混合螺旋性态 ……196
196. 自旋期待值 ……197
197. 狄拉克波旋量的代数性质 ……199
198. 流的代数表示式 ……201
199. 传导流和极化流 ……204
200. 将狄拉克方程分成一对二分量方程 ……206
201. 有心力场的狄拉克理论 ……209
202. 狄拉克理论中的开普勒问题 ……214
203. 氢原子的精细结构 ……218
204. 正动能的径向开普勒解 ……224
205. 平面狄拉克波的角动量展开 ……228
206. 在有心力势上的散射 ……231
207. 连续势阶 ……235
208. 在势跃变处平面波的斜入射 ……242
209. 在势跃变处的反射强度 ……246

VII. 辐 射 理 论

210. 静定谐场的量子化 ……250

211 散射的玻恩近似 ……252
212. 经典辐射场的量子化 ……254
213. 光子的发射几率 ……257
214. 辐射的角分布 ……259
215. 跃迁几率 ……262
216. 偶极辐射的选择定则 ……263
217. 赖曼谱线的强度 ……266
218. 康普顿效应 ……268
219. 韧致辐射 ……272

数 学 附 录

坐标系 ……279
Γ 函数 ……281
贝塞耳函数 ……283
勒让德函数 ……286
球谐函数 ……290
超几何级数 ……294
合流级数 ……298
一些由积分定义的函数 ……299
索引(I, II 两卷) ……302

III. 有自旋的粒子

A. 单 体 问 题

问题 129 泡利矩阵的建立

自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子具有三个基本性质：

1. 它具有和空间坐标无关的内禀矢量的性质；

2. 这矢量是一个和轨道角动量相加在一起的角动量(=自旋)；

3. 如果测量自旋的一个分量，那末，所得结果只能是它的两个本征值 $+\frac{1}{2}\hbar$ 和 $-\frac{1}{2}\hbar$ 中的一个.

用两分量的波函数和相应的自旋算符的 2×2 矩阵能将上述性质描述出来. 试建立这些矩阵.

解 令 $\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 为自旋矢量算符，于是按照性质 2，它的三个分量服从角动量算符的对易关系：

$$S_xS_y-S_yS_x=\hbar iS_z \quad (\text{等等，循环}) \tag{129.1a}$$

或用无量纲算符 σ_i 表示：

$$\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x=2i\sigma_z \quad (\text{等等，循环}). \tag{129.1b}$$

按照性质 3，每一个 σ_i 只有本征值 $+1$ 和 -1，因此，用二维希耳伯空间的 2×2 矩阵来表示这些算符应该是可能的. 在同一希耳伯坐标系中，它们不能全部是对角的，因为它们是不对易的. 如果在选择希耳伯坐标系时使

$$\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{129.2}$$

是对角的，坐标方向的单位矢量是

$$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\quad 和\quad \beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},\tag{129.3}$$

则得

$$\sigma_z\alpha=\alpha;\quad \sigma_z\beta=-\beta.\tag{129.4}$$

如粒子处于希耳伯矢量 $\alpha(\beta)$ 的状态，它的自旋指向正(负)z 方向.

σ_x 和 σ_y 的一般形式是

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{pmatrix};\qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}b_{11}&b_{12}\\b_{21}&b_{22}\end{pmatrix}.\tag{129.5}$$

现在来求它们的矩阵元. 我们先利用对于 σ_x 和 σ_y 为一次的两个对易子(129.1b)，即

$$\sigma_x\sigma_z-\sigma_z\sigma_x=-2i\sigma_y\quad 或\quad \begin{pmatrix}0&-2a_{12}\\2a_{21}&0\end{pmatrix}=-2i\begin{pmatrix}b_{11}&b_{12}\\b_{21}&b_{22}\end{pmatrix}$$

和

$$\sigma_y\sigma_z-\sigma_z\sigma_y=+2i\sigma_x\quad 或\quad \begin{pmatrix}0&-2b_{12}\\2b_{21}&0\end{pmatrix}=+2i\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{pmatrix}$$

求得

$$a_{11}=a_{22}=b_{11}=b_{22}=0;\quad b_{12}=-ia_{12};\quad b_{21}=+ia_{21},\tag{129.6}$$

于是还剩下两个矩阵元 a_{12} 和 a_{21} 有待确定. 利用第三个对易关系

$$\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x=2i\sigma_z$$

或

$$\begin{pmatrix}2ia_{12}a_{21}&0\\0&-2ia_{12}a_{21}\end{pmatrix}=2i\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

就可得到它们之间的关系式为

$$a_{12}a_{21}=1.\tag{129.7}$$

方程式(129.6)和(129.7)中还留下一个复数(譬如 a_{12})未确定. 我们任意地选定这参数为

$$a_{12}=1, \tag{129.8}$$

于是得到三个泡利矩阵的表示式:

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix};\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix};\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{129.9}$$

在用方程(129.3)的 σ_z 本征矢量来表示时，可以用下面的等效关系来代替(129.9)，即

$$\begin{aligned}&\sigma_x\alpha=\beta;\quad \sigma_y\alpha=i\beta;\quad \sigma_z\alpha=\alpha\\ &\sigma_x\beta=\alpha;\quad \sigma_y\beta=-i\alpha;\quad \sigma_z\beta=-\beta\end{aligned} \tag{129.10}$$

问题 130　泡利矩阵的本征态

试确定算符 σ_x 和 σ_y 的本征矢量，并证明 $|a_{12}|^2=1$ 是必要条件. 两个"移位算符"

$$\sigma_+=\sigma_x+i\sigma_y;\quad \sigma_-=\sigma_x-i\sigma_y \tag{130.1}$$

和自旋矢量算符的绝对平方

$$\boldsymbol{\sigma}^2=\sigma_x^2+\sigma_y^2+\sigma_z^2 \tag{130.2}$$

的性质是什么?

解　用 a 代替 a_{12}，由上题得

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & a\\ 1/a & 0\end{pmatrix};\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -ia\\ i/a & 0\end{pmatrix} \tag{130.3}$$

从而

$$\sigma_+=\begin{pmatrix}0 & 2a\\ 0 & 0\end{pmatrix};\quad \sigma_-=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 2/a & 0\end{pmatrix} \tag{130.4}$$

令

$$\psi=\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix}=u\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}+v\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}=u\alpha+v\beta \tag{130.5}$$

为二分量波函数，于是

$$\sigma_x\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}av\\u/a\end{pmatrix};\quad \sigma_y\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-iav\\iu/a\end{pmatrix};$$
$$\sigma_+\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2av\\0\end{pmatrix};\quad \sigma_-\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\2u,a\end{pmatrix}. \tag{130.6}$$

σ_z 的本征矢量满足以 λ 为本征值的方程 $\sigma_z\psi=\lambda\psi$，用分量表示时就是

$$av=\lambda u \quad 和 \quad u/a=\lambda v,$$

只有当 $\lambda=\pm1$ 时，这些关系式才能同时成立．这样就得到本征解

$$\text{当}\ \lambda_1=+1\ \text{时},\quad \psi_1=u\begin{pmatrix}1\\1/a\end{pmatrix}=u\left(\alpha+\frac{1}{a}\beta\right);$$
$$\text{当}\ \lambda_2=-1\ \text{时},\quad \psi_2=u\begin{pmatrix}1\\-1/a\end{pmatrix}=u\left(\alpha-\frac{1}{a}\beta\right). \tag{130.7}$$

自旋方向向上(就是在 $+z$ 方向)和向下的几率正比于希耳伯矢量 α 和 β 前面的因子的绝对值平方，即 $1:1/|a|^2$．因为没有理由说某一指向的几率要比另一个大，于是得

$$|a|^2=1. \tag{130.8}$$

对于 σ_y 可作同样的考虑．

从现在起，我们明确地选定 $a=1$．于是得到三个泡利矩阵 σ_i(每一个有本征值 $\lambda_1=+1$ 和 $\lambda_2=-1$)和它们的本征矢量：

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix};\quad \psi_1=2^{-\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix};\quad \psi_2=2^{-\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}; \tag{130.9a}$$

$$\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix};\quad \psi_1=2^{-\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix};\quad \psi_2=2^{-\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}; \tag{130.9b}$$

$$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix};\quad \psi_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix};\quad \psi_2=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{130.9c}$$

三个泡利矩阵是具有实本征值的厄密算符，$\sigma_i^+=\sigma_i$．下面两个算符

$$\sigma_+=\begin{pmatrix}0 & 2\\ 0 & 0\end{pmatrix} \quad 和 \quad \sigma_-=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 2 & 0\end{pmatrix} \tag{130.10}$$

不是厄密的，$\sigma_+^\dagger=\sigma_-$ 和 $\sigma_-^\dagger=\sigma_+$. 它们不具有本征值或本征矢量，因为它们都是不能对角化的. 对这一点证明于下.

最一般的二维幺正矩阵可用实参数 θ、ξ、η 表示(除去无关的相因子)为

$$U=\begin{pmatrix}\cos\vartheta; & \sin\vartheta e^{i\xi}\\ -\sin\vartheta e^{i\eta}; & \cos\vartheta e^{i(\xi+\eta)}\end{pmatrix}.$$

于是 σ_+ 的幺正变换为

$$U^\dagger\sigma_+U=2e^{i\eta}\begin{pmatrix}-\sin\vartheta\cos\vartheta; & \cos^2\vartheta e^{i\xi}\\ -\sin^2\vartheta e^{-i\xi}; & \sin\vartheta\cos\vartheta\end{pmatrix},$$

对于实参数的任何选择，都不能使上式成为对角的，因为对于同一辐角 ϑ，$\sin\vartheta$ 和 $\cos\vartheta$ 不会同时为零.

如将算符 σ_+ 和 σ_- 作用于希耳伯矢量 α 和 β，则得到

$$\begin{aligned}&\sigma_+\alpha=0; \quad \sigma_-\alpha=2\beta; \quad \sigma_+\sigma_-\alpha=4\alpha; \quad \sigma_-\sigma_+\alpha=0;\\ &\sigma_+\beta=2\alpha; \quad \sigma_-\beta=0; \quad \sigma_+\sigma_-\beta=0; \quad \sigma_-\sigma_+\beta=4\beta.\end{aligned} \tag{130.11}$$

如把它们去和 σ_z 对易，它们自己就会重新产生：

$$\sigma_+\sigma_z-\sigma_z\sigma_+=-2\sigma_+; \quad \sigma_-\sigma_z-\sigma_z\sigma_-=+2\sigma_-. \tag{130.12}$$

以角动量归一化的算符 σ_+ 和 σ_- 表示的

$$S_+=\frac{\hbar}{2}\sigma_+ \quad 和 \quad S_-=\frac{\hbar}{2}\sigma_- \tag{130.13}$$

与相类似的算符 L_+ 和 L_-(第 56 题)具有同样的性质，就是能使 z 分量移位 1(单位：$\hbar$)：

$$\begin{aligned}&S_+\alpha=0; \qquad S_-\alpha=\hbar\beta;\\ &S_+\beta=\hbar\alpha; \qquad S_-\beta=0.\end{aligned}$$

S_+ 使自旋分量为 $-\frac{1}{2}\hbar$ 的 β 态改变为 $+\frac{1}{2}\hbar$ 的 α 态，而 S_- 正好倒过来. $S_+\alpha$ 和 $S_-\beta$ 都必须等于零，因为按照移位规则，它们应当

给出 $+\frac{3}{2}\hbar$ 和 $-\frac{3}{2}\hbar$ 的态，这些自旋态在我们所采用的希耳伯空间是不存在的.

最后我们来考察自旋算符的绝对平方

$$\boldsymbol{\sigma}^2=\sigma_x^2+\sigma_y^2+\sigma_z^2=\frac{1}{2}(\sigma_+\sigma_-+\sigma_-\sigma_+)+\sigma_z^2. \qquad (130.14)$$

容易看出，所有三个 σ_i^2 都是单位矩阵，因此

$$\sigma^2=3\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

是对角的，不论我们选取怎样的希耳伯矢量，它的唯一值是 3，或者直截了当地说它等于 3. 运用(130.11)中 $\sigma_+\sigma_-$ 和 $\sigma_-\sigma_+$ 的关系式，从(130.14)的第二形式也可得到同样的结果.

由方程(130.14)得出 $\boldsymbol{S}^2=\frac{3}{4}\hbar^2$，或者以 S 代表描述自旋的量子数，那么得出的结果是 $\hbar^2S(S+1)$，其中 $S=\frac{1}{2}$. 这就是具有"自旋 $\frac{1}{2}$"的态的含义.

问题 131　自 旋 代 数

试证明三个泡利矩阵和单位矩阵一起组成了一个代数的完全基.

解　如果 1、σ_x、σ_y、σ_z 组成一个完全基，那么，把具有下列形式(其中 a_i 是复数系数)

$$N=a_0+a_1\sigma_x+a_2\sigma_y+a_3\sigma_z \qquad (131.1)$$

的任何两个数相加或相乘都不能产生超出此代数之外的数. 显然，这规则对加法是成立的. 但对两数相乘是否正确仍须加以证明. 为此，我们先建立泡利矩阵的乘法表.

令 i、k、l 代表三个下标 x、y、z 的任意循环排列，则 σ_i 满足对易关系

$$\sigma_i\sigma_k-\sigma_k\sigma_i=2i\sigma_l \tag{131.2}$$

和归一化关系

$$\sigma_i^2=1. \tag{131.3}$$

此外，容易验证泡利矩阵服从反对易规则

$$\sigma_i\sigma_k+\sigma_k\sigma_i=0 \quad (i\neq k). \tag{131.4}$$

将(131.2)和(131.4)相加和相减，就得到下列乘积：

$$\sigma_i\sigma_k=i\sigma_l; \quad \sigma_k\sigma_i=-i\sigma_l. \tag{131.5}$$

所以，任何两个基元的乘积，除相差一个复数因子外，仍回到另一基元.

乘 法 表

第一因子	第二因子			
	1	σ_x	σ_y	σ_z
1	1	σ_x	σ_y	σ_z
σ_x	σ_x	1	$i\sigma_z$	$-i\sigma_y$
σ_y	σ_y	$-i\sigma_z$	1	$i\sigma_x$
σ_z	σ_z	$i\sigma_y$	$-i\sigma_x$	1

必须指出，所有三个泡利矩阵的乘积因此而简单地成为

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z=i. \tag{131.6}$$

对于不具有本征值的 σ_+ 和 σ_-，现在可以加以讨论. 从乘法表得到

$$\sigma_+^2=(\sigma_x\pm i\sigma_y)^2=\sigma_x^2-\sigma_y^2\pm i(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x)=0.$$

这是一个有趣的结果，它表明在泡利代数中不为零的数的平方可以等于零. 顺便说一说，事实上不论是 σ_+ 还是 σ_- 都不存在任何倒数.

适合关系式

$$N=N^2 \tag{131.7}$$

的数 N 称为幂等数. 这种数属于我们的代数，

$$\frac{1}{2}(1+\sigma_i) \quad 和 \quad \frac{1}{2}(1-\sigma_i) \quad (i=x,\ y,\ z) \tag{131.8}$$

就是这样的数. 用矩阵表示时,

$$P_+=\frac{1}{2}(1+\sigma_z)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix};$$

$$P_-=\frac{1}{2}(1-\sigma_z)=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix};$$

将它们作用于希耳伯基矢 α 和 β, 得到

$$P_+\alpha=\alpha; \quad P_-\alpha=0;$$

$$P_+\beta=0; \quad P_-\beta=\beta.$$

因此,将这些算符作用在含有不同自旋取向的态矢量上,它们将抑制其中的 β 或 α, 即

$$P_+(u\alpha+v\beta)=u\alpha; \quad P_-(u\alpha+v\beta)=v\beta,$$

这里留下的是态矢量在二维希耳伯空间的一个基矢方向上的投影. 所以称它们为投影算符.

注 泡利代数实质上和四元数代数相同, 在四元数代数中用 $i\sigma_k$ 代替 σ_k 作为基元.

问题 132 旋量变换性质

怎样才能证明单粒子态的自旋

$$\boldsymbol{s}=\int d^3x\psi^+\boldsymbol{\sigma}\psi \tag{132.1}$$

是一个矢量?应注意: σ_i 在空间转动下不随坐标变换,而 $\boldsymbol{s}$ 的变换性质完全根据波函数而定.

解 根据空间转动群性质,我们只要考察无穷小转动

$$x_i'=x_i+\sum_k{}'\varepsilon_{ik}x_k; \quad \varepsilon_{ki}=-\varepsilon_{ik} \tag{132.2}$$

就足够了,其中

$$\varepsilon_{12}=\alpha_3;\quad \varepsilon_{23}=\alpha_1;\quad \varepsilon_{31}=\alpha_2 \tag{132.3}$$

是围绕三个轴转动的无穷小角. 如果 $\boldsymbol{s}$ 是矢量，它必须服从同一变换规则

$$s_i'=s_i+\sum_k{}' \varepsilon_{ik}s_k \tag{132.4}$$

要做到这一点，只需将波函数作如下的变换：

$$\psi'=(1+\xi)\psi;\quad \psi'^{\dagger}=\psi^{\dagger}(1+\xi^{\dagger}) \tag{132.5}$$

其中 ξ 是无穷小量. 现在我们来确定这变换.

首先，$\psi^{\dagger}\psi$ 是一个标量，故

$$\psi'^{\dagger}\psi'=\psi^{\dagger}(1+\xi^{\dagger})(1+\xi)\psi=\psi^{\dagger}\psi$$

或

$$\xi^{\dagger}=-\xi \tag{132.6}$$

将(132.4)和(132.5)代入(132.1)，得

$$s_i'=\int d^3x\psi^{\dagger}(1-\xi)\sigma_i(1+\xi)\psi=s_i+\int d^3x\psi^{\dagger}(\sigma_i\xi-\xi\sigma_i)\psi$$

将这表式与(132.4)比较，得出决定算符 ξ 的方程为：

$$\sigma_i\xi-\xi\sigma_i=\sum_k{}' \varepsilon_{ik}\sigma_k\quad (i,\ k=1,\ 2,\ 3) \tag{132.7}$$

容易证明，这些方程有明确的解

$$\xi=\frac{i}{2}(\varepsilon_{12}\sigma_3+\varepsilon_{23}\sigma_1+\varepsilon_{31}\sigma_2) \tag{132.8}$$

因为将它代入(132.7)的左边，利用对易规则就可得到与右边相一致的结果，例如，对 $i=1$，

$$\frac{i}{2}[\sigma_1,\ \varepsilon_{12}\sigma_3+\varepsilon_{23}\sigma_1+\varepsilon_{31}\sigma_2]$$

$$=\frac{i}{2}\{-\varepsilon_{12}\cdot 2i\sigma_2+\varepsilon_{31}\cdot 2i\sigma_3\}=\varepsilon_{12}\sigma_2+\varepsilon_{13}\sigma_3$$

对 $i=2$ 或 3，可得到类似的结果.

用(132.3)转动角记号表示，算符(132.8)可以写成更简洁形式

$$\xi=\frac{i}{2}\sum_k \alpha_k\sigma_k. \tag{132.9}$$

将它作用于两分量波函数

$$\psi=\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix}=u\alpha+v\beta \tag{132.10}$$

得出变换后的波函数

$$\psi'=\begin{pmatrix}u'\\ v'\end{pmatrix}=u'\alpha+v'\beta, \tag{132.10'}$$

其中

$$\begin{aligned} u'&=\left(1+\frac{i}{2}\alpha_3\right)u+\frac{i}{2}(\alpha_1-i\alpha_2)v;\\ v'&=\frac{i}{2}(\alpha_1+i\alpha_2)u+\left(1-\frac{i}{2}\alpha_3\right)v. \end{aligned} \tag{132.11}$$

具有这种变换性质的两分量函数称为旋量.

问题 133　有心力场中的自旋电子

试确定与自旋无关的有心力场中自旋电子的波函数. 这波函数必须是两个算符

$$\boldsymbol{J}^2=(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})^2 \quad 和 \quad J_z=L_z+S_z \tag{133.1}$$

的本征函数,其中 $\boldsymbol{L}$ 是轨道角动量, $\boldsymbol{S}$ 是电子的自旋.

解　先考察角动量的 z 分量. 因为

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi};\quad S_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_z;\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},$$

故可写

$$J_z=\hbar\begin{pmatrix}-i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}+\dfrac{1}{2}; & 0\\ 0; & -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}-\dfrac{1}{2}\end{pmatrix}. \tag{133.2}$$

这算符的本征函数具有如下形式

$$\psi=\begin{pmatrix} C_1 e^{i\left(m_j-\frac{1}{2}\right)\varphi} \\ C_2 e^{i\left(m_j+\frac{1}{2}\right)\varphi} \end{pmatrix}, \tag{133.3}$$

其中 C_1 和 C_2 仍是变量 r 和 θ 的任意函数. 容易看出, 用 J_z 作用于 ψ 的结果是

$$J_z\psi=\hbar m_j\psi, \tag{133.4}$$

所以 $\hbar m_j$ 是总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的 z 分量的本征值. 为了达到更好地理解方程(133.3)的目的, 我们采用记号

$$\psi=C_1 e^{i\left(m_j-\frac{1}{2}\right)\varphi}\alpha+C_2 e^{i\left(m_j+\frac{1}{2}\right)\varphi}\beta \tag{133.3'}$$

从这里可以看出: 第一项描写自旋向上时的 ψ 与坐标的关系, 第二项描写自旋向下时的 ψ 与坐标的关系. 这个 ψ 与坐标的关系决定了轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 的分量 $\hbar m_l$, 而 $\boldsymbol{L}$ 要求 $m_l=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots$, m_l 是整数. 当自旋向上时, 我们有 $m_j=m_l+\dfrac{1}{2}$, 自旋向下时, $m_j=m_l-\dfrac{1}{2}$, 因此 m_j 是半整数. 这些都是矢量模型中著名的加法规则. (133.3)或(133.3′)波函数的特征是: m_j 是"好量子数"而 m_l 则不是, 因为态矢量是由 m_l 值不同的两个部分混合而成的.

现在我们考察算符 $\boldsymbol{J}^2$. 如将泡利矩阵代入 $\boldsymbol{S}=\dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, 则

$$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{S}^2+2(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})=\boldsymbol{L}^2+\frac{3}{4}\hbar^2+\hbar\begin{pmatrix} L_z & L_- \\ L_+ & -L_z \end{pmatrix}$$

和 $\boldsymbol{L}^2$ 相类似, 我们用 $\hbar^2 j(j+1)$ 来表示 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值, 于是我们要解的本征值方程是

$$\boldsymbol{J}^2\psi=\begin{pmatrix} \boldsymbol{L}^2+\dfrac{3}{4}\hbar+\hbar L_z & \hbar L_- \\ \hbar L_+ & \boldsymbol{L}^2+\dfrac{3}{4}\hbar^2-\hbar L_z \end{pmatrix}\psi=\hbar^2 j(j+1)\psi. \tag{133.5}$$

为了使 ψ 同时是 J_z 和 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征函数，它必须是(133.3)的形式，现在应确定 C_1 和 C_2 与变比 ϑ 的函数关系，为此，令

$$\psi=\begin{pmatrix} f(r)Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}(\vartheta,\ \varphi) \\ g(r)Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}(\vartheta,\ \varphi) \end{pmatrix} \tag{133.6}$$

(133.6)中的球谐函数和 φ 的关系正好是(133.3)中的形式。将(133.6)式代入(133.5)式来表示 $\boldsymbol{J}^2\psi$，并应用下列一般公式(参看 56 题)

$$L_+Y_{l,m}=-\hbar\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\,Y_{l,m+1}; \tag{133.7a}$$

$$L_-Y_{l,m}=-\hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,Y_{l,m-1}; \tag{133.7b}$$

$$J_zY_{l,m}=\hbar mY_{l,m}; \tag{133.7c}$$

$$\boldsymbol{L}^2Y_{l,m}=\hbar^2l(l+1)Y_{l,m}, \tag{133.7d}$$

就可得到

$$\boldsymbol{J}^2\psi=\hbar^2\begin{pmatrix} f(r)\left[l(l+1)+\frac{3}{4}+\left(m_j-\frac{1}{2}\right)\right]Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \\ \quad -g(r)\sqrt{\left(l+m_j+\frac{1}{2}\right)\left(l-m_j+\frac{1}{2}\right)}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \\ -f(r)\sqrt{\left(l+m_j+\frac{1}{2}\right)\left(l-m_j-\frac{1}{2}\right)}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \\ \quad +g(r)\left[l(l+1)+\frac{3}{4}-\left(m_j+\frac{1}{2}\right)\right]Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}.$$

因此，可从本征值方程(133.5)式导出 $f(r)$ 和 $g(r)$ 的两个线性代数方程：

$$\begin{aligned} &f\left[l(l+1)+\frac{3}{4}+\left(m_j-\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]-g\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2}=0; \\ &-f\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2}+g\left[l(l+1)+\frac{3}{4}-\left(m_j+\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]=0. \end{aligned} \tag{133.8}$$

从上面消去球谐函数的情况可以看出，(133.6)式的函数能满足解

题的需要. 因此, 甚至在自旋理论中, l 仍是"好"量子数.

只有当 $f(r)$ 和 $g(r)$ 仅相差一常数因子时, (133.8)中的两个方程才能同时成立. 现写出

$$f(r)=AF(r);\quad g(r)=BF(r). \tag{133.9}$$

于是由(133.8)可以确定比值 B/A. 因线性方程(133.8)是齐次的, 它们的行列式必为零,

$$\left[j(j+1)-\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\right]^2-m_j^2-\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2\right]=0. \tag{133.10}$$

显然, 这条件与 m_j 无关. 这是很普遍的维格纳和爱卡特定理的最简单结果之一. 有两个不同的 $j(j+1)$ 值满足(133.10), 即

解 I. $$j=l+\frac{1}{2};\ B=-A\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}-m_j}{l+\frac{1}{2}+m_j}};$$

$$\psi_I=\frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+\frac{1}{2}+m_j}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\\ -\sqrt{l+\frac{1}{2}-m_j}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}. \tag{133.11}$$

解 II. $$j=l-\frac{1}{2};\quad B=A\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}+m_j}{l+\frac{1}{2}-m_j}};$$

$$\psi_{II}=\frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+\frac{1}{2}-m_j}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{l+\frac{1}{2}+m_j}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}. \tag{133.12}$$

两个解都是归一化的. 因为在所有的分量波函数中同一 l 级的球谐函数是分裂为二的, 又因假定势能与自旋无关, 所以函数 F_l 由径向薛定谔方程决定, 即

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\chi_l''-\frac{l(l+1)}{r^2}\chi_l\right)+V(r)\chi_l=E_l\chi_l \qquad (133.13)$$

其中

$$\chi_l=rF_l(r) \qquad (133.14)$$

注 当 $l=0$ 时，如果 m_j 干 $\frac{1}{2}$ 不等于零，则球谐函数为零. 如能注意到这一点，那么，公式(133.11)和(133.2)可应用于 $l=0$ 的态. 于是我们得到

$$\psi_I=\frac{F_0(r)}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad \text{当 } l=0,\ m_j=+\frac{1}{2}$$

和

$$\psi_I=-\frac{F_0(r)}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad \text{当 } l=0,\ m_j=-\frac{1}{2}$$

另一函数 ψ_{II} 在两种情况下都恒等于零. 因此对于负 j 就没有解了. 将算符 J^2 和 J_z 作用于仅与 r 有关的两分量波函数得到同样的结果.

问题 134 自旋态的四极矩

试确定当计及电子自旋时球对称势场中单电子态的四极矩.

解 本征函数(参看(133.11, 12))的绝对平方是

$$|\psi_I|^2=\frac{|F_l(r)|^2}{2l+1}\left\{\left(l+\frac{1}{2}+m_j\right)\left|Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\right|^2+\left(l+\frac{1}{2}-m_j\right)\left|Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\right|^2\right\}, \quad \text{当 } j=l+\frac{1}{2} \qquad (134.1a)$$

和

$$|\psi_{II}|^2=\frac{|F_l(r)|^2}{2l+1}\left\{\left(l+\frac{1}{2}-m_j\right)\left|Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\right|^2+\left(l+\frac{1}{2}+m_j\right)\left|Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\right|^2\right\}, \quad \text{当 } j=l-\frac{1}{2}. \qquad (134.1b)$$

必须指出，$|m_j|\leq j$，并且当 $l=0$ 时，函数 ψ_{II} 恒等于零.

因为(134.1a, b)与角 φ 无关，第 61 题的讨论仍然适合，因此四极张量的非对角元素的平均值为零，并且

$$\langle Q_{xx}\rangle=\langle Q_{yy}\rangle=-\frac{1}{2}\langle Q_{zz}\rangle. \tag{134.2}$$

于是我们只需要按照公式

$$\langle Q_{zz}\rangle=\int d^3x\,|\psi|^2r^2(3\cos^2\vartheta-1) \tag{134.3}$$

计算 $\langle Q_{zz}\rangle$. 利用第 61 题已证明的关系

$$\oint d\Omega(3\cos^2\vartheta-1)\,|Y_{l,m}|^2=\frac{2l(l+1)-6m^2}{(2l-1)(2l+3)} \tag{134.4}$$

和采用缩写

$$\int_0^\infty dr\,r^4|F_l(r)|^2=\langle r^2\rangle, \tag{134.5}$$

可以从(134.1a, b)得到

$$\langle Q_{zz}\rangle=\frac{\langle r^2\rangle}{2l+1}\left\{\left(l+\frac{1}{2}\pm m_j\right)\frac{2l(l+1)-6\left(m_j-\frac{1}{2}\right)^2}{(2l-1)(2l+3)}\right.$$
$$\left.+\left(l+\frac{1}{2}\mp m_j\right)\frac{2l(l+1)-6\left(m_j+\frac{1}{2}\right)^2}{(2l-1)(2l+3)}\right\}.$$

对 $j=l+\frac{1}{2}$ 用上层的符号, 对 $j=l-\frac{1}{2}$ 用下层符号, 且 $l\geqq 1$. 花括号内各项经过整理后, 得出

$$\langle Q_{zz}\rangle=\langle r^2\rangle\,\frac{2l(l+1)-6\left(m_j^2+\frac{1}{4}\right)\pm\frac{12}{2l+1}m_j^2}{(2l-1)(2l+3)}, \tag{134.6}$$

此公式可和(61.8)相比较.

用 j 代替 l, 我们就可能得到一个比(134.6)更为广泛的公式

$$\langle Q_{zz}\rangle=\langle r^2\rangle\cdot\frac{1}{2}\left(1-\frac{3m_j^2}{j(j+1)}\right), \tag{134.7}$$

这公式对 $j=l\pm\frac{1}{2}$ 两种符号同样适合. 在下表中列出 j 的一些最低值的数值结果. 从这里可以看出, 对于 $j=\frac{1}{2}$ 的 S 态和 P 态,

电子的分布都是球对称的. 一般说来,随着$|m_j|$的增加,组态的电子分布由长椭球形改变到扁椭球形.

态	j	$\langle Q_{zz}\rangle/\langle r^2\rangle$			
		$m_j=\pm\frac{1}{2}$	$m_j=\pm\frac{3}{2}$	$m_j=\pm\frac{5}{2}$	$m_j=\pm\frac{7}{2}$
$S_{\frac{1}{2}}P_{\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{2}$	0	·	--	—
$P_{\frac{3}{2}}D_{\frac{3}{2}}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{2}{5}$	$-\frac{2}{5}$	--	—
$D_{\frac{5}{2}}F_{\frac{5}{2}}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{16}{35}$	$+\frac{4}{35}$	$-\frac{20}{35}$	—
$F_{\frac{7}{2}}G_{\frac{7}{2}}$	$\frac{7}{2}$	$+\frac{10}{21}$	$+\frac{6}{21}$	$-\frac{2}{21}$	$-\frac{14}{21}$

表中每一条水平线表示矩的总和为零, 因为它相当于球对称封闭壳层. 关于这一点,可作如下很普遍的证明:

$$\sum_{m_j=-\frac{1}{2}}^{j}1=j+\frac{1}{2}\quad\text{和}\quad\sum_{m_j=\frac{1}{2}}^{j}m_j^2=\frac{1}{3}\,j\left(j+\frac{1}{2}\right)(j+1),$$

由这些关系可得出

$$\sum_{m_j=-\frac{1}{2}}^{j}\langle Q_{zz}\rangle=\frac{1}{2}\langle r^2\rangle\left\{\sum_{m_j=\frac{1}{2}}^{j}1-\frac{3}{j(j+1)}\sum_{m_j=\frac{1}{2}}^{j}m_j^2\right\}=0.$$

问题 135　磁矩的期待值

对有心力场中的自旋电子, 试导出矢量 $\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{J}$ 的所有三个分量和磁矩的期待值.

解　设

$$u=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$$

是态的本征旋量,则有

$$u^{\dagger}S_xu=\frac{\hbar}{2}(u_1^*u_2+u_2^*u_1);\quad u^{\dagger}S_yu=\frac{\hbar}{2i}(u_1^*u_2-u_2^*u_1).$$

$$u^{\dagger}S_z u=\frac{\hbar}{2}(u_1^{*}u_1-v_2^{*}u_2) \tag{135.1}$$

J^2 和 J_z 的本征旋量在问题 133 中已确定，它们是

$$u_1=\frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}}A_{j,l}Y_{l,m_j-\frac{1}{2}};\quad u_2=\frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}}B_{j,l}Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \tag{135.2}$$

其中

$$A_{l+\frac{1}{2},l}=\sqrt{l+\frac{1}{2}+m_j};\quad B_{l+\frac{1}{2},l}=\sqrt{l+\frac{1}{2}-m_j} \tag{135.3a}$$

和

$$A_{l-\frac{1}{2},l}=\sqrt{l+\frac{1}{2}-m_j};\quad B_{l-\frac{1}{2},l}=\sqrt{l+\frac{1}{2}+m_j}. \tag{135.3b}$$

将这些本征旋量代入 S_x 和 S_y 的期待值的表式(135.1)中，得到的是不同球谐函数的乘积，所以 $\langle S_x\rangle=0$ 和 $\langle S_y\rangle=0$，另一方面，我们得到

$$\langle S_z\rangle=\frac{\hbar}{2}\int_0^{\infty}dr r^2\frac{F_l(r)^2}{2l+1}(A_{j,l}^2-B_{j,l}^2), \tag{135.4}$$

并且归一化积分为

$$\int_0^{\infty}dr r^2\frac{|F_l(r)|^2}{2l+1}(A_{j,l}^2+B_{j,l}^2)=\int_0^{\infty}dr r^2|F_l(r)|^2=1, \tag{135.5}$$

于是得到

$$\langle S_z\rangle=\frac{\hbar}{2}\frac{A_{j,l}^2-B_{j,l}^2}{A_{j,l}^2+B_{j,l}^2}, \tag{135.6}$$

对于 $j=l+\frac{1}{2}$ 的态，这式是

$$\langle S_z\rangle_+=\hbar m_j\frac{1}{2l+1}=\hbar m_j\frac{1}{2j}; \tag{135.7a}$$

而对于 $j=l-\frac{1}{2}$ 的态，

$$\langle S_z\rangle_-=-\hbar m_j\frac{1}{2l+1}=-\hbar m_j\frac{1}{2(j+1)}. \tag{135.7b}$$

轨道角动量的三个分量的期待值用类似的方法由

$$u^{\dagger}\boldsymbol{L}u=u_1^{*}\boldsymbol{L}u_1+u_2^{*}\boldsymbol{L}u_2$$

去求. 因为算符 $L_x\pm iL_y$ 使得球谐函数的第一个下标从 l 改变到 $l\pm1$, 所以这些分量的期待值同样为零(参看 58 题). 对于分量 L_z, 我们有

$$\langle L_z\rangle=\hbar\frac{\int d^3x\left\{u_1^{*}\left(m_j-\frac{1}{2}\right)u_1+u_2^{*}\left(m_j+\frac{1}{2}\right)u_2\right\}}{\int d^3x\{u_1^{*}u_1+u_2^{*}u_2\}}$$

或

$$\langle L_z\rangle=\hbar\frac{A_{j,l}^2\left(m_j-\frac{1}{2}\right)+B_{j,l}^2\left(m_j+\frac{1}{2}\right)}{A_{j,l}^2+B_{j,l}^2}.$$

利用(135.6), 上式可简化为

$$\langle L_z\rangle=\hbar m_j-\langle S_z\rangle, \tag{135.8}$$

因为 u 是本征值为 $\hbar m_j$ 的 $J_z=L_z+S_z$ 的本征旋量, 从这点出发我们就可方便地求得上面的公式.

由于 L_x、L_y 和 S_x、S_y 的期待值为零, 所以 J_x 和 J_y 的期待值当然为零.

带电荷 $-e$ 的电子的磁矩算符是

$$\boldsymbol{M}=-\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}). \tag{135.9}$$

它在 x 和 y 方向的期待值也是零, 但

$$\langle M_z\rangle=-\frac{e}{2mc}\{\langle L_z\rangle+2\langle S_z\rangle\}, \tag{135.10}$$

根据(135.8), 这式子可改写为

$$\langle M_z\rangle=-\frac{e\hbar}{2mc}(m_j+\langle S_z\rangle).$$

利用(135.7a, b), 可以导出, 对于 $j=l+\frac{1}{2}$,

$$\langle M_z\rangle_+ = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \left(1+\frac{1}{2j}\right) = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \frac{2j+1}{2j}.$$

(135.11a)

对于 $j=l-\frac{1}{2}$,

$$\langle M_z\rangle_- = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \left(1-\frac{1}{2(j+1)}\right) = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \frac{2j+1}{2j+2}.$$

(135.11b)

注　最后两公式表明 $j=l+\frac{1}{2}$ 或是 $j=l-\frac{1}{2}$ 的闭合支壳层(n, l)不具有合磁矩.

(135.11a, b)中与 $-\frac{e\hbar}{2mc} mj$ 相乘的因子称为态的朗德 g 因子,于是 $\langle M_z\rangle$ 可写为

$$\langle M_z\rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j g(j) = -\frac{e}{2mc}\langle J_z\rangle g(j),$$

这里描述了由自旋引起的磁矩表示式同磁矩与机械矩(即角动量)之间经典的麦克斯韦关系式的差异.

问题 136　精 细 结 构

电子的内禀磁矩

$$\mu = -g\frac{e}{mc} S \tag{136.1}$$

和它的轨道角动量 L 的相互作用是用哈密顿量

$$H' = \frac{g}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}(S\cdot L) \tag{136.2}$$

描述的. 试确定由于这个相互作用引起的能级裂距.

注　电子的所谓 g 因子的值几乎是1. 它的精确值已经测得为

$$g=1.001145.$$

因为在非相对论的处理中不可能得出精细结构的完善理论,所以这里不必过

于严格地去考虑了. 同样, (136.2)分母中的托马斯因子 2 不能由非相对论来解释.

解 有心力场中电子波函数是算符 J_z 和 $\boldsymbol{J}^2$ 的共同本征函数, 它的角向部分在前面的问题中已给出. 于是哈密顿量(136.2)中的算符$(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L})$可简化为用态 $\psi=|j,\ l\rangle$ 的量子数 j 和 l 来表示, 即

$$\boldsymbol{J}^2|j,\ l\rangle=\{\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{S}^2+2(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})\}|j,\ l\rangle$$

或
$$\hbar^2\left\{j(j+1)-\left[l(l+1)+\frac{3}{4}\right]\right\}|j,\ l\rangle-2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L})|j,\ l\rangle.$$

所以(136.2)的哈密顿量只是使 $V(r)$ 增加了能量微扰, 即

$$V(r)=\frac{g\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\left\{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\};\tag{136.3}$$

由于它与量子数 j 和 l 有关, 对同一 l 的不同的 $j=l\pm\frac{1}{2}$ 值它是不同的.

一级微扰计算给出的对能级能量的贡献是

$$E'_{j,l}=\langle j,\ l|V'|j,\ l\rangle.\tag{136.4}$$

运用方程(133.11)和(133.12)的记号以及归一化条件

$$\int_0^\infty dr\,r^2|F_l(r)|^2=1,\tag{136.5}$$

可得

$$E'_{j,l}=\frac{g\hbar^2}{4m^2c^2}\left\{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\}\times\int_0^\infty dr\,r^2|F_l(r)|^2\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}.\tag{136.6}$$

于是, 对于同一 l 但 j 不同的两个能级间的能量裂距正比于差值

$$\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)-\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)=2l+1,$$

故

$$\Delta E=\frac{g\hbar^2}{4m^2c^2}(2l+1)\int_0^\infty dr r^2|F_l(r)|^2\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}. \qquad (136.7)$$

j 值较小的能级是较低的那条(正常双重线).

采用势能

$$V=-\frac{Ze^2}{r};\quad \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}=\frac{Ze^2}{r^3} \qquad (136.8)$$

可以对(136.7)的积分作一估计. 因为这势能表式对所有的原子在核附近都是适合的, 又因为在这区域里 $F_l\propto r^l$, 于是(136.7)中的被积函数成为 $\propto r^{2l-1}$, 所以对于 $l=1, 2, 3, \cdots$, 积分是收敛的, 但对于 S 态($l=0$), 积分对数式地发散. 因为在 S 态只有移位而没有能级分裂, 因此, 对数发散的 ΔE 对光谱数据的计算并不重要. 这一困难在严格的相对论讨论中并不出现(参看 203 题)

不必详细计算(136.7)型的积分, 就可判断积分的结果的数量级是 Ze^2/a^3, 其中 a 是数量级等于原子半径的长度. 因为原子的光谱项能量的数量级是 Ze^2/a, 故可粗略地得到

$$\frac{\Delta E}{E}\propto\frac{\lambda^2}{a^2},$$

其中 $\lambda=\frac{\hbar}{mc}$ 是康普顿波长. 这是一个小的量, 所以只影响精细结构, 并可作上述的一级微扰处理.

问题 137　自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的平面波

试将具有正的或负的螺旋性的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的平面波展开为球谐函数的级数. 取 z 方向为波的传播方向.

解　描述 z 方向平面波的二分量的波旋量为

$$\psi_+=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{ikz};\quad \psi_-=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}e^{ikz}, \qquad (137.1)$$

处于 ψ_+ 态的粒子的自旋方向和传播方向一致，我们称它的螺旋性 $h=+1$，处于 ψ_- 态的粒子有相反的自旋方向，$h=-1$. 如果我们把这些旋量分解为角动量的本征旋量，那么，对于 ψ_+ 有

$$m_j=+\frac{1}{2},$$

对于 ψ_- 有

$$m_j=-\frac{1}{2},$$

在这两种情况下都有 $m_l=0$.

在 133 题中已经证明，对一定的轨道角动量 l，算符 J_z 和 $\boldsymbol{J}^2$ 有二个本征旋量，即

$$u^{I}_{l,m_j}=\frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+\frac{1}{2}+m_j}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\\ -\sqrt{l+\frac{1}{2}-m_j}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix},\quad \text{当 } j=l+\frac{1}{2} \tag{137.2a}$$

和

$$u^{II}_{l,m_j}=\frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+\frac{1}{2}-m_j}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{l+\frac{1}{2}+m_j}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix},\quad \text{当 } j=l-\frac{1}{2}, \tag{137.2b}$$

其中 $F_l(r)$ 满足径向薛定谔方程. 在现在没有外力的情况下，这方程是：

$$F_l''+\frac{2}{r}F_l'+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)F_l=0, \tag{137.3}$$

并且有任意归一化的、在原点是正则的解

$$F_l=\frac{1}{kr}j_l(kr). \tag{137.4}$$

于是平面波将由(137.2a)和(137.2b)的解按如下的方式组成

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}(A_l u^{I}_{l,m_j}+B_l u^{II}_{l,m_j}). \tag{137.5}$$

先研究螺旋性 $h=+1$ $\left(\text{这时 } m_j=+\frac{1}{2}\right)$的情况. 方程(137.5)可写为

$$\psi_+=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2l+1}}j_l(kr)\begin{pmatrix}(A_l\sqrt{l+1}+B_l\sqrt{l})Y_{l,0}\\(-A_l\sqrt{l}+B_l\sqrt{l+1})Y_{l,1}\end{pmatrix}. \tag{137.6}$$

由方程(137.1)知旋量的第二行为零, 即必须令

$$B_l=\sqrt{\frac{l}{l+1}}A_l, \tag{137.7}$$

故

$$\psi_+=\frac{1}{kr}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\sum_{l=0}^{\infty}A_l\sqrt{\frac{2l+1}{l+1}}j_l(kr)Y_{l,0}. \tag{137.8}$$

将这式子与平面波的展开式(参看(81.13)

$$e^{ikz}=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}i^l j_l(kr)Y_{l,0} \tag{137.9}$$

相比较, 得

$$A_l=\sqrt{4\pi(l+1)}\,i^l, \tag{137.10}$$

故

$$\psi_+=\sqrt{4\pi}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(\sqrt{l+1}\,u^l_{l,\frac{1}{2}}+\sqrt{l}\,u^{II}_{l,\frac{1}{2}}) \tag{137.11}$$

是正确的展开式.

现在来研究 $h=-1$ 和 $m_j=-\frac{1}{2}$ 的情况. 方程(137.5)给出

$$\psi_-=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2l+1}}j_l(kr)\begin{pmatrix}(A_l\sqrt{l}+B_l\sqrt{l+1})Y_{l,-1}\\(-A_l\sqrt{l+1}+B_l\sqrt{l})Y_{l,0}\end{pmatrix}. \tag{137.12}$$

按照(137.1), 旋量的第一行应等于零, 即

$$B_l=-\sqrt{\frac{l}{l+1}}A_l. \tag{137.13}$$

与(137.9)比较, 得

$$A_l = -\sqrt{4\pi(l+1)}\, i^l \tag{137.14}$$

故得展开式

$$\psi_- = -\sqrt{4\pi}\sum_{l=0}^{\infty} i^l\left(\sqrt{l+1}\, u^I_{l,-\frac{1}{2}} - \sqrt{l}\, u^{II}_{l,-\frac{1}{2}}\right). \tag{137.15}$$

问题 138　自由电子的自旋共振

将自由电子放在空腔内部，在空腔里面存在两个磁场：即一个在 z 方向的恒定的均匀场 $\mathscr{H}_0$ 和一个在 x, y 平面里转动的场 $\mathscr{H}'$：

$$\left.\begin{aligned} &\mathscr{H}_x = 0, && \mathscr{H}_y = 0, && \mathscr{H}_z = \mathscr{H}_0; \\ &\mathscr{H}'_x = \mathscr{H}' \cos\omega t, && \mathscr{H}'_y = \mathscr{H}' \sin\omega t, && \mathscr{H}'_z = 0. \end{aligned}\right\} \tag{138.1}$$

设在 $t=0$ 时，电子的自旋在 $+z$ 方向，并加上磁场 $\mathscr{H}'$. 试确定电子的自旋由 $+z$ 方向翻转到 $-z$ 方向的几率 P 与时间 t 的关系.

解　这问题的哈密顿量为

$$H = \mu(\sigma_z\mathscr{H}_0 + \sigma_x\mathscr{H}'_x + \sigma_y\mathscr{H}'_y),$$

其中 $\mu = \dfrac{e\hbar}{2mc}$，$-\mu\boldsymbol{\sigma}$ 是电子的内禀磁矩（量子电动力学的改正除外）. 我们写出

$$\sigma_x\mathscr{H}'_x + \sigma_y\mathscr{H}'_y = \frac{1}{2}\mathscr{H}'(\sigma_+ e^{-i\omega t} + \sigma_- e^{i\omega t}),$$

其中 $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$. 这样，薛定谔方程成为

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \mu\left\{\mathscr{H}_0\sigma_z + \frac{1}{2}\mathscr{H}'(e^{-i\omega t}\sigma_+ + e^{i\omega t}\sigma_-)\right\}\psi. \tag{138.2}$$

它的解可用 σ_z 的本征函数表示为

$$\psi(t) = u(t)\alpha + v(t)\beta. \tag{138.3}$$

将(138.3)代入(138.2)，并运用关系式（参看(129.10)）

$$\left.\begin{aligned} &\sigma_z\alpha = \alpha, && \sigma_+\alpha = 0, && \sigma_-\alpha = 2\beta; \\ &\sigma_z\beta = -\beta, && \sigma_+\beta = 2\alpha; && \sigma_-\beta = 0 \end{aligned}\right.$$

我们得到

$$-\frac{\hbar}{i}(\dot{u}\alpha+\dot{v}\beta)=\mu\mathscr{H}_0(u\alpha-v\beta)+\mu\mathscr{H}'(e^{-i\omega t}v\alpha+e^{i\omega t}u\beta)$$

为简便起见，引进

$$\frac{\mu\mathscr{H}_0}{\hbar}=\omega_0;\quad \frac{\mu\mathscr{H}'}{\hbar}=\omega', \tag{138.4}$$

并将上式分为含 α 与含 β 的两部分，我们得到

$$\begin{aligned} i\dot{u}&=\omega_0 u+\omega' e^{-i\omega t}v,\\ i\dot{v}&=-\omega_0 v+\omega' e^{i\omega t}u. \end{aligned} \tag{138.5}$$

令

$$u=Ae^{-i\left(\Omega+\frac{1}{2}\omega\right)t},\quad v=Be^{-i\left(\Omega-\frac{1}{2}\omega\right)t} \tag{138.6}$$

上述方程即可解出. 直接代入计算得到 $\Omega_1=-\Omega$ 和 $\Omega_2=-\Omega$ 两个解，其中

$$\Omega=\sqrt{\left(\omega_0-\frac{1}{2}\omega\right)^2-\omega'^2}, \tag{138.7}$$

并依次以 A_1, B_1 和 A_2, B_2 为振幅，即

$$\psi(t)=(A_1e^{-i\Omega t}+A_2e^{i\Omega t})e^{-\frac{i\omega}{2}t}\alpha+(B_1e^{-i\Omega t}+B_2e^{i\Omega t})e^{\frac{i\omega}{2}t}\beta, \tag{138.8}$$

且

$$B_{1,2}=A_{1,2}\frac{\pm\Omega-\left(\omega_0-\frac{1}{2}\omega\right)}{\omega'}. \tag{138.9}$$

在(138.8)中我们引入初始条件 $\psi(0)=\alpha$, 或

$$A_1+A_2=1;\quad B_1+B_2=0, \tag{138.10}$$

再加上条件(138.9)，最后得到

$$\begin{aligned} \psi(t)=&\left\{\cos\Omega t-\frac{\omega_0-\frac{1}{2}\omega}{\Omega}i\sin\Omega t\right\}e^{-\frac{i\omega}{2}t}\alpha\\ &-\frac{\omega'}{\Omega}i\sin\Omega t e^{\frac{i\omega}{2}t}\beta. \end{aligned} \tag{138.11}$$

所以，在时刻 t 自旋翻转的几率是

$$P=\left(\frac{\omega'}{\Omega}\right)^2\sin^2\Omega t, \tag{138.12}$$

它的时间平均值与时间 t 无关，

$$P=\frac{1}{2}\frac{\omega'^2}{\Omega^2}=\frac{1}{2}\frac{\omega'^2}{\left(\omega_0-\frac{1}{2}\omega\right)^2+\omega'^2}. \tag{138.13}$$

如果均匀场 $\mathscr{H}_0$ 是连续变化的，从而，按照(138.4)，拉莫尔频率 ω_0 也是连续变化的，则当

$$\omega_0=\frac{1}{2}\omega, \quad \text{即} \quad \mathscr{H}_0=\frac{\hbar\omega}{2\mu} \tag{138.14}$$

时，平均翻转几率达到最大值．我们称这时的磁场为共振场，记作 $\mathscr{H}_{\text{共振}}$，且得到

$$\bar{P}=\frac{1}{2}\frac{\mathscr{H}'^2}{(\mathscr{H}_0-\mathscr{H}_{\text{共振}})^2+\mathscr{H}'^2}. \tag{138.15}$$

在共振时，$\bar{P}=\frac{1}{2}$，它和转动场 $\mathscr{H}'$ 的强度无关，然而共振区的宽度决定于 $\mathscr{H}'$．

注　可以用这方法从共振场强确定 μ．或者当 μ 充分已知时，可以用这方法来确定外加场和分子内作用于电子上的场之间的差值．同样，质子共振可用来检测分子结构．

B．两体和三体问题

问题 139　两粒子的自旋函数

试确定自旋 $\frac{1}{2}$ 的两粒子体系(如中子和质子)的自旋本征函数．体系的总自旋矢量算符是

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_n+\boldsymbol{\sigma}_p), \tag{139.1}$$

自旋本征函数使自旋算符的分量 S_z 和绝对值平方 $\boldsymbol{S}^2$ 同时对角化.

解 令 α_n、β_n 和 α_p、β_p 分别为中子和质子的希耳伯基矢. 于是两粒子体系的自旋函数 χ 应取如下形式

$$\chi = A\alpha_n\alpha_p + B\alpha_n\beta_p + C\beta_n\alpha_p + D\beta_n\beta_p. \tag{139.2}$$

由自旋算符的定义(问题 129)得出

$$\frac{2}{\hbar}S_z\chi = (\sigma_{nz}+\sigma_{pz})\chi = A\alpha_n\alpha_p + B\alpha_n\beta_p - C\beta_n\alpha_n - D\beta_n\beta_p$$
$$+ A\alpha_n\alpha_p - B\alpha_n\beta_p + C\beta_n\alpha_p - D\beta_n\beta_p.$$

所以, 方程(139.2)中 χ 的四项里, 每一项都是 S_z 的本征函数, 即:

$$\begin{aligned}
&\alpha_n\alpha_p \quad \text{对应 } \frac{2}{\hbar}S_z \text{ 的本征值 } +2 \quad \text{或 } S_z \text{ 的 } +\hbar;\\
&\alpha_n\beta_p \quad \text{对应 } \frac{2}{\hbar}S_z \text{ 的本征值 } 0 \quad \text{或 } S_z \text{ 的 } 0;\\
&\beta_n\alpha_p \quad \text{对应 } \frac{2}{\hbar}S_z \text{ 的本征值 } 0 \quad \text{或 } S_z \text{ 的 } 0;\\
&\beta_n\beta_p \quad \text{对应 } \frac{2}{\hbar}S_z \text{ 的本征值 } -2 \quad \text{或 } S_z \text{ 的 } -\hbar.
\end{aligned} \tag{139.3}$$

以 $\hbar$ 为单位的自旋分量是 $+1$, 0, -1, 这和半经典矢量模型是一致的. $\alpha_n\beta_p$ 和 $\beta_n\alpha_p$ 两函数仍是简并的, 因此, 它们的任何线性组合仍属于本征值为零的波函数.

现在来研究算符

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{\sigma}_n^2 + \boldsymbol{\sigma}_p^2 + 2(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$$
$$= 6 + 2(\sigma_{nx}\sigma_{px} + \sigma_{ny}\sigma_{py} + \sigma_{nz}\sigma_{pz}).$$

因为

$$\sigma_{nx}\sigma_{px}\chi = A\beta_n\beta_p + B\beta_n\alpha_p + C\alpha_n\beta_p + D\alpha_n\alpha_p;$$

$$\sigma_{ny}\sigma_{py}\chi = -A\beta_n\beta_p + B\beta_n\alpha_p + C\alpha_n\beta_p - D\alpha_n\alpha_p;$$
$$\sigma_{nz}\sigma_{pz}\chi = A\alpha_n\alpha_p - B\alpha_n\beta_p - C\beta_n\alpha_p + D\beta_n\beta_p,$$

从而

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \boldsymbol{S}^2\alpha_n\alpha_p = 8\alpha_n\alpha_p; \tag{139.4a}$$

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \boldsymbol{S}^2(B\alpha_n\beta_p + C\beta_n\alpha_p) = 4(B+C)(\alpha_n\beta_p + \beta_n\alpha_p); \tag{139.4b}$$

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \boldsymbol{S}^2\beta_n\beta_p = 8\beta_n\beta_p. \tag{139.4c}$$

所以函数 $\alpha_n\alpha_p$ 和 $\beta_n\beta_p$ 是算符 $\boldsymbol{S}^2$ 的属于本征值 $2\hbar^2$ 的本征函数. 用通常记号表示

$$\boldsymbol{S}^2\chi = \hbar^2 S(S+1)\chi, \tag{139.5}$$

它们是属于量子数 $S=1$ 的本征函数，或者用矢量模型的半经典语言表达，是属于总自旋 $S=1$(以 $\hbar$ 为单位)以及总自旋分量 S_z 为 $+1$ 或 -1 的本征函数.

由(139.4b)可以建立 $\boldsymbol{S}^2$ 的另外两个属于 $S_z=0$ 的本征函数. 设 λ 是 $\boldsymbol{S}^2/\hbar^2$ 的尚属未知的本征值，则

$$(B+C)(\alpha_n\beta_p + \beta_n\alpha_p) = \lambda(B\alpha_n\beta_p + C\beta_n\alpha_p).$$

由此得 B 和 C 的两个线性方程

$$B+C = \lambda B \quad 和 \quad B+C = \lambda C.$$

它们的行列式必须为零，

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda; & 1 \\ 1; & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad 或 \quad 1-\lambda = \pm 1.$$

所以，当 $S_z=0$ 时，$\boldsymbol{S}^2$ 的两个本征函数为

a) 当 $\lambda=2$; $B=C$; $\chi = \alpha_n\beta_p + \beta_n\alpha_p$; $S=1$; (139.6a)

b) 当 $\lambda=0$; $B=-C$; $\chi = \alpha_n\beta_p - \beta_n\alpha_p$; $S=0$. (139.6b)

现将结果集中列于下表，这些波函数都已按下式归一化，

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=\langle\beta|\beta\rangle=1;\quad \langle\alpha|\beta\rangle=0.$$

三重态，$S=1$ （对称的自旋函数）	$S_z=+1$	$\alpha_n\alpha_p$
	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_n\beta_p+\beta_n\alpha_p)$
	-1	$\beta_n\beta_p$
单态，$S=0$ （反对称的自旋函数）	$S_z=0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_n\beta_p-\beta_n\alpha_p)$

注　从$(\boldsymbol{\sigma}_n+\boldsymbol{\sigma}_p)^2=6+2(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$可以得出三重态和单态自旋函数（如表中所列的三重态 χ_t 和单态 χ_s）也是算符$(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$的本征函数，因此，

$$(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)\chi_t=\chi_t;\quad (\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)\chi_s=-3\chi_s.$$

这些关系式的应用见下题.

问题 140　核子之间与自旋有关的有心力

在合理近似下，处于 S 态的质子和中子间的相互作用能可以用有心力描述，这有心力因自旋态的对称或反对称而不同. 试利用

a) 自旋交换算符 Σ_{np},

b) 这两个粒子的自旋矢量 $\boldsymbol{\sigma}_n$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_p$

将这种相互作用表示为自旋有关的势.

解　有心力的意思就是相互作用势能必须只和两粒子间的距离 r 有关. 这势能将因自旋态的对称性不同而异，假定 $V_t(r)$ 是自旋平行的三重态时的势能，而 $V_s(r)$ 是自旋反平行的单态时的势能.

a) 令 $\chi(s_n, s_p)$ 为两粒子函数. 自旋交换算符定义为

$$\Sigma_{np}\chi(s_n, s_p)=\chi(s_p, s_n). \tag{140.1}$$

对于对称的三重态，$\chi_t(s_n, s_p)=\chi_t(s_p, s_n)$，于是，

$$\Sigma_{np}\chi_t=\chi_t, \tag{140.2a}$$

而对于反对称的单态，

$$\chi_s(s_n, s_p) = -\chi_s(s_p, s_n),$$

于是

$$\Sigma_{np}\chi_s = -\chi_s. \tag{140.2b}$$

所以，这两类函数都是交换算符的本征函数，其本征值依次为 $+1$ 和 -1. 因为三重态的三个函数和单态的一个函数组成一个完全正交集，方程(140.2a, b)就完全和唯一地表示了交换算符。

按照(140.2a, b)，相互作用势能

$$V = V_1(r) + V_2(r)\Sigma_{np}$$

给出

$$V\chi_t = (V_1+V_2)\chi_t; \quad V\chi_s = (V_1-V_2)\chi_s,$$

因此，

$$V_t = V_1+V_2 \quad 和 \quad V_s = V_1-V_2$$

依次为三重态和单态时的相互作用. 所以

$$V = \frac{1}{2}(V_t+V_s) + \frac{1}{2}(V_t-V_s)\Sigma_{np}. \tag{140.3}$$

b) 在前题末，我们已经表明自旋函数 χ_t 和 χ_s 也是算符 $(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$ 的本征函数，即

$$(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)\chi_t = \chi_t; \quad (\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)\chi_s = -3\chi_s \tag{140.4}$$

从而得知，Σ_{np} 可以用 $(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$ 线性地表出. 的确，

$$\Sigma_{np} = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_t) \tag{140.5}$$

能给出(140.2a, b)所要求的本征值. 又，因为不存在两核子体系的其他自旋函数，所以本征值方程(140.2a, b)和(140.4)就完全决定了这两种算符. 所以(140.5)具有最大的普遍性.

将(140.5)所表示的 Σ_{np} 代入(140.3)，我们得到如下结果：

$$V = \frac{1}{4}(3V_t+V_s) + \frac{1}{4}(V_t-V_s)(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p). \tag{140.6}$$

问题 141　自旋算符的幂

试证粒子 1 和粒子 2 的算符 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^n$ 可以用 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$ 线性地表出.

解　三个三重态的和一个单态的自旋函数满足方程

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\chi_t=\chi_t;\quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\chi_s=-3\chi_s, \tag{141.1}$$

由于这些函数组成完全正交集，故这两个方程完全决定了算符 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$. 这样，我们就有条件研究 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^n$ 对这四个自旋函数的作用. 反复使用(141.1)式，立即可得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^n\chi_t=\chi_t;\quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^n\chi_s=(-3)^n\chi_s. \tag{141.2}$$

从而，$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^n$ 能用 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$ 线性地表示为

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^n=A+B(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2). \tag{141.3}$$

将(141.3)代入(141.2)，并利用(141.1)，得

$$(A+B)\chi_t=\chi_t;\quad (A-3B)\chi_s=(-3)^n\chi_s.$$

于是，

$$A+B=1,\quad A-3B=(-3)^n,$$

即

$$A=\frac{1}{4}[3+(-3)^n];\quad B=\frac{1}{4}[1-(-3)^n]. \tag{141.4}$$

这样，我们就得到所求的线性表达式，例如，取 $n=2$, 3 时，

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2);\quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^3=-6+7(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

注　前题中与自旋有关的力的表达式(140.6)是唯一的，因为用 $(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$ 的幂级数来代替线性表示式(140.6)，结果还是一样. 如果考虑用交换算符 Σ_{12} 的幂表示，问题的解还会更简单些.

问题 142　两个自旋粒子的角动量本征函数

试建立两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子体系的算符 J_z 和 $\boldsymbol{J}^2$ 的三重态本征

函数. 取 $\hbar=1$ 为角动量的单位.

解 任何三重态的本征函数必可写为下面的形式

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}\{f_l(r)Y_{l,m-1}\chi_{1,1}+g_l(r)Y_{l,m}\chi_{1,0}+h_l(r)Y_{l,m+1}\chi_{1,-1}\} \tag{142.1}$$

乘以空间因子的三个可能的自旋函数的每一个都可写成球谐函数展开的形式, 对普遍性的唯一限制是选择每一个 Y 的第二个下标使得

$$J_z\psi=m\psi, \tag{142.2}$$

这就使得 ψ 是算符 J_z 的本征函数.

现在把

$$\boldsymbol{J}^2=\left\{\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\right\}^2$$

$$=\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)+\frac{1}{4}[6+2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)]$$

作用于函数(142.1).

为方便起见, 定义

$$\sigma_+=\sigma_x+i\sigma_y \quad 及 \quad \sigma_-=\sigma_x-i\sigma_y, \tag{142.3}$$

这和

$$L_+=L_x+iL_y \quad 及 \quad L_-=L_x-iL_y \tag{142.4}$$

是相类似的(参看问题 56). 这样一来, $\boldsymbol{J}^2$ 可以同等地表示为

$$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{L}^2+\frac{1}{2}(L_+\sigma_-+L_-\sigma_+)+L_z\sigma_z+\frac{3}{2}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2), \tag{142.5}$$

其中

$$\sigma_\pm=\sigma_{1\pm}+\sigma_{2\pm} \quad 而 \quad \sigma_z=\sigma_{1z}+\sigma_{2z}.$$

这些算符作用于三重态自旋函数上给出

$$\sigma_+\begin{pmatrix}\chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\end{pmatrix}=2\sqrt{2}\begin{pmatrix}0\\ \chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\end{pmatrix};$$

$$\sigma_-\begin{pmatrix}\chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\end{pmatrix}=2\sqrt{2}\begin{pmatrix}\chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\\ 0\end{pmatrix}; \tag{142.6}$$

$$\sigma_z\begin{pmatrix}\chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}\chi_{1,1}\\ 0\\ -\chi_{1,-1}\end{pmatrix}.$$

所以，我们用直接计算得到

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2\chi_{1,1}&=(\boldsymbol{L}^2+2+2L_z)\chi_{1,1}+\sqrt{2}\,L_+\chi_{1,0};\\
\boldsymbol{J}^2\chi_{1,0}&=\sqrt{2}\,L_-\chi_{1,1}+(\boldsymbol{L}^2+2)\chi_{1,0}+\sqrt{2}\,L_+\chi_{1,-1};\\
\boldsymbol{J}^2\chi_{1,-1}&=\sqrt{2}\,L_-\chi_{1,0}+(\boldsymbol{L}^2+2-2L_z)\chi_{1,-1}.
\end{aligned}\right\} \tag{142.7}$$

利用(142.7)和熟知的关系(参看(56.14))

$$\left.\begin{aligned}
L_+Y_{l,m}&=-\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\,Y_{l,m+1}\\
L_-Y_{l,m}&=-\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,Y_{l,m-1}\\
L_zY_{l,m}&=mY_{l,m}
\end{aligned}\right\} \tag{142.8}$$

得出

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2\psi=\sum_{l=0}^{\infty}\{&[f_l(l(l+1)+2m)\\
&-g_l\sqrt{2(l+m)(l-m+1)}\,]Y_{l,m-1}\chi_{1,1}\\
&+[-f_l\sqrt{2(l+m)(l-m+1)}+g_l(l(l+1)+2)\\
&-h_l\sqrt{2(l+m+1)(l-m)}\,]Y_{l,m}\chi_{1,0}\\
&+[-g_l\sqrt{2(l+m+1)(l-m)}\\
&+h_l(l(l+1)-2m)]Y_{l,m+1}\chi_{1,-1}\}.
\end{aligned} \tag{142.9}$$

为了使ψ是$\boldsymbol{J}^2$的本征函数，上式必须

$$=j(j+1)\psi,$$

从上式可得出 f_l, g_l, h_l 的三个独立的线性方程，表明这三个径向函数具有相同的形式而有不同的振幅，即

$$f_l=A_lF_l(r);\quad g_l=B_lF_l(r);\quad h_l=C_lF_l(r), \tag{142.10}$$

其中常数振幅因子 A_l、B_l、C_l 可以由下面的线性方程组确定：

$$\begin{aligned}
&[l(l+1)+2m-j(j+1)]A_l-\sqrt{2(l+m)(l-m+1)}B_l=0;\\
&-\sqrt{2(l+m)(l-m+1)}A_l+[l(l+1)+2-j(j+1)]B_l\\
&\quad-\sqrt{2(l+m+1)(l-m)}C_l=0;\\
&-\sqrt{2(l+m+1)(l-m)}B_l+[l(l+1)-2m-j(j+1)]C_l=0.
\end{aligned} \tag{142.11}$$

这些方程的行列式必须等于零；如把它展开，则得到一个与 m 无关的式子：

$$\begin{aligned}
&[l(l+1)-j(j+1)]\{[l(l+1)-j(j+1)]^2\\
&\quad+2[l(l+1)-j(j+1)]-4l(l+1)\}=0.
\end{aligned}$$

由此得出(正的)解：

$$j=l+1;\quad j=l;\quad j=l-1. \tag{142.12}$$

对于上述的每一个 j 值，振幅 A_l、B_l、C_l(除共同的归一化因子外)可由(142.11)确定．任意选取归一化条件

$$A_l^2+B_l^2+C_l^2=1 \tag{142.13}$$

就得到下表所列结果．

j	A_l	B_l	C_l
$l+1$	$-\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m)}{2(l+1)(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(l+1)(2l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m)}{2(l+1)(2l+1)}}$
l	$\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m)}{2l(l+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m)}{2l(l+1)}}$
$l-1$	$\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m)}{2l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m)}{2l(2l+1)}}$

问题 143　张量力算符

自旋 $\frac{1}{2}$ 的两个粒子 1 和 2 之间的所谓张量力是用相互作用能

$$V=W(r)T_{12}$$

来定义的，其中算符

$$T_{12}=\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}-\frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2). \tag{143.1}$$

试求此算符作用于两粒子体系自旋本征函数所得的结果.

解　在自旋交换下算符 T_{12} 是不变量. 所以它不改变自旋函数的对称性. 因为只存在一个反对称自旋函数 $\chi_{0,0}$, 于是它必定是算符 T_{12} 的本征函数. 然而三个对称的自旋函数在算符 T_{12} 的作用下是可以混合起来的. 因为在粒子坐标交换中，即在宇称变换中，T_{12} 也是不变量，故它将使宇称守恒. 这意味着，$T_{12}\chi$ 的表式中只能有偶次的球谐函数. 不能期望有比 $l=2$ 更高的角动量.

下面详细来讨论. 先将单粒子算符 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})$ 作用于单粒子自旋函数:

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=(\sigma_x x+\sigma_y y+\sigma_z z)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(x+iy)\beta+z\alpha\\ (x-iy)\alpha-z\beta\end{pmatrix} \tag{143.2}$$

于是进一步有

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}\alpha_1\alpha_2\\ \alpha_1\beta_2\\ \beta_1\alpha_2\\ \beta_1\beta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}[(x+iy)\beta_1+z\alpha_1][(x+iy)\beta_2+z\alpha_2]\\ [(x+iy)\beta_1+z\alpha_1][(x-iy)\alpha_2-z\beta_2]\\ [(x-iy)\alpha_1-z\beta_1][(x+iy)\beta_2+z\alpha_2]\\ [(x-iy)\alpha_1-z\beta_1][(x-iy)\alpha_2-z\beta_2]\end{pmatrix}$$

令　$(x\pm iy)^2=r^2\sin^2\vartheta e^{\pm 2i\varphi}$;　$x^2+y^2=r^2\sin^2\vartheta$;

$(x\pm iy)z=r^2\sin\vartheta\cos\vartheta e^{\pm i\varphi}$;　$z^2=r^2\cos^2\vartheta$,

由此得出

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}\begin{pmatrix}\alpha_1\alpha_2\\ \alpha_1\beta_2\\ \beta_1\alpha_2\\ \beta_1\beta_2\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos^2\vartheta\alpha_1\alpha_2+\sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)+\sin^2\vartheta e^{2i\varphi}\beta_1\beta_2\\ \sin\vartheta\cos\vartheta e^{-i\varphi}\alpha_1\alpha_2-\cos^2\vartheta\alpha_1\beta_2+\sin^2\vartheta\beta_1\alpha_2-\sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}\beta_1\beta_2\\ \sin\vartheta\cos\vartheta e^{-i\varphi}\alpha_1\alpha_2+\sin^2\vartheta\alpha_1\beta_2-\cos^2\vartheta\beta_1\alpha_2-\sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}\beta_1\beta_2\\ \sin^2\vartheta e^{-2i\varphi}\alpha_1\alpha_2-\sin\vartheta\cos\vartheta e^{-i\varphi}(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)+\cos^2\vartheta\beta_1\beta_2\end{pmatrix}.$$

下面用记号 χ_{s,m_s} 表示，即：对于三重态

$$\alpha_1\alpha_2=\chi_{1,1};\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)=\chi_{1,0};\quad \beta_1\beta_2=\chi_{1,-1},\tag{143.3}$$

而对于单态，

$$\chi_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2).\tag{143.4}$$

于是对于三重态的对称函数，有如下关系：

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}\begin{pmatrix}\chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos^2\vartheta\chi_{1,1}+\sqrt{2}\sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}\chi_{1,0}+\sin^2\vartheta e^{2i\varphi}\chi_{1,-1}\\ \sqrt{2}\sin\vartheta\cos\vartheta e^{-i\varphi}\chi_{1,1}+(\sin^2\vartheta-\cos^2\vartheta)\chi_{1,0}\\ \quad-\sqrt{2}\sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}\chi_{1,-1}\\ \sin^2\vartheta e^{-2i\varphi}\chi_{1,1}-\sqrt{2}\sin\vartheta\cos\vartheta e^{-i\varphi}\chi_{1,0}+\cos^2\vartheta\chi_{1,-1}\end{pmatrix},\tag{143.5}$$

而对反对称的单态有

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}\chi_{0,0}=-\chi_{0,0}.\tag{143.6}$$

T_{12} 的第二项在 140 题中已经讨论过，

$$(\sigma_1\cdot\sigma_2)\begin{pmatrix}\chi_{1,m_s}\\ \chi_{0,0}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\chi_{1,m_s}\\ -3\chi_{0,0}\end{pmatrix} \tag{143.7}$$

将方程(143.6)和(143.7)联合起来,立刻得出

$$T_{12}\chi_{0,0}=0 \tag{143.8}$$

所以,张量算符对自旋单态不会有任何动力学的贡献.

现在讨论三重态. 利用问题67表中所列的归一化的球谐函数,从(143.5)和(143.7)得到

$$\begin{aligned}
T_{12}\chi_{1,1}&=\frac{2}{3}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\left(Y_{2,0}\chi_{1,1}+\sqrt{3}Y_{2,1}\chi_{1,0}+\sqrt{6}Y_{2,2}\chi_{1,-1}\right);\\
T_{12}\chi_{1,0}&=\frac{2}{3}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\left(-\sqrt{3}Y_{2,-1}\chi_{1,1}-2Y_{2,0}\chi_{1,0}\quad\sqrt{3}Y_{2,1}\chi_{1,-1}\right);\\
T_{12}\chi_{1,-1}&=\frac{2}{3}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\left(\sqrt{6}Y_{2,-2}\chi_{1,1}+\sqrt{3}Y_{2,-1}\chi_{1,0}+Y_{2,0}\chi_{1,-1}\right).
\end{aligned} \tag{143.9}$$

这些公式不仅表明了自旋交换对称性和宇称是守恒的,而且也表示出总角动量的 z 分量也是守恒的. 然而,在张量相互作用下的两粒子体系中,轨道角动量和它的 z 分量都不是好量子数.

问题144 具有张量相互作用的氘核

质子和中子间的相互作用由有心力和张量力两部分组成,

$$V=V_c(r)+V_t(r)T_{pn}. \tag{144.1}$$

于是氘核的基态是 S 态和 D 态的混合. 试建立除 S 和 D 的径向因子以外的本征函数;假定核自旋的取向在 z 方向,试导出 S 态和 D 态的两个耦合的微分方程组.

解 由于氘核自旋 $i=1$(以 $\hbar$ 为单位),它的 z 方向的分量也是1,于是对最一般的 S-D 混合有

$$\psi=f(r)Y_{0,0}\chi_{1,1}+g(r)\{Y_{2,0}\chi_{1,1}+\lambda Y_{2,1}\chi_{1,0}+\mu Y_{2,2}\chi_{1,-1}\}, \tag{144.2}$$

并调整常数 λ 和 μ 的值使

$$\boldsymbol{I}^2\psi=2\psi. \tag{144.3}$$

这里 $\boldsymbol{I}$ 是核自旋总角动量算符. 利用(142.7)式, 得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{I}^2\psi=&\{\chi_{1,1}(L^2+2+2L_z)+\chi_{1,0}\sqrt{2}\,L_+\}(fY_{0,0}+gY_{2,0})\\&+\lambda\{\chi_{1,1}\sqrt{2}\,L_-+\chi_{1,0}(L^2+2)+\chi_{1,-1}\sqrt{2}\,L_+\}gY_{2,1}\\&+\mu\{\chi_{1,0}\sqrt{2}\,L_-+\chi_{1,-1}(L^2+2-2L_z)\}gY_{2,2}\end{aligned}$$

进一步得出

$$\begin{aligned}\boldsymbol{I}^2\psi=&\chi_{1,1}[2fY_{0,0}+(8-2\sqrt{3}\lambda)gY_{2,0}]\\&+\chi_{1,0}(-2\sqrt{3}+8\lambda-2\sqrt{2}\,\mu)gY_{2,1}\\&+\chi_{1,-1}(-2\sqrt{2}\lambda+4\mu)gY_{2,2}.\end{aligned}$$

如设

$$\lambda=\sqrt{3},\quad \mu=\sqrt{6}, \tag{144.4}$$

则上面关系式满足(144.3)式. 故角动量本征函数成为

$$\begin{aligned}\psi=&f(r)Y_{0,0}\chi_{1,1}+g(r)\\&\times\{Y_{2,0}\chi_{1,1}+\sqrt{3}\,Y_{2,1}\chi_{1,0}+\sqrt{6}\,Y_{2,2}\chi_{1,-1}\}.\end{aligned} \tag{144.5}$$

上式中花括号里的球谐函数和自旋函数的组合和前题(143.9)式第一行小括号里的式子是一样的. 因此, 上式可写成更加简洁的形式:

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left\{f(r)+\frac{3}{2}\sqrt{5}\,g(r)T_{pn}\right\}\chi_{1,1}. \tag{144.6}$$

现在来将这函数归一化. 由(144.5)立即可得

$$\int_0^\infty dr r^2[f^2+10g^2]=1.$$

合理地取

$$f(r)=\psi_S(r)\cos\omega;\quad g(r)=\frac{1}{\sqrt{10}}\psi_D(r)\sin\omega, \tag{144.7}$$

于是得

$$\int_0^\infty dr r^2\psi_S^2=1;\quad \int_0^\infty dr r^2\psi_D^2=1 \tag{144.8}$$

和

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left\{\psi_S(r)\cos\omega+\frac{3}{2\sqrt{2}}\psi_D(r)\sin\omega T_{pn}\right\}\chi_{1,1}. \tag{144.9}$$

现在来讨论方程. 相对运动的薛定谔方程(取 $\hbar=1$, $m_p=m_n=1$, 约化质量$=\frac{1}{2}$, 参看问题 150)为

$$(-\nabla^2+V_c+V_tT_{pn}-E)\psi=0,$$

(144.9)式必须满足此方程, 即

$$\left\{(-\nabla^2+V_c-E)\cos\omega\psi_S+\left[\frac{3}{2\sqrt{2}}(-\nabla^2+V_c-E)\sin\omega\psi_D\right.\right.$$
$$\left.\left.+V_t\cos\omega\psi_S\right]T_{pn}+\frac{3}{2\sqrt{2}}V_t\sin\omega\psi_DT_{pn}^2\right\}\chi_{1,1}=0. \tag{144.10}$$

当算符 T_{pn}^2 作用于三重态自旋函数 χ_t 时, 它可以用 T_{pn} 线性地表示为

$$T_{pn}^2\chi_t=\left(\frac{8}{9}-\frac{2}{3}T_{pn}\right)\chi_t. \tag{144.11}$$

利用单粒子自旋态的恒等关系

$$S\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\frac{1}{r}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\vartheta; & \sin\vartheta e^{i\varphi}\\ \sin\vartheta e^{-i\varphi}; & -\cos\vartheta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix},$$

(144.11)式是容易证明的. 从这关系式知此算符的平方为 1, 即 $S^2=1$, 所以

$$S_{pn}^2=\left\{\frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{r})\right\}^2=1$$

由139 题末注知: $(\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_n)\chi_t=\chi_t$, 并利用(143.1)式, 得

$$T_{pn}^2=\left(S_{pn}-\frac{1}{3}\right)^2=1-\frac{2}{3}S_{pn}+\frac{1}{9}=\frac{10}{9}-\frac{2}{3}\left(T_{pn}+\frac{1}{3}\right),$$

这和(144.11)完全一致.

方程(144.10)现在可写为

$$\left\{\cos\omega(-\nabla^2+V_c-E)\psi_S+\frac{2\sqrt{2}}{3}\sin\omega V_t\psi_D\right\}\chi_{1,1}$$
$$+\left\{\sin\omega\left[\frac{3}{2\sqrt{2}}(-\nabla^2+V_c-E)-\frac{1}{\sqrt{2}}V_t\right]\psi_D\right.$$
$$\left.+\cos\omega V_t\psi_S\right\}T_{2m}\chi_{1,1}=0. \tag{144.12}$$

第二行里的算符 T_{2m} 当作用于 $\chi_{1,1}$ 时，只给出 $l=2$ 的各项，它们与第一行里的 $l=0$ 的这些项是正交的. 因此，我们可以将(144.12)分解为两个耦合的径向方程，即

$$\cos\omega\left[\psi_S''+\frac{2}{r}\psi_S'+(E-V_c)\psi_S\right]-\sin\omega\frac{2\sqrt{2}}{3}V_t\psi_D=0 \tag{144.13}$$

和

$$\sin\omega\left[\psi_D''+\frac{2}{r}\psi_D'-\frac{6}{r^2}\psi_D+\left(E-V_c+\frac{2}{3}V_t\right)\psi_D\right]$$
$$-\cos\omega\frac{2\sqrt{2}}{3}V_t\psi_S=0. \tag{144.14}$$

这就是所求的微分方程组.

问题 145　氘核的电四极矩和磁偶极矩

氘核的波函数已由前题确定，

a) 试将氘核的电四极矩用两个积分

$$A=\int_0^\infty dr\,r^4\psi_S\psi_D;\qquad B=\int_0^\infty dr\,r^4\psi_D^2 \tag{145.1}$$

表示出来；

b) 试确定磁偶极矩的期待值

解　a) 四极张量(参见 61 题)可定义为

$$Q_{ik}=\frac{1}{4}(3\chi_i\chi_k-r^2\delta_{ik}).$$

在这张量的原来定义中，右边没有 $\frac{1}{4}$ 这个因子. 它在本题出现是

由于质子环绕质心的坐标是 $\frac{1}{2}r$ 的缘故，又由于中子不带电，只有质子提供电四极矩。在 $M_I=I$ 的态中氘核电荷分布是对 z 轴旋转对称的，把张量元对角 φ 求平均，得出关系式

$$Q_{xy}=Q_{yz}=Q_{zx}=0;\quad \bar{Q}_{xx}=\bar{Q}_{yy}=-\frac{1}{2}\bar{Q}_{zz}. \tag{145.2}$$

因此，只需计算算符 Q_{zz} 的期待值，即

$$\begin{aligned}\langle Q_{zz}\rangle&=\sum_{\text{自旋}}\int d\tau\, Q_{zz}|\psi|^2\\&=\frac{1}{4}\sum_{\text{自旋}}\int d\tau r^2(3\cos^2\vartheta-1)|\psi|^2\\&=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\sum_{\text{自旋}}\int d\tau r^2 Y_{2,0}|\psi|^2\end{aligned} \tag{145.3}$$

用前题确定的氘的波函数

$$\begin{aligned}\psi=&\cos\omega\psi_S(r)Y_{0,0}\chi_{1,\tau}+\sin\omega\frac{1}{\sqrt{10}}\psi_D(r)\\&\times\{Y_{2,0}\chi_{11}+\sqrt{3}Y_{2,1}\chi_{1,0}+\sqrt{6}Y_{2,2}\chi_{1,-1}\},\end{aligned} \tag{145.4}$$

对自旋求和，得出

$$\begin{aligned}\langle Q_{zz}\rangle=&\frac{1}{2}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\int_0^\infty dr r^4\oint d\Omega Y_{2,0}\\&\times\left\{\left|\cos\omega\psi_S Y_{0,0}+\sin\omega\frac{\psi_D}{\sqrt{10}}Y_{2,0}\right|^2\right.\\&\left.+\sin^2\omega\frac{\psi_D^2}{10}(3|Y_{2,1}|^2+6|Y_{2,2}|^2)\right\}.\end{aligned}$$

球谐函数的正交性使得含有 ψ_S^2 的项为零。含有乘积 $\psi_S\psi_D$ 的项显然耦合为积分

$$\oint d\Omega Y_{0,0}|Y_{2,0}|^2=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

稍加计算就可得出含 ψ_D^2 的项的三个余下的积分是

$$\left.\begin{aligned}
&\oint d\Omega Y_{2,0}|Y_{2,0}|^2=\frac{2}{7}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\\
&\oint d\Omega Y_{2,0}|Y_{2,1}|^2=\frac{1}{7}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\\
&\oint d\Omega Y_{2,0}|Y_{2,2}|^2=-\frac{2}{7}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}
\end{aligned}\right\} \tag{145.5}$$

把所有这些项集中起来，最后得出简单的公式

$$\langle Q_{zz}\rangle=\frac{1}{5\sqrt{2}}A\cos\omega\sin\omega-\frac{1}{20}B\sin^2\omega, \tag{145.6}$$

如果 D 态混合到 S 态的百分比是小的，那么，参数 ω 是小的，(145.6)中的第二项(负的)所代表的仅是对第一项(正的)的小的修正. 所以，$\langle Q_{zz}\rangle$ 是正的，从而氘核具有在 z 方向拉长的椭球形状. 这是得到实验证实的.

b) 磁偶极算符包含自旋部分 $\mu_p\sigma_{pz}+\mu_n\sigma_{nz}$ 和轨道角动量部分. 后者只由质子提供. 两粒子问题中轨道角动量的分量 L_z 为

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi_p}+\frac{\partial}{\partial\varphi_n}\right),$$

在这两部分中只有第一部分对磁矩有贡献. 然而它们对围绕质心的轨道角动量则有相等的贡献. 所以，磁矩的轨道部分只需考虑 $\frac{1}{2}L_z$ 的作用，即

$$\mu_{\text{轨道}}=\frac{e}{2mc}\frac{1}{2}L_z.$$

于是磁矩 z 分量的期待值为

$$\langle\mu\rangle=\sum_{\text{自旋}}\int d\tau\psi^*(\mu_p\sigma_{pz}+\mu_n\sigma_{nz}+\mu_{\text{轨道}})\psi, \tag{145.7}$$

而 x 和 y 分量的期待值为零.

将算符 σ_{pz} 和 σ_{nz} 作用于三重态自旋函数，得到关系式：

$$\left.\begin{aligned}
&\sigma_{pz}\chi_{1,1}=\chi_{1,1}; && \sigma_{nz}\chi_{1,1}=\chi_{1,1};\\
&\sigma_{pz}\chi_{1,0}=\chi_{0,0}; && \sigma_{nz}\chi_{1,0}=-\chi_{0,0};\\
&\sigma_{pz}\chi_{1,-1}=-\chi_{1,-1}; && \sigma_{nz}\chi_{1,-1}=-\chi_{1,-1}.
\end{aligned}\right\} \qquad (145.8)$$

如果把三重态波函数简写为

$$\psi=u\chi_{1,1}+v\chi_{1,0}+w\chi_{1,-1}$$

就可得到

$$\begin{aligned}\langle\mu\rangle=\sum_{自旋}\int d\tau(u^*\chi_{1,1}+v^*\chi_{1,0}+w^*\chi_{1,-1})\\
\times\{\mu_p(u\chi_{1,1}+v\chi_{0,0}-w\chi_{1,-1})\\
+\mu_n(u\chi_{1,1}-vx_{0,0}-w\chi_{1,-1})\\
+\mu_{轨道}(u\chi_{1,1}+v\chi_{1,0}+w\chi_{1,-1})\}\end{aligned}$$

利用自旋函数的正交归一化性质得

$$\begin{aligned}\langle\mu\rangle=\int d\tau\{u^*(\mu_p+\mu_n+\mu_{轨道})u\\
+v^*\mu_{轨道}v+w^*(-\mu_p-\mu_n+\mu_{轨道})w\}.\end{aligned}$$

由(144.5)式知

$$u=fY_{0,0}+gY_{2,0};\quad v=\sqrt{3}\,gY_{2,1};\quad w=\sqrt{6}\,gY_{2,2},$$

从而

$$L_zu=0;\quad L_zv=\hbar v;\quad L_zw=2\hbar w,$$

故

$$\begin{aligned}\langle\mu\rangle&=\int d\tau\left\{(\mu_p+\mu_n)(u^*u-w^*w)+\frac{e\hbar}{4mc}(v^*v+2w^*w)\right\}\\
&=(\mu_p+\mu_n)\int_0^\infty dr r^2(f^2+g^2-6g^2)\\
&\quad+\frac{e\hbar}{4mc}\int_0^\infty dr r^2(3g^2+2\cdot6g^2).\end{aligned}$$

以核磁子 $e\hbar/(2mc)$ 作为 $\langle\mu\rangle$ 的单位，并以(144.7)的归一化函数 ψ_S 和 ψ_D 代替 f 和 g，最后得到

$$\langle\mu\rangle=(\mu_p+\mu_n)-\frac{3}{2}\sin^2\omega\left(\mu_p+\mu_n-\frac{1}{2}\right). \qquad (145.9)$$

所以，D 态的混合在磁矩中仅引起二级修正.

问题 146　三粒子的自旋函数

试建立三粒子 $\left(\text{自旋}\ \frac{1}{2}\right)$ 体系的 S_z 和 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征函数.

解　体系的总自旋矢量算符是

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2+\boldsymbol{\sigma}_3). \tag{146.1}$$

显然,它的 z 分量有下列本征函数

$$\begin{aligned}
&\chi\left(\frac{3}{2}\right)=\alpha_1\alpha_2\alpha_3;\\
&\chi\left(\frac{1}{2}\right)=A\alpha_1\alpha_2\beta_3+B\alpha_1\beta_2\alpha_3+C\beta_1\alpha_2\alpha_3;\\
&\chi\left(-\frac{1}{2}\right)=A'\beta_1\beta_2\alpha_3+B'\beta_1\alpha_2\beta_3+C'\alpha_1\beta_2\beta_3;\\
&\chi\left(-\frac{3}{2}\right)=\beta_1\beta_2\beta_3.
\end{aligned} \tag{146.2}$$

χ 的自变数表示以 $\hbar$ 为单位的 S_z 的本征值. 两个函数 $\chi\left(\frac{1}{2}\right)$ 和 $\chi\left(-\frac{1}{2}\right)$ 中的每一个都包含了三个仍然简并的函数. 如果对算符

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}^2&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2(\boldsymbol{\sigma}_1^2+\boldsymbol{\sigma}_2^2+\boldsymbol{\sigma}_3^2)\\
&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\{9+2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)+2(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_3)+2(\boldsymbol{\sigma}_3\cdot\boldsymbol{\sigma}_1)\}.
\end{aligned} \tag{146.3}$$

作进一步研究,则这个简并可以消除. 在 140 题中已经证明

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\alpha_1\alpha_2=\alpha_1\alpha_2; \quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\alpha_1\beta_2=2\beta_1\alpha_2-\alpha_1\beta_2;\\
&(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\beta_1\alpha_2=2\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2; \quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\beta_1\beta_2=\beta_1\beta_2;
\end{aligned}$$

或者还要简单,用算符

$$\Sigma_{12}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{146.4}$$

使两个粒子 1 和 2 的自旋函数交换,即

$$\Sigma_{12}\chi(1,2)=\chi(2,1), \tag{146.5a}$$

详细写出：

$$\Sigma_{12}\alpha_1\alpha_2=\alpha_1\alpha_2;\quad \Sigma_{12}\alpha_1\beta_2=\beta_1\alpha_2;\ 等 \tag{146.5b}$$

因此，算符 (146.4) 称为粒子 1 和 2 的自旋交换算符.

现在我们用这种交换算符来表示(146.3)式：

$$\boldsymbol{S}^2=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\{3+4(\Sigma_{12}+\Sigma_{23}+\Sigma_{31})\}. \tag{146.6}$$

将这算符作用于四个自旋函数(146.2)的第一个和最后一个上，得出

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2\chi\left(\frac{3}{2}\right)&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\cdot 15\chi\left(\frac{3}{2}\right);\\ \boldsymbol{S}^2\chi\left(-\frac{3}{2}\right)&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\cdot 15\chi\left(-\frac{3}{2}\right).\end{aligned} \tag{146.7}$$

因此，这两个函数已是本征值为

$$S(S+1)=\frac{15}{4}\quad\left(或\ S=\frac{3}{2}\right)$$

对应于 S_z 的两个不同本征值 $\left(\pm\frac{3}{2}\right)$ 的 $\boldsymbol{S}^2$ 的非简并的本征函数. 在矢量模型中，它们对应于所有三个自旋的取向都平行于 z 方向或 $-z$ 方向的状态.

处理简并函数 $\chi\left(\frac{1}{2}\right)$ 和 $\chi\left(-\frac{1}{2}\right)$ 就不是这样简单了. 将(146.6)算符作用于 $\chi\left(\frac{1}{2}\right)$，得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2\chi\left(\frac{1}{2}\right)=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\Big\{&3\chi\left(\frac{1}{2}\right)+4[A\alpha_1\alpha_2\beta_3+B\beta_1\alpha_2\alpha_3+C\alpha_1\beta_2\alpha_3]\\&+4[A\alpha_1\beta_2\alpha_3+B\alpha_1\alpha_2\beta_3+C\beta_1\alpha_2\alpha_3]\\&+4[A\beta_1\alpha_2\alpha_3+B\alpha_1\beta_2\alpha_3+C\alpha_1\alpha_2\beta_3]\Big\}\\=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\{&(7A+4B+4C)\alpha_1\alpha_2\beta_3\\&+(4A+7B+4C)\alpha_1\beta_2\alpha_3+(4A+4B+7C)\beta_1\alpha_2\alpha_3\}.\end{aligned}$$

另一方面，要使 $\chi\left(\frac{1}{2}\right)$ 是 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征函数，则上式必须

$$=\hbar^2 S(S+1)\{A\alpha_1\alpha_2\beta_3+B\alpha_1\beta_2\alpha_3+C\beta_1\alpha_2\alpha_3\}$$

于是，得到对于 A、B、C 的一组线性齐次方程：

$$\begin{aligned}
7A+4B+4C&=4S(S+1)A;\\
4A+7B+4C&=4S(S+1)B;\\
4A+4B+7C&=4S(S+1)C.
\end{aligned}\tag{146.8}$$

这方程组的行列式必须等于零．由此得到本征值 $S(S+1)$ 的三次方程，它的可能的解是

$$S(S+1)=\frac{15}{4},\ \frac{3}{4},\ \frac{3}{4},\quad \text{即}\quad S=\frac{3}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}.\tag{146.9}$$

将 $\boldsymbol{S}^2$ 作用于 $\chi\left(-\frac{1}{2}\right)$，只要在上面计算中把符号 α 和 β 全部都交换一下，就可得出相同的结果．

(146.9) 中的第一个本征值明确地给出方程组 (146.8) 的解 $A=B=C$．采用自旋函数更完全的记号 $\chi(S,\ S_z)$，就得到四个完全对称的函数的四重态，即

$$\begin{aligned}
&\chi\left(\frac{3}{2},\ \frac{3}{2}\right)=\alpha_1\alpha_2\alpha_3;\\
&\chi\left(\frac{3}{2},\ \frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\alpha_2\beta_3+\alpha_1\beta_2\alpha_3+\beta_1\alpha_2\alpha_3);\\
&\chi\left(\frac{3}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}(\beta_1\beta_2\alpha_3+\beta_1\alpha_2\beta_3+\alpha_1\beta_2\beta_3);\\
&\chi\left(\frac{3}{2},\ -\frac{3}{2}\right)=\beta_1\beta_2\beta_3.
\end{aligned}\tag{146.10}$$

这个解相当于矢量模型中自旋 $\frac{3}{2}$ 的四个取向．除这个解以外，将二重解 $S=\frac{1}{2}$ 代入 (146.8)，从三个式子都得出相同的关系

$$A+B+C=0$$

于是 $C=-(A+B)$，但不能单独得出 A 和 B，(146.2) 中间的两

式可写为

$$\chi\left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right)=A\alpha_1\alpha_2\beta_3+B\alpha_1\beta_2\alpha_3-(A+B)\beta_1\alpha_2\alpha_3;$$

$$\chi\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=A'\beta_1\beta_2\alpha_3+B'\beta_1\alpha_2\beta_3-(A'+B')\alpha_1\beta_2\beta_3. \tag{146.11}$$

在这些公式中，两个$S=\frac{1}{2}$的双重态仍然混合在一起，仍旧都是简并的.

要使双重态分解和归一化，通常作下面两个假设：

$$A=B=\frac{1}{\sqrt{6}}\quad 和\quad A=-B=\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{146.12}$$

应用第一个假设，双重态成为

$$\chi_1\left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{6}}\{\alpha_1(\alpha_2\beta_3+\beta_2\alpha_3)-2\beta_1\cdot\alpha_2\alpha_3\};$$

$$\chi_1\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{6}}\{\beta_1(\beta_2\alpha_3+\alpha_2\beta_2)-2\alpha_1\cdot\beta_2\beta_3\}; \tag{146.13}$$

这二重态对交换粒子2和3是对称的(符号表示：$1,\ \overline{23}$)．另一个双重态成为

$$\chi_2\left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha_1(\alpha_2\beta_3-\beta_2\alpha_3);$$

$$\chi_2\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\beta_1(\beta_2\alpha_3-\alpha_2\beta_3); \tag{146.14}$$

对2和3的交换是反对称的(符号：$1,\ \widehat{23}$).

当然，选择2和3作为体现简单对称性的粒子完全是任意的．如果对A和B作另一种选择，例如$B=-\frac{1}{2}A$，那就会得到$\overline{12},\ 3$对称的函数．这个留下的简并度只有在专门问题中对解加上进一步的条件才能消除.

问题 147　中子为氢分子所散射

设前题中的粒子 1 和 2 是氢分子中的两个质子，3 是慢中子，它的德布罗意波长与核距离相比是很大的．已知有心力的 n–p 相互作用(参看 140 题)是

$$V=\frac{1}{4}(3V_t+V_s)+\frac{1}{4}(V_t-V_s)(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p) \qquad (147.1)$$

试分别确定中子对仲氢和正氢的散射截面．为了计算截面，通过某些粗略的假设把散射长度和势能联系起来，就是假设散射长度正比于势阱深度．

解　中子的运动将受它和质子的相互作用的约束．如果中子的波长是大的，两个质子实际上是在同一位置上，这就只需用一个相对坐标矢量 $\boldsymbol{r}$ 来描述．我们用下标 n(替代 3)表示中子，于是按照(147.1)，中子与氢分子的相互作用可写作

$$V=\frac{1}{2}(3V_t+V_s)+\frac{1}{4}(V_t-V_s)(\boldsymbol{\sigma}_n,\ \boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2), \qquad (147.2)$$

其中 V_t 和 V_s 是 r 的函数．

现在，正氢和仲氢依次用对称的和反对称的自旋函数来定义，按照前题的结果，我们的三体问题具有下面八个自旋函数：

$$\left.\begin{aligned}
&\chi\left(\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right)=\alpha_1\alpha_2\alpha_n\\
&\chi\left(\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\alpha_2\beta_n+\alpha_1\beta_2\alpha_n+\beta_1\alpha_2\alpha_n)\\
&\chi\left(\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}(\beta_1\beta_2\alpha_n+\beta_1\alpha_2\beta_n+\alpha_1\beta_2\beta_n)\\
&\chi\left(\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right)=\beta_1\beta_2\beta_n
\end{aligned}\right\}\begin{aligned}&\text{四重态，}\\&\text{自旋 }\frac{3}{2},\\&o\text{-}H_2\text{(正氢)，}\\&\overline{12},n\end{aligned} \qquad (147.3)$$

$$\left.\begin{aligned}\chi_o\left(\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right)&=\frac{1}{\sqrt{6}}[(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)\alpha_n-2\alpha_1\alpha_2\beta_n]\\ \chi_o\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)&=\frac{1}{\sqrt{6}}[(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)\beta_n-2\beta_1\beta_2\alpha_n]\end{aligned}\right\}\begin{array}{l}\text{双重态,}\\ \text{自旋}\ \frac{1}{2},\\ o\text{-}H_2\text{(正氢)},\\ \overbrace{12},n\end{array}$$

(147.4)

$$\left.\begin{aligned}\chi_p\left(\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right)&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)\alpha_n\\ \chi_p\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)\beta_n\end{aligned}\right\}\begin{array}{l}\text{双重态,自旋}\ \frac{1}{2},\\ p\text{-}H_2\text{(仲氢)},\ \overbrace{12},n\end{array}$$

(147.5)

这八个函数是算符

$$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2+\boldsymbol{\sigma}_n)^2$$

的本征函数，四重态时本征值为 15，双重态时，本征值为 3. 因为

$$\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{\sigma}_1^2+\boldsymbol{\sigma}_2^2+\boldsymbol{\sigma}_n^2+2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)+2(\boldsymbol{\sigma}_n,\ \boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2) \quad (147.6)$$

的前三项都等于 3，而第四项

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\begin{cases}+1,\ \text{对于正氢}\\ -3,\ \text{对于仲氢}\end{cases} \quad (147.7)$$

于是得到

$$\left.\begin{aligned}15&=9+2+2(\boldsymbol{\sigma}_n,\ \boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\\ 3&=9+2+2(\boldsymbol{\sigma}_n,\ \boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\end{aligned}\right\}\text{对于正氢}\begin{cases}\text{四重态}\\ \text{双重态}\end{cases}$$

和

$$3=9-6+2(\boldsymbol{\sigma}_n,\ \boldsymbol{\sigma}_1-\boldsymbol{\sigma}_2)\quad\text{对于仲氢双重态}$$

即

$$(\boldsymbol{\sigma}_n,\ \boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)=\begin{cases}2 & \text{对于正氢四重态}\\ -4 & \text{对于正氢双重态}\\ 0 & \text{对于仲氢双重态.}\end{cases} \quad (147.8)$$

将这值代入(147.2)，得到下面的中子和氢分子之间三种不同的相互作用：

$$V=\frac{1}{2}(3V_t+V_s)+\begin{Bmatrix}\frac{1}{2}(V_t-V_s)\\ -(V_t-V_s)\\ 0\end{Bmatrix}=\begin{cases}2V_t & \text{对于四重态，}o\text{-}H_2\\ \frac{1}{2}V_t+\frac{3}{2}V_s & \text{对于双重态，}o\text{-}H_2\\ \frac{3}{2}V_t-\frac{1}{2}V_s & \text{对于双重态，}p\text{-}H_2\end{cases}\tag{147.9}$$

现在转到散射问题，这里只讨论零能量的极限情况下的散射．在这情况下，当势阱"小"时，散射长度 a 和势阱深度常数是线性相关的．但要注意，对于真实的中子-质子相互作用来说，这是相当粗略的假设．作了这样的假设，就能得到弹性散射截面如下：

$$\sigma_{正}=4\pi\left\{\frac{2}{3}(2a_t)^2+\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}a_t+\frac{3}{2}a_s\right)^2\right\};$$

$$\sigma_{仲}=4\pi\left(\frac{3}{2}a_t+\frac{1}{2}a_s\right)^2,$$

即：

$$\begin{aligned}\sigma_{正}&=\pi\{(3a_t+a_s)^2+2(a_t-a_s)^2\};\\ \sigma_{仲}&=\pi(3a_t+a_s)^2.\end{aligned}\tag{147.10}$$

注　两核子问题的散射长度 a_t 和 a_s 的最佳值是① $a_t=+5.39$ 费密和 $a_s=-23.7$ 费密．将这些值代入方程(147.10)，得到 $\sigma_{正}=55$ 靶和 $\sigma_{仲}=1.77$ 靶．这个有些粗糙的结果的特点是仲氢截面值小得令人惊异．用热中子所做的实验完全证实了这个结果．当 $a_s=-3a_t$ 时，仲氢截面会完全等于零．仲氢截面值这样小，说明 a_s 必须有大的值，而且和 a_t 有相反的符号．三重态的散射长度必须是正的，因为 ^3S 束缚态(即氘核)是允许存在的．从而 $a_s<0$，故 ^1S 束缚态不存在．应注意的是，这正负符号只有用精细设计的干涉实验才能确定，不是中子和产生不相干波的孤立质子的散射所能确定的．

这个结果只适用于零能量的极限情况，而在实验里中子仍有百分之几电子伏特的能量．因此，它们的波长与两个质子间的分子距离比较起来并不是很大的．这就在分子里引起正氢的 $J=1$ 和仲氢的 $J=0$ 两个转动状态之间的具有宇称变化的非弹性的跃迁．发生这种跃迁是因为 $r_{n1}\neq r_{n2}$，因这时相

① 1 费密$=10^{-13}$ 厘米，1 靶$=10^{-24}$ 厘米^2

互作用与 r_{n1} 和 r_{n2} 有关. 如采用缩写 $\frac{1}{4}(V_t - V_s) = U(r)$, 则相互作用中与自旋有关的部分可表示如下:

$$\begin{aligned} & U(r_{n1})(\sigma_n \cdot \sigma_1) + U(r_{n2})(\sigma_n \cdot \sigma_2) \\ &= \frac{1}{2}[U(r_{n1}) + U(r_{n2})](\sigma_n,\ \sigma_1 + \sigma_2) \\ &\quad + \frac{1}{2}[U(r_{n1}) - U(r_{n2})](\sigma_n,\ \sigma_1 - \sigma_2). \end{aligned}$$

由于有最后一项, (147.3)到(147.5)的诸函数不再是势能的本征函数; 正是这最后一项引起正-仲跃迁.

IV. 多 体 问 题

A. 少 数 粒 子

问题 148 在圆上的两个相斥的粒子

限定在圆上运动的两个粒子具有下面的相斥作用

$$V(\varphi_1,\ \varphi_2)=V_0\cos(\varphi_1-\varphi_2), \tag{148.1}$$

例如，可用它模拟处于氦的基态中的两个电子间的库仑斥力. 试导出角动量守恒关系式，并讨论粒子的相对运动.

解 薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{\partial^2U}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2U}{\partial\varphi_2^2}\right)+V_0\cos(\varphi_1-\varphi_2)U=E\cdot U \tag{148.2}$$

可分解因式，只要引入相对运动和绝对运动的变量

$$\alpha=\varphi_1-\varphi_2;\quad \beta=\frac{1}{2}(\varphi_1+\varphi_2), \tag{148.3}$$

于是，
$$\frac{\partial}{\partial\varphi_1}=\frac{\partial}{\partial\alpha}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\beta},\quad \frac{\partial}{\partial\varphi_2}=-\frac{\partial}{\partial\alpha}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}.$$

将上式代入(148.2)，得

$$-\frac{\hbar^2}{mr^2}\left(\frac{\partial^2U}{\partial\alpha^2}+\frac{1}{4}\frac{\partial^2U}{\partial\beta^2}\right)+V_0\cos\alpha\cdot U=E\cdot U,$$

用分离变量法解方程，令

$$U(\alpha,\ \beta)=u(\alpha)v(\beta) \tag{148.4}$$

则得分离变量后的运动方程

$$-\frac{\hbar^2}{mr^2}\frac{d^2u}{d\alpha^2}+V_0\cos\alpha\cdot u=E_\alpha\cdot u \tag{148.5}$$

和

$$-\frac{\hbar^2}{4mr^2}\frac{d^2v}{d\beta^2}=E_\beta\cdot v, \tag{148.6}$$

且有

$$E_\alpha + E_\beta = E. \tag{148.7}$$

绝对运动由(148.6)确定. 两粒子系统的总轨道角动量算符是

$$L = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi_1} + \frac{\partial}{\partial\varphi_2}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\beta},$$

因此(148.6)也可写为

$$\frac{1}{2\Theta}L^2 v = E_\beta \cdot v, \tag{148.6'}$$

其中$\Theta = 2mr^2$是两个粒子的总转动惯量. 所以, 方程(148.6')是转动能量算符的本征值问题. 因(148.6)的解是

$$v = e^{iM\beta}; \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{148.8}$$

故转动能量的本征值为

$$E_\beta = \frac{(\hbar M)^2}{2\Theta}. \tag{148.9}$$

讨论相对运动要困难得多了. 它是由马提厄(Mathieu)型的微分方程(148.5)确定的. 为了便于讨论, 将(148.5)化为标准形式, 令

$$\alpha = 2\varphi; \quad 4\frac{mr^2}{\hbar^2}E_\alpha = \lambda; \quad 4\frac{mr^2}{\hbar^2}V_0 = 2q, \tag{148.10}$$

因此有

$$\frac{d^2v}{d\varphi^2} + (\lambda - 2q\cos 2\varphi)v = 0. \tag{148.11}$$

现在我们来找周期解①, 变数α的周期是2π, 即变数φ的周期是π. 在(148.11)中v的系数是φ的偶函数, 方程有偶的和奇的两个对称型的解. 因是周期函数, 可用傅里叶展开为

① 这和晶格理论中周期势的解有根本的不同, 在那里解不是周期的, 而是在每一个晶格势的周期里要乘上一个相因子, 参看28、29题. 所以, 在这里我们得到分立的λ值, 而在晶格问题中得到带结构.

$$v_{偶}=A_0+A_2\cos 2\varphi+A_4\cos 4\varphi+\cdots,$$
$$v_{奇}=B_2\sin 2\varphi+B_4\sin 4\varphi+\cdots.$$

通常①用 a_0, a_2, a_4, … 和 b_2, b_4, … 依次代表偶的和奇的解的本征值 λ. 在马提厄方程理论中已表明，这些本征值可排成下面顺序

$$a_0<b_2<a_2<b_4<a_4\cdots \tag{148.12}$$

图 61 给出这些本征值作为 q 的函数. 由于有关系(148.12)的限制，这些曲线不相交. 在 $q=0$ 时，有

$$\begin{aligned} &a_0(0)=0;\\ &b_2(0)=a_2(0)=2^2;\\ &b_4(0)=a_4(0)=4^2 \text{ 等;} \end{aligned} \tag{148.13}$$

当 q 值很大时，适合渐近定律

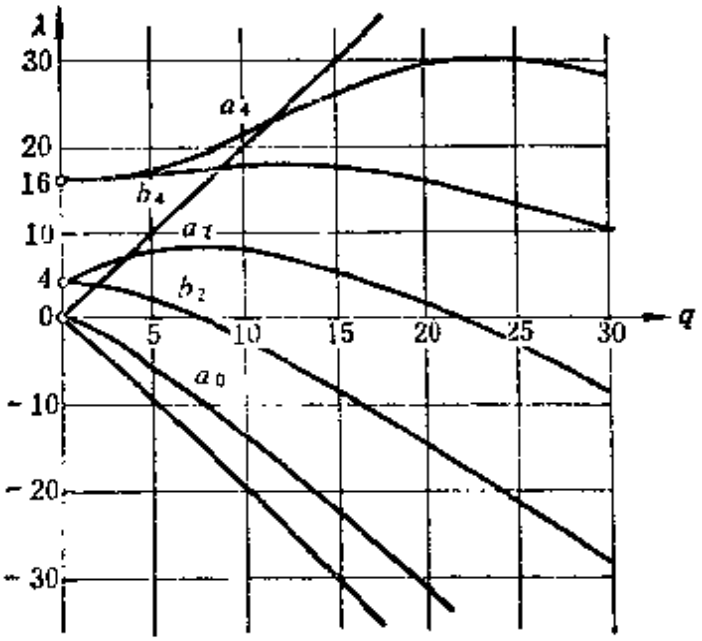


图 61　不同势阱深度(q)的本征值(λ)，两者都是方程(148.10)所定义的无量纲的数，两条直线标记势能的最大和最小值

① 我们尽可能地采用下面手册中的记号：Abramowitz, M., Stegun, I. A., Handbook of Mathematical Functions, Chap. 20. New York: Dover Publ., 1965. 在制作图 61 的曲线时，部分地采用了这手册的资料.

$$\left.\begin{aligned} a_{2r}(q) &\to -2q+2(2r+1)\sqrt{q}-\frac{1}{4}[(r+1)^2+r^2]; \\ b_{2r}(q) &\to -2q+2(2r-1)\sqrt{q}-\frac{1}{4}[(r-1)^2-r^2]. \end{aligned}\right\} \tag{148.14}$$

关系式(148.13)和(148.14)从基本理论考虑就能大体理解.

当 $q=0$, 则方程(148.11)简化为

$$\frac{d^2v}{d\varphi^2}+\lambda v=0$$

具有周期解

$$v_{偶}=A_{2r}\cos 2r\varphi; \quad v_{奇}=B_{2r}\sin 2r\varphi$$

它们是属于本征值 $\lambda=(2r)^2$ 的本征函数. 这结果和(148.13)式准确地对应.

另一方面, 如果 q 变得很大, 则在 $\alpha=\pi$ 周围势阱很深, 这时, 两个粒子几乎被固定在圆直径的两端. 为方便起见, 将变数 φ 改换为

$$\eta=\frac{1}{2}(\varphi_1-\varphi_2-\pi)=\varphi-\frac{\pi}{2} \tag{148.15}$$

从 $\cos 2r\varphi=(-1)^r\cos 2r\eta; \quad \sin 2r\varphi=(-1)^r\sin 2r\eta$

可知函数 $v_{偶}$ 和 $v_{奇}$ 对于变数 η 也依次是偶的和奇的. 如果势阱很深, 则可写出

$$\cos 2\varphi=-\cos 2\eta\simeq -1+2\eta^2,$$

从而由(148.11)近似地得到谐振子的微分方程

$$\frac{d^2v}{d\eta^2}+[(\lambda+2q)-4q\eta^2]v=0. \tag{148.16}$$

它的众所周知的本征值(参看 30 题)是

$$\lambda_n+2q=2\sqrt{q}\,(2n+1), \quad n=0, 1, 2, \cdots \tag{148.17}$$

当 n 为偶或奇时, 以 η 为变数的相应的本征函数也是偶或奇的. 如果对于小 q 值和大 q 值按照下表所列数字

$$n=0\ \ 1\ \ 2\ \ 3\ \ 4\ \ 5\ \ 6\cdots$$

$$\text{偶}(a_{2r})\ \ r=0\quad\ 1\quad\ 2\quad\ 3\cdots$$

$$\text{奇}(b_{2r})\ \ r=\quad 1\quad\ 2\quad\ 3\quad\ \cdots$$

验证所得本征值解，则可知(148.17)式几乎和(148.14)相同. 如果在 $\cos 2\eta$ 的展开式中多取一项，则(148.14)中多出来的常数也可得到证实. 于是用谐振子函数进行一级微扰的计算，就可得出代替(148.17)的结果：

$$\lambda_n+2q=2\sqrt{q}\,(2n+1)-\frac{4}{3}\,q\langle n|\eta^4|n\rangle, \qquad (148.18)$$

这里增加的这一项就使得(148.18)和(148.14)完全一致.

注1　图61中画有两条对角线，下面这条标明势底的深度$(-2q)$，上面这条标明势顶的高度$(+2q)$. 当然，本征值必定总是位于底线之上. 如果本征值位于顶对角线之下，则它们描述的是势阱内的振动状态. 例如，在$q=10$时，在势阱内有四个这种振动状态，第五个(a_4)本征值导致包括两粒子的重合在内的、环绕整个圆的振动. 前四个状态可称为非谐和振子态，从第五个状态往上去，愈来愈趋向于独立粒子的不受力的运动状态.

注2　两粒子的相对运动是在势能$(V_0\cos\alpha)$的作用下发生的，这势能和摆的势能具有相同的形式. 在经典力学中，这不会导致比椭圆积分更复杂的函数，而在量子力学中则要用马提厄函数. 这再次说明，正如第40题一样，在量子力学中用到的数学要比经典力学复杂得多.

问题149　三原子的线型分子

二氧化碳分子在平衡时具有线型结构O—C—O形式. 结构式中的两个氧，不论是相同的还是不同的同位素，都假设a是O—O的平衡距离，f是价振动的力常数. 试利用忽略弯曲振动的一维模型，在谐振动近似下确定两个价振动的频率.

解　设x_1，x_2，x_3是三个原子沿x轴的位置，m_1，m_2，m_3依次是它们的质量，则线性谐振动模型的薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{m_i}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i^2}+\frac{1}{2}f[(x_2-x_1-a)^2+(x_3-x_2-a)^2]\Psi$$
$$=E\Psi \tag{149.1}$$

为了把解分离为质心运动和内部运动，采用变数

$$u=x_2-x_1-a,$$
$$v=x_3-x_2-a, \tag{149.2}$$

$X=\frac{1}{M}(m_1x_1+m_2x_2+m_3x_3)$，其中 $M=m_1+m_2+m_3$，

从而得

$$\frac{\partial}{\partial x_1}=\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X}-\frac{\partial}{\partial u};$$
$$\frac{\partial}{\partial x_2}=\frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial u}-\frac{\partial}{\partial v};$$
$$\frac{\partial}{\partial x_3}=\frac{m_3}{M}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial v},$$

再重复这些运算，可得

$$\frac{1}{m_i}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}=\frac{1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\frac{\partial^2}{\partial u^2}$$
$$+\left(\frac{1}{m_2}+\frac{1}{m_3}\right)\frac{\partial^2}{\partial v^2}-\frac{2}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial u\partial v},$$

可见质心运动可以分离开来．改变(149.1)中 E 的定义，使它只代表内部运动的能量．这样就能用两个变数 u 和 v 来表示薛定谔方程：

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\frac{\partial^2}{\partial u^2}+\left(\frac{1}{m_2}+\frac{1}{m_3}\right)\frac{\partial^2}{\partial v^2}-\frac{2}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial u\partial v}\right]\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}f(u^2+v^2)-E\right\}\Psi=0, \tag{149.3}$$

动能中的交叉项 $\partial^2/\partial u\partial v$ 使得分离变量成为不可能．然而在引入转动变换

$$u'=u\cos\alpha+v\sin\alpha,$$
$$v'=-u\sin\alpha+v\cos\alpha, \tag{149.4}$$

并适当选取 α 后，可以使含有 $\partial^2/\partial u'\partial v'$ 的项为零，而在这个变换下势能保持不变：

$$u^2+v^2=u'^2+v'^2.$$

于是，薛定谔方程成为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\left(\cos^2\alpha\frac{\partial^2}{\partial u'^2}\right.\right.\right.$$
$$+2\cos\alpha\sin\alpha\frac{\partial^2}{\partial u'\partial v'}+\sin^2\alpha\frac{\partial^2}{\partial v'^2}\Big)$$
$$+\left(\frac{1}{m_2}+\frac{1}{m_3}\right)\left(\sin^2\alpha\frac{\partial^2}{\partial u'^2}\right.$$
$$+2\sin\alpha\cos\alpha\frac{\partial^2}{\partial u'\partial v'}+\cos^2\alpha\frac{\partial^2}{\partial v'^2}\Big)$$
$$-\frac{2}{m_2}\left(\cos\alpha\sin\alpha\frac{\partial^2}{\partial u'^2}\right.$$
$$\left.\left.+(\cos^2\alpha-\sin^2\alpha)\frac{\partial^2}{\partial u'\partial v'}-\cos\alpha\sin\alpha\frac{\partial^2}{\partial v'^2}\right)\right]$$
$$+\frac{1}{2}f(u'^2+v'^2)-E\Big\}\Psi=0. \tag{149.5}$$

当

$$\left(\frac{1}{m_3}-\frac{1}{m_1}\right)\sin 2\alpha=\frac{2}{m_2}\cos 2\alpha$$

或

$$\tan 2\alpha=\frac{2m_1m_3}{m_2(m_1-m_3)} \tag{149.6}$$

时，(149.5)中含混合导数的项将等于零．引进由下式定义的质量常数 A 和 B，即

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{A}&=\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\cos^2\alpha-\frac{2}{m_2}\cos\alpha\sin\alpha+\left(\frac{1}{m_2}+\frac{1}{m_3}\right)\sin^2\alpha\\ \frac{1}{B}&=\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\sin^2\alpha+\frac{2}{m_2}\cos\alpha\sin\alpha+\left(\frac{1}{m_2}+\frac{1}{m_3}\right)\cos^2\alpha\end{aligned}\right\} \tag{149.7}$$

和

薛定谔方程即可大为简化：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2A}\frac{\partial^2}{\partial u'^2}+\frac{1}{2}fu'^2\right]\Psi+\left[-\frac{\hbar^2}{2B}\frac{\partial^2}{\partial v'^2}+\frac{1}{2}fv'^2\right]\Psi=E\Psi. \tag{149.8}$$

现在解可分离为

$$\Psi(u',\ v')=\psi(u')\varphi(v'),\quad E=E_A+E_B, \tag{149.9}$$

方程分解为

$$\left.\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2A}\frac{d^2\psi}{du'^2}+\frac{1}{2}fu'^2\psi&=E_A\psi;\\ -\frac{\hbar^2}{2B}\frac{d^2\varphi}{dv'^2}+\frac{1}{2}fv'^2\varphi&=E_B\varphi.\end{aligned}\right\} \tag{149.10}$$

这两个谐振子的本征值是众所周知的(参看 30 题),就是

$$\left.\begin{aligned}E_A&=\hbar\omega_A\left(n_A+\frac{1}{2}\right),\quad \omega_A=\sqrt{f/A};\\ E_B&=\hbar\omega_B\left(n_B+\frac{1}{2}\right),\quad \omega_B=\sqrt{f/B}.\end{aligned}\right\} \tag{149.11}$$

由方程(149.6)和(149.7)可以从已知质量确定 A 和 B, 于是(149.11)所表示的能量和频率就是这问题的解.

下面我们进一步来讨论这些公式. 取 $m_1=m_3$(相同的氧同位素)的正常情况,由(149.6)式知,当 $m_1=m_3$ 时,

$$\alpha=\frac{\pi}{4}.$$

从(149.7)可得质量常数 A 和 B:

$$\frac{1}{A}=\frac{1}{m_1};\quad \frac{1}{B}=\frac{1}{m_1}+\frac{2}{m_2}.$$

因此

$$\omega_A=\sqrt{f/m_1};$$

$$\omega_B=\omega_A\sqrt{1+2\frac{m_1}{m_2}}. \tag{149.12}$$

因 ω_A 和 m_2 无关, 从这里

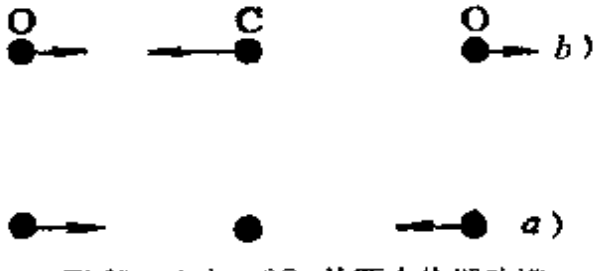


图 62 a 和 b CO_2 的两个价振动模式. 在这问题中不考虑弯曲振动

可得出结论：在 A 模式的振动中碳原子保持静止，又因假定质心是不动的，故必有如图 62a 所示的对称振动．另一方面，可以证明 B 模式的振动是反对称的，如图 62b 所示；在这模式中碳原子是参与运动的．将这种对正常振动的经典描述翻译成量子力学语言，就可按照(149.9)来建立波函数．对于基态有(任意归一化)

$$\Psi_0(u',\ v')=\exp\left(-\frac{A\omega_A}{2\hbar}u'^2\right)\exp\left(-\frac{B\omega_B}{2\hbar}v'^2\right) \tag{149.13}$$

这两个因子在 $u'=0$ 和 $v'=0$ 处各自有单一的极大值，其中

$$\begin{aligned} u'&=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_3-x_1-2a);\\ v'&=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_3-2x_2). \end{aligned} \tag{149.14}$$

所以零点振动发生在 $x_1+x_3=2x_2$(就是碳原子处于两个氧原子的正中间)和 $x_3-x_1=2a$(就是两个氧原子相互离开距离 $2a$)附近．因此，基态的最可几位置正好是经典平衡位置．

如果模式 A 被激发到，譬如说，第一激发态，则 Ψ_0 要乘上一个 u' 因子．因函数

$$\psi(u')=u'e^{-\frac{1}{2}\lambda u'^2},\quad \lambda=\frac{A\omega_A}{\hbar}$$

在 $u'=\pm\lambda^{-\frac{1}{2}}$ 处有两个符号相反的极大值．现在最可几的位置移到

$$x_3-x_1-2a=\pm\sqrt{\frac{2}{\lambda}};\quad x_1+x_3-2x_2=0. \tag{149.15}$$

找到振动粒子的最可几位置，相当于两个经典回转点，在那里粒子停留的时间最长．因此，(149.15)中 u' 的两个极大值显示出有些象经典的振动振幅．$v'=0$ 的条件说明碳原子的最可几位置仍然是在两个氧原子的正中间，但是现在这两个氧原子交替地相互靠

近或远离，正如图 62a 所示.

另一方面，如果模式 B 被激发，则极大值条件反过来是

$$x_3-x_1-2a=0;\quad x_1+x_3-2x_2=\pm\sqrt{\frac{2}{\mu}};$$
$$\mu=\frac{B\omega_B}{\hbar}. \tag{149.16}$$

因此，两个氧原子间最可几的距离(x_3-x_1)保持为平衡时的 $2a$，两者相对于碳原子往返移动，如图 62b 所示.

问题 150　质心运动

在经典力学中，只有内力作用的多体问题的质心运动，可以和粒子的相对运动分离开来. 试证明这对量子力学同样适合，并对只有两个粒子的情况加以讨论.

解　首先，不受外力作用的 N 个粒子的系统的哈密顿算符是

$$H=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{m_i}\nabla_i^2+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}{}' V_{ik}(x_i-x_k,\ y_i-y_k,\ z_i-z_k) \tag{150.1}$$

现在用质心的位置坐标 X, Y, Z 和粒子 $\lambda(\lambda=1, 2, \cdots N-1)$ 相对于粒子 N 的坐标 ξ_λ, η_λ, ζ_λ 来代替 $3N$ 个坐标 x_i, y_i, z_i，即

$$\left.\begin{aligned} &X=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N}m_ix_i;\quad M=\sum_{i=1}^{N}m_i\\ &\xi_\lambda=x_\lambda-x_N\quad(\lambda=1, 2, \cdots N-1)\end{aligned}\right\} \tag{150.2}$$

以及相应于 Y, Z, η_λ, ζ_λ 的表式. 当然，采用这些坐标就人为地将粒子 N 从其余粒子中区别开来，这就破坏了(150.1)的自然对称性.

从(150.2)容易得到算符

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu}=\frac{m_\nu}{M}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial\xi_\nu}\quad(\nu=1, 2, \cdots N-1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_N}=\frac{m_N}{M}\frac{\partial}{\partial X}-\sum_\lambda\frac{\partial}{\partial\xi_\lambda}$$

和

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{m_i}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}&=\sum_{\lambda=1}^{N-1}\frac{1}{m_\lambda}\left(\frac{m_\lambda^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}+2\frac{m_\lambda}{M}\frac{\partial^2}{\partial X\partial\xi_\lambda}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_\lambda^2}\right)\\&\quad+\frac{1}{m_N}\left(\frac{m_N^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}-2\frac{m_N}{M}\sum_\lambda\frac{\partial^2}{\partial X\partial\xi_\lambda}\right.\\&\quad\left.+\sum_\mu\sum_\lambda\frac{\partial^2}{\partial\xi_\mu\partial\xi_\lambda}\right)\\&=\frac{1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\left\{\sum_\lambda\frac{1}{m_\lambda}\frac{\partial^2}{\partial\xi_\lambda^2}+\frac{1}{m_N}\sum_\mu\sum_\lambda\frac{\partial^2}{\partial\xi_\mu\partial\xi_\lambda}\right\},\end{aligned}$$

其中对希腊字母下标求和的范围是从1到$N-1$. 这个计算结果的主要特点是消去了所有的混合导数$\frac{\partial^2}{\partial X\partial\xi_\lambda}$，使得哈密顿算符可以分离为

$$H=H_0+H_r, \tag{150.3}$$

即质心部分：

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \tag{150.4}$$

和描述粒子相对运动的部分：

$$H_r=-\frac{\hbar^2}{2}\left\{\sum_\lambda\frac{1}{m_\lambda}\nabla_\lambda^2+\frac{1}{m_N}\nabla_\lambda\cdot\nabla_\mu\right\}+V, \tag{150.5}$$

其中势能

$$\begin{aligned}V&=\frac{1}{2}\sum_\lambda\sum_\mu{}'V_{\lambda\mu}(\xi_\lambda-\xi_\mu,\ \eta_\lambda-\eta_\mu,\ \zeta_\lambda-\zeta_\mu)\\&\quad+\sum_\lambda V_{\lambda N}(\xi_\lambda,\ \eta_\lambda,\ \zeta_\lambda)\end{aligned} \tag{150.6}$$

和质心坐标无关. 于是薛定谔方程

$$(H_0+H_r)U=E\cdot U \tag{150.7}$$

的解可以分离为

$$U=\varphi(X,\ Y,\ Z)u(\xi_\lambda,\ \eta_\lambda,\ \zeta_\lambda), \tag{150.8}$$

并且

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\varphi=E_0\varphi; \tag{150.9}$$

$$(H_r+V)u=E_ru; \tag{150.10}$$

$$E_0+E_r=E. \tag{150.11}$$

方程(150.9)的解是平面波

$$\varphi=e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}},\quad E_0=\frac{\hbar^2K^2}{2M}, \tag{150.12}$$

其中 $\boldsymbol{R}=(X, Y, Z)$. 象经典力学一样, 这是质心定律: 系统的总质量 M 以恒定的动量 $\hbar\boldsymbol{K}$ 运动. (150.10)式所描述的粒子围绕质心的相对运动是完全独立的.

方程(150.5)的第三项使得 $u(\xi_\lambda, \eta_\lambda, \zeta_\lambda)$ 不能再分解. 只有在二体问题的情况下(即 $N=2$ 和只有 $\lambda=\mu=1$), 相对运动的哈密顿算符才能简化为

$$H_r=-\frac{\hbar^2}{2}\left\{\frac{1}{m_1}\nabla_1^2+\frac{1}{m_2}\nabla_2^2\right\}+V_{12}(\xi_1, \eta_1, \zeta_1). \tag{150.13}$$

象经典力学中一样,引入约化质量 m^*, 使得

$$\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}=\frac{1}{m^*}, \tag{150.14}$$

并略去相对坐标的下标(包括 V_{12} 的下标),则得

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2u+V(\xi, \eta, \zeta)u=E_ru, \tag{150.15}$$

也就是得到等效单体问题的薛定谔方程.

注 在 67 题中,氢原子是作为单体问题处理的,并把它的核看作是静止的. 按照方程(150.15),我们应该更正确地引进电子和核的约化质量 m^* 来代替电子的质量 m. 在考虑核参与围绕质心的相对运动时不要求有其他的改变. 因为核质量,譬如 M, 与 m 相比是很大的,由方程(150.14)近似地得出

$$m^* = m\left(1-\frac{m}{M}\right),$$

例如，氢原子的红谱线 $H_\alpha(n=3\to n=2)$的频率是

$$\nu(H_\alpha)=\frac{5}{36}\frac{m_H^* e^4}{2\hbar^2 h},$$

将它和氘原子的相应谱线

$$\nu(D_\alpha)=\frac{5}{36}\frac{m_D^* e^4}{2\hbar^2 h}$$

比较，发现谱线的移动是

$$\nu(D_\alpha)-\nu(H_\alpha)=\frac{m_D^*-m_H^*}{m_H^*}\nu(H_\alpha)\approx\frac{m}{2M_H}\nu(H_\alpha),$$

运算中用了 $M_D\simeq 2M_H$. 观察这个差值并不很困难. 在波长为 6563 Å 时，它达到 4.12 厘米$^{-1}$. 重氢是 1931 年尤雷(Urey)，布立克韦德(Brickwedde)和墨菲(Murphy)发现的，他们曾观察到在天然氢光谱中 H_α 线附近的这条弱 D_α 伴线[Phys. Rev. **40**, 1(1932)].

问题 151　维里定理

试证明维里定理

$$2E_{动}+E_{势}=0$$

适用于仅由库仑力作用而保持在一起的任何量子力学系统. 在证明中对系统波函数进行标度变换而保持归一化常数不变.

解　质量为 m_i、电荷为 e_i 的 N 个粒子的系统满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{m_i}\nabla_i^2\Psi+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\frac{e_i e_k}{r_{ik}}\Psi=E\Psi, \qquad (151.1)$$

其中 Ψ 按下式归一化

$$\int d\tau_1\int d\tau_2\cdots\int d\tau_N\Psi^*\Psi=1. \qquad (151.2)$$

处于 Ψ 状态的系统的动能和势能可由下式计算：

$$E_{动}=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{m_i}\int d\tau_1\int d\tau_2\cdots\int d\tau_N\Psi^*\nabla_i^2\Psi \qquad (151.3a)$$

和

$$E_{势}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}e_ie_k\int d\tau_1\int d\tau_2\cdots\int d\tau_N\Psi^*\frac{1}{r_{ik}}\Psi \quad (151.3b)$$

作标度变换

$$\boldsymbol{r}_i'=\lambda\boldsymbol{r}_i \quad (151.4)$$

并保持(151.2)不变,这意味着用

$$\Psi_\lambda=\lambda^{3N/2}\Psi(\lambda\boldsymbol{r}_1,\ \lambda\boldsymbol{r}_2,\ \cdots\lambda\boldsymbol{r}_N) \quad (151.5)$$

代替波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2,\ \cdots\boldsymbol{r}_N)$.

将(151.5)代入能量表式(151.3a, b),并过渡到(151.4)的新变数,则得

$$\nabla_i^2=\lambda^2\nabla_i'^2,\quad \frac{1}{r_{ik}}=\lambda\frac{1}{r'_{ik}},$$

因此,代替系统的真实能量

$$E=E_{动}+E_{势},$$

我们得到

$$E(\lambda)=\lambda^2E_{动}+\lambda E_{势}. \quad (151.6)$$

当我们从函数集(151.5)中选取薛定谔方程的正确解时,即取 $\lambda=1$ 时,$E(\lambda)$作为 λ 的函数显然必是极小. 所以

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}=2\lambda E_{动}+E_{势}$$

在 $\lambda=1$ 时必为零,即

$$2E_{动}+E_{势}=0, \quad (151.7)$$

这就是要证明的维里定理.

注 在近似解下这定理不一定成立. 所以,它证明能用于托马斯-费密(Thomas-Fermi)原子,是值得注意的. 参看 175 题.

问题 152 斯莱特(Slater)行列式

将N个全同粒子的多粒子问题的波函数分解为单粒子波函数的乘积,并按泡利原理组成反对称化波函数. 试将描写外力场作

用的算符的期待值简化为单粒子积分.

解 设 $u_i(\nu)$ 是处于 i 态的第 ν 个粒子的单粒子波函数，它和第 ν 个粒子的空间坐标及自旋变量有关，两者都集中地用符号 ν 表示. 于是 N 个全同粒子系统的反对称化的乘积波函数可用斯莱特行列式表示

$$\psi = C\begin{vmatrix} u_1(1) & u_1(2) & \cdots & u_1(N) \\ u_2(1) & u_2(2) & \cdots & u_2(N) \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ u_N(1) & u_N(2) & \cdots & u_N(N) \end{vmatrix} \tag{152.1}$$

或者用行列式的展开式表示为

$$\psi = C\sum_P (-1)^P P(u_1, u_2, \cdots, u_N), \tag{152.2}$$

其中 P 表示波函数 u_i 以自变数 ν 的标准次序 1, 2, $\cdots N$ 所进行的任何排列. 如果 P 是偶(奇)排列，则对所有的排列求和中的相应项是正(负)的.

描写外力的算符 Ω 将以相同的方式作用在所有的粒子上，即

$$\Omega = \sum_{\nu=1}^{N} \Omega_\nu. \tag{152.3}$$

于是，它的期待值是

$$\langle\psi|\Omega|\psi\rangle = |C|^2 \sum_{PP'} (-1)^{P+P'} \langle P'(u_1, \cdots, u_N)|\sum_\nu \Omega_\nu|P(u_1, \cdots, u_N)\rangle. \tag{152.4}$$

现在从(152.4)中单独取出只作用于第 ν 粒子的坐标和自旋的函数上的 Ω_ν 这一项. 在两个排列 P 和 P' 中，任何其他坐标集合(如 μ)将出现在某一其他函数(如 u_j)中. 因为按照单粒子函数的正交性

$$\langle u_j|u_k\rangle = \delta_{jk} \tag{152.5}$$

任何其他的组合项应当为零. 这就是说 P 和 P' 两个排列相同，(152.4)中的符号总是 $+1$，因此 Ω_ν 项只提供单粒子积分

$$\langle P'|\Omega_\nu|P\rangle=\delta_{PP'}\sum_{i=1}^{N}\langle u_i(\nu)\ \ \Omega_\nu|u_i(\nu)\rangle. \qquad (152.6)$$

现在,在波函数ψ中,具有固定的i和ν的因子$u_i(\nu)$是和$N-1$阶的行列式组合在一起的. 所以,在$N!$个可能排列的总数中还留下$(N-1)!$个排列,这是对除ν以外的其余$N-1$个粒子在除u_i以外的其余$N-1$个波函数之间的排列. 因此,

$$\langle\psi|\Omega_\nu|\psi\rangle=|C|^2(N-1)!\sum_{i=1}^{N}\langle u_i(\nu)|\Omega_\nu|u_i(\nu)\rangle. \qquad (152.7)$$

当然,这结果对从总和(152.3)中取出的无论那一项Ω_ν,都是适用的,因此在$\langle\psi|\Omega|\psi\rangle$中总共有$N$个(152.7)形式的相同的表式. 所以

$$\langle\psi|\Omega|\psi\rangle=|C|^2N!\sum_{i=1}^{N}\langle u_i(\nu)|\Omega_\nu|u_i(\nu)\rangle. \qquad (152.8)$$

还要确定归一化常数C,使得

$$\langle\psi|\psi\rangle=1 \qquad (152.9)$$

是无论在什么地方找到N个粒子的几率(即肯定找得到). 为此,只要形式上在(152.3)中令$\Omega_\nu=1/N$,从而使$\Omega=1$. 利用单粒子归一化条件(152.5),可从(152.8)式得到

$$\langle\psi|\psi\rangle=|C|^2N!\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{N}=|C|^2N!$$

再由(152.9)得

$$C=\sqrt{\frac{1}{N!}}. \qquad (152.10)$$

于是,(152.8)式最后可写成

$$\langle\psi|\Omega|\psi\rangle=\sum_{i=1}^{N}\langle u_i(\nu)|\Omega_\nu|u_i(\nu)\rangle, \qquad (152.11)$$

这就是单粒子态的期待值的简单的总和.

注 如果忽略对称化,用简单的乘积

$$\psi=u_1(1)u_2(2)\cdots u_N(N) \qquad (152.12)$$

代替(152.1),则得

$$\langle\mathring{\psi}|\Omega|\mathring{\psi}\rangle=\sum_{\nu=1}^{N}\langle u_\nu|\Omega_\nu|u_\nu\rangle \tag{152.13}$$

$$\langle\mathring{\psi}|\mathring{\psi}\rangle=1, \tag{152.14}$$

即得到了与(152.11)及(152.9)基本上相同的结果，而后者是由反对称化波函数导出的. 只要不是和(152.3)的结构相矛盾的粒子间相互作用，也不是和(152.5)相矛盾的非正交单粒子波函数,这些关系式就成立.

问题 153　用斯莱特行列式表示相互作用中的交换项

对于前题的反对称化的乘积波函数,试确定粒子对相互作用

$$\Omega=\frac{1}{2}\sum_{\mu\nu}'\Omega_{\mu\nu} \tag{153.1}$$

的期待值.

解　应用前题同样的记号和归一化条件,(153.1)中的某一项的期待值可写为

$$\langle\psi|\Omega_{\mu\nu}|\psi\rangle=\frac{1}{N!}\sum_{PP'}'(-1)^{P+P'}\langle P'(u_1,\cdots,u_N)|\Omega_{\mu\nu}|P(u_1,\cdots,u_N)\rangle. \tag{153.2}$$

如果求和中的相应项不等于零，自变数既不是 μ 也不是 ν 的所有函数 u_κ 对 P 和 P' 的两个排列必定是相同的. 这些成对相同的函数对的数目和自变数的数目相同,共有 $N-2$ 种，在它们之间还有 $(N-2)!$ 种排列. 如果所有这些不同排列的函数对于 P 和 P' 又都是相同的,则(153.2)的每一个不等于零的项中只剩下自变数为 μ 和 ν 的一对函数,譬如说 u_iu_j，即

$$\langle\psi|\Omega_{\mu\nu}|\psi\rangle=\frac{(N-2)!}{N!}\sum_{ij}'\{\langle u_i(\mu)u_j(\nu)|\Omega_{\mu\nu}|u_i(\mu)u_j(\nu)\rangle-\langle u_j(\mu)u_i(\nu)|\Omega_{\mu\nu}|u_i(\mu)u_j(\nu)\rangle\}. \tag{153.3}$$

花括号中第一项是经典项，排列 P 和 P' 完全一致，对于 μ 和 ν 是偶排列;第二项是交换项,这里,一个不同的排列 $(ij\to ji)$ 正好改变

符号.

现在我们来考虑这种算符的求和式(153.1). 于是有

$$\langle\psi|\Omega|\psi\rangle=\frac{1}{2N(N-1)}\sum_{\mu\nu}'\sum_{ij}'\{\langle u_i(\mu)u_j(\nu)|\Omega_{\mu\nu}|u_i(\mu)u_j(\nu)\rangle - \langle u_j(\mu)u_i(\nu)|\Omega_{\mu\nu}\ u_i(\mu)u_j(\nu)\rangle\}. \tag{153.4}$$

这里, μ 和 ν 代表任意两个粒子, 因此 $\sum_{\mu\nu}'$ 包含 $N(N-1)$ 个相等的项(这里 μ, ν 和 ν, μ 是作为不同项计算的). 所以, 所求的期待值为

$$\langle\psi|\Omega|\psi\rangle=\frac{1}{2}\sum_{ij}'\{\langle u_i(1)u_j(2)\cdot\Omega_{12}|u_i(1)u_j(2)\rangle - \langle u_j(1)u_i(2)|\Omega_{12}|u_i(1)u_j(2)\rangle\}. \tag{153.5}$$

当然, 符号 1 和 2 是完全任意的.

必须再次强调, 这里和前题中的每一单粒子波函数 u_i, 既包含空间状态, 也包含自旋状态.

问题 154　原子基态中的两个电子

原子的 K 壳层是由处于 $1s$ 态的两个电子组成的. 试用在电荷为 Ze、质量为无限大的原子核的场中屏蔽的氢原子波函数来近似计算它的能量.

解　这问题的哈密顿算符是(用原子单位 $e=\hbar=m=1$):

$$H=-\frac{1}{2}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-Z\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}; \tag{154.1}$$

按照 67 题的表, 近似波函数是

$$U=u(r_1)u(r_2)=\frac{\alpha^3}{\pi}e^{-\alpha(r_1+r_2)} \tag{154.2}$$

其中

$$\alpha=Z-\sigma, \tag{154.3}$$

而 σ 是屏蔽常数. 因核电荷对每一个电子的影响只部分地被另一

电子所屏蔽，故有 $0<\sigma<1$. (154.2)的两个因子满足波动方程

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{\alpha}{r_1}\right)u(r_1)=-\frac{1}{2}\alpha^2u(r_1);$$

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{\alpha}{r_2}\right)u(r_2)=-\frac{1}{2}\alpha^2u(r_2),$$

因此

$$HU=\left\{\left(-\frac{1}{2}\alpha^2-\frac{Z-\alpha}{r_1}\right)+\left(-\frac{1}{2}\alpha^2-\frac{Z-\alpha}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}\right\}U,$$

并且能量成为

$$E=\iint d\tau_1 d\tau_2\left\{-\alpha^2-\frac{\sigma}{r_1}-\frac{\sigma}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}\right\}U^2. \qquad (154.4)$$

用(154.2)的 U 和每一个 u 因子的归一化条件，得到

$$E=-\alpha^2-2\sigma\frac{\alpha^5}{\pi}\int d\tau_1\frac{e^{-2\alpha r_1}}{r_1}$$

$$+\frac{\alpha^6}{\pi^2}\iint d\tau_1 d\tau_2\frac{e^{-2\alpha(r_1+r_2)}}{r_{12}}. \qquad (154.5)$$

(154.5)中的第一个积分用初等方法算出：

$$\int d\tau_1\frac{e^{-2\alpha r_1}}{r_1}=4\pi\int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-2\alpha r_1}=\frac{\pi}{\alpha^2}. \qquad (154.6)$$

为了计算二重积分

$$J=\iint d\tau_1 d\tau_2\frac{e^{-2\alpha(r_1+r_2)}}{r_{12}},$$

把 $1/r_{12}$ 展开为矢量 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 的夹角 Θ 的勒让德多项式

$$\frac{1}{r_{12}}=\begin{cases}\dfrac{1}{r_2}\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^n P_n(\cos\Theta) & 0\leqslant r_1\leqslant r_2,\\ \dfrac{1}{r_1}\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n P_n(\cos\Theta) & r_2\leqslant r_1<\infty.\end{cases}$$

于是只有展开式的第一项($n=0$)对 J 有贡献，从而得到

$$J=\int d\tau_2 e^{-2\alpha r_2}\cdot 4\pi\left\{\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2}dr_1 r_1^2 e^{-2\alpha r_1}+\int_{r_2}^{\infty}dr_1 r_1 e^{-2\alpha r_1}\right\}.$$

上式中，$d\tau_2=4\pi r_2^2 dr_2$，$0\leqslant r_2<\infty$，所有的积分又都成为初等的，

并得出：

$$J=\frac{5\pi^5}{8\alpha^5}. \tag{154.7}$$

将积分结果(154.6)和(154.7)代入能量表达式(154.5)，得

$$E=-\alpha^2-2(Z-\alpha)\alpha+\frac{5}{8}\alpha. \tag{154.8}$$

到此为止，我们还没有处理过 α 的值；现在，在变分法的意义上最佳地选取 α，使

$$\frac{dE}{d\alpha}=0. \tag{154.9}$$

由此引出

$$\alpha=Z-\frac{5}{16}, \tag{154.10}$$

故

$$E=-\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2. \tag{154.11}$$

应该注意，这个 α 值使得(154.2)成为哈密顿算符

$$H^0=-\frac{1}{2}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-\alpha\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right) \tag{154.12}$$

的准确解，并可以因式分解．比较(154.12)和(154.1)得到

$$H'=H-H^0=-\sigma\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}.$$

定义 H' 为微扰项，一级微扰的能移为

$$\Delta E=\iint d\tau_1 d\tau_2 U H' U,$$

若屏蔽常数 σ 按照(154.10)来选取，则 ΔE 等于零．

我们再提出几个值得注意的数值．理论中所描述的是除 K 壳层上两个电子以外所有其他电子都已剥离的原子．对于

$Z=$	2	3	4	6	8
	He	Li^+	Be^{++}	C^{4+}	O^{6+}

都有实验数据．在所有这些情况中，观察到的不是 E 本身，而是

电离能 I，它是从离子中把两个 K 电子剥离一个所需的能量。于是仅保持其最后一个电子的残留离子所具有的能量为

$$E'=-\frac{1}{2}Z^2,$$

因此，电离能量为

$$I=\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2-\frac{1}{2}Z^2. \tag{154.13}$$

下表说明(154.13)式和实验相符的情况随着 Z 的增加而不断改进。这是合理的，因为随着 Z 的增加，每个电子和中心的耦合愈来愈强，而相互作用项 $1/r_{12}$ 的作用却变得不重要了。

Z	I(eV)	
	理　　论	实　　验
2	23.2	24.5
3	74.1	75.6
4	152.2	153.6
6	390	393
8	737	738

问题 155　氦原子的激发态

设在中性氦原子中，一个电子处于 1s 基态，另一电子处于 n, l 激发态($n\geqq 2$, $l\geqq 1$)。试运用其中一个核电荷被 1s 电子屏蔽的类氢波函数，来确定正氦和仲氦的(n, l)电子的电离能，并用这方法对 $2p$ 态$(n=2, l=1)$作数值计算。

解　设 1s 电子是受到全部核电荷 $2e$ 作用的，而(n, l)电子只受屏蔽的电荷 e 作用，则这两个单电子态可以用微分方程

$$\left.\begin{aligned}\left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{2}{r}\right)u&=E_1u;\\ \left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{1}{r}\right)v_{nl}&=E_nv_{nl}\end{aligned}\right\} \tag{155.1}$$

的解来描述，其中

$$u\equiv|1\rangle=\sqrt{\frac{8}{\pi}}e^{-2r};\quad E_1=-2;$$
$$v_{nl}\equiv|n\rangle=R_{nl}(r)Y_{l,m}(\vartheta,\varphi);\quad E_n=-\frac{1}{2n^2} \tag{155.2}$$

式中 R_{nl} 是氢原子的归一化径向函数(见 67 题).

二电子问题的薛定谔方程

$$\left\{-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}\right\}\psi=E\psi \tag{155.3}$$

可以用对称化的乘积波函数

$$\psi=u(1)v_n(2)+\varepsilon v_n(1)u(2)=|1n\rangle+\varepsilon|n1\rangle \tag{155.4}$$

近似解出. 对于仲氦(自旋反平行), $\varepsilon=+1$; 而对于正氦(自旋平行), $\varepsilon=-1$. 波函数 ψ 按照 $\langle\psi|\psi\rangle=2$ 归一化.

为了尽可能地使(155.4)满足(155.3), 我们把 $\langle 1n|$ 作用于(155.3):

$$\left\langle 1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}\right|\psi\right\rangle=E\langle 1n|\psi\rangle. \tag{155.5}$$

因 $$\langle 1|1\rangle=1;\quad \langle n|n\rangle=1;\quad \langle 1|n\rangle=0,$$

上式中的积分一部分可以分离开来, 还有一部分为零(假定 $l\neq 0$). 例如, 我们有

$$\left\langle 1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{2}{r_1}\right|1n\right\rangle=E_1;$$
$$\left\langle 1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{2}{r_1}\right|n1\right\rangle=0;$$
$$\left\langle 1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{2}{r_2}\right|1n\right\rangle=E_n-\left\langle n\left|\frac{1}{r}\right|n\right\rangle \text{ 等.}$$

因为对所有单电子态维里定理(参看 151 题)给出 $E_{势}=2E$, 故得

$$\left\langle n\left|\frac{1}{r}\right|n\right\rangle=-E_{势}^{(n)}=-2E_n=\frac{1}{n^2}.$$

因此，最后由方程(155.5)得出能量表达式

$$E=-2-\frac{3}{2n^2}+\mathscr{C}+\varepsilon\mathscr{E} \tag{155.6}$$

其中缩写记号

$$\mathscr{C}=\left\langle 1n\left|\frac{1}{r_{12}}\right|1n\right\rangle \tag{155.7}$$

和

$$\mathscr{E}=\left\langle 1n\left|\frac{1}{r_{12}}\right|n1\right\rangle \tag{155.8}$$

依次是电子-电子相互作用的经典积分和交换积分．现在把这两个积分计算出来．

对于这两个积分，我们将 $1/r_{12}$ 用两个电子的位矢 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 的夹角 ϑ_{12} 的球谐函数展开：

$$\frac{1}{r_{12}}=\begin{cases}\dfrac{1}{r_2}\displaystyle\sum_{\lambda=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{\lambda}P_\lambda(\cos\vartheta_{12}) & \text{当 } r_1<r_2;\\ \dfrac{1}{r_1}\displaystyle\sum_{\lambda=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{\lambda}P_\lambda(\cos\vartheta_{12}) & \text{当 } r_1>r_2.\end{cases} \tag{155.9}$$

首先对极角的全部变化范围求积分．我们必须计算积分

$$\mathscr{C}_{\text{角}}=\oint d\Omega_2\,|Y_{l,m}(2)|^2\oint d\Omega_1 P_\lambda(\cos\vartheta_{12}) \tag{155.10}$$

和

$$\mathscr{E}_{\text{角}}=\oint d\Omega_2 Y^*_{l,m}(2)\oint d\Omega_1 Y_{l,m}(1)P_\lambda(\cos\vartheta_{12}). \tag{155.11}$$

在 $\mathscr{C}_{\text{角}}$ 中，内积分成为 $4\pi\delta_{\lambda,0}$，因此，级数(155.9)中只留下 $\lambda=0$ 的项对积分有贡献．所以，经典的相互作用是

$$\mathscr{C}=4\pi\int_0^\infty dr_2 r_2^2|u(r_2)|^2 \times\left\{\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2}dr_1 r_1^2|R_{nl}(r_1)|^2+\int_{r_2}^\infty dr_1 r_1|R_{nl}(r_1)|^2\right\} \tag{155.12}$$

为了计算(155.11)的内积分，我们应用球谐函数的加法定理

$$P_\lambda(\cos\vartheta_{12})=\frac{4\pi}{2\lambda+1}\sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda}Y^*_{\lambda,\mu}(1)Y_{\lambda,\mu}(2);\quad(155.13)$$

于是 $$\oint d\Omega_1 Y_{l,m}(1)P_\lambda(\cos\vartheta_{12})=\frac{4\pi}{2l+1}Y_{l,m}(2)\delta_{l,\lambda}$$

从而

$$\mathscr{C}_{\text{角}}=\frac{4\pi}{2l+1}\delta_{l,\lambda}.\quad(155.14)$$

因此，级数(155.9)中只有 $\lambda=l$ 的项对交换积分有贡献，因而

$$\begin{aligned}\mathscr{E}=&\frac{4\pi}{2l+1}\int_0^\infty dr_2 r_2^2 u(r_2)R_{nl}(r_2)\\&\times\left\{\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2}dr_1 r_1^2\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l u(r_1)R_{nl}(r_1)\right.\\&\left.+\int_{r_2}^\infty dr_1 r_1\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l u(r_1)R_{nl}(r_1)\right\}.\end{aligned}\quad(155.15)$$

随着激发电子的 n 和 l 的值的增大，由于两个单电子波函数的重迭减少，所得到的近似结果就改进得更多. 因此，除 S 态外，这方法对 $n=2$ 和 $l=1$ 是最坏的情况. 但是，如果在这最坏的特殊情况下能得到合理的结果，那么在其他情况下它都是完全可信的. 所以，现在来计算氦原子的这个特殊激发态的能量，并将所得结果和实验结果相比较.

这时归一化的径向波函数 R_{nl} 成为

$$R_{2,1}=\frac{1}{\sqrt{24}}re^{-\frac{r}{2}},\quad(155.16)$$

用这里的 $R_{2,1}$ 和(155.2)的 u，能够把径向积分(155.12)和(155.15)容易地计算出来，虽然计算稍繁一些. 所得结果是

$$\mathscr{C}=\frac{1}{4}\left(1-\frac{13}{3125}\right)=0.24896$$

和 $$\mathscr{E}=\frac{14}{3}\left(\frac{4}{5}\right)^3\left(\frac{1}{5}\right)^4=0.00382.$$

由此得出用原子单位表示的能量

$$E=-2.12604+\varepsilon\cdot 0.00382.$$

电离能等于 E 和 He^+ 基态(即一个电子处于 $1s$ 态而另一电子移走的状态)能量 $E^+=-2$ 之差,即

$$I=E^+-E=0.12604-\varepsilon\cdot 0.00382$$

或

$$I=(3.429-\varepsilon\cdot 0.104)\text{eV}$$

这结果和实验的比较如下表所示. 符合得相当好; 甚至仲氦态和正氦态之间的裂距也不象所预想的那么坏, 原来预计这裂距对两个单电子函数的重迭和相互极化是相当敏感的. 应该注意, 具有空间对称波函数的仲态位于反对称的正态之上, 因此这情况和 H_2 分子的情况相反(163 题). 在我们的计算中这是容易验证的,因只有(155.8)式的 $\mathscr{E}$ 对能量的贡献与 ε 的符号有关; 而 $\mathscr{E}$ 是从两电子相斥推导出来的, 它是正的, 因此, 当 $\varepsilon=+1$ 时, 能级升高.

ε		电离能 I(eV)	
		理论	实验
仲	+1	3.325	3.368
正	1	3.533	3.623
差		0.208	0.255

问题 156 氦原子的 S 激发态

将前题的方法扩充到 $1s$, ns 组态, 对 $1s$ 态再次用未受扰动的波函数, 但对 ns 态波函数不作特殊的假设. 试证明: 如果重叠积分和交换积分都是小的, 则能建立 ns 电子在其中运动的有效势场.

解 波函数可写成单电子态的对称化乘积

$$\psi=u(1)v_n(2)+\varepsilon v_n(1)u(2)=|1n\rangle+\varepsilon|n1\rangle \qquad (156.1)$$

式中 $\varepsilon=\pm 1$, 又式中的 $1s$ 态函数(用原子单位)为

$$u\equiv|1\rangle=\sqrt{\frac{8}{\pi}}e^{-2r};\quad\left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{2}{r}\right)u=-2u;\ \langle1|1\rangle=1.$$

(156.2)

关于 ns 态的函数，只知道它与角度无关，而且也假定它是归一化的，

$$v_n(r)\equiv|n\rangle;\quad\langle n|n\rangle=1 \tag{156.3}$$

对 $|n\rangle$ 没有更多的特殊要求.

波函数 ψ 是薛定谔方程

$$(H-E)\psi=0 \tag{156.4}$$

的近似解，式中 H 是原子的哈密顿算符：

$$H=-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{2}{r_1}-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{2}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}. \tag{156.5}$$

这些是本问题的基本方程. 现在首先用 $\langle1n|$ 来构成(156.4)的希耳伯乘积

$$\langle1n|H-E|1n\rangle+\varepsilon\langle1n|H-E|n1\rangle=0 \tag{156.6}$$

和确定与(156.5)所给的 H 有关的积分. 到此，上面这些公式和前题的没有多大差别. 然而立刻就可看到有一个主要的差异：两个函数 $|1\rangle$ 和 $|n\rangle$ 不再是正交的，因为它们同属于 $l=0$ 但有着不同的势场. 所以我们必须引进重迭积分

$$S=\langle1|n\rangle=\langle n|1\rangle. \tag{156.7}$$

此外，仍采用下列缩写：

$$\left\langle1n\left|\frac{1}{r_{12}}\right|1n\right\rangle=\mathscr{C};\quad\left\langle1n\left|\frac{1}{r_{12}}\right|n1\right\rangle=\mathscr{E}. \tag{156.8}$$

于是剩下的问题是计算下列积分：

$$\left\langle1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{2}{r_1}\right|1n\right\rangle=\left\langle1\left|-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{2}{r}\right|1\right\rangle=-2$$

$$\left\langle1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{2}{r_2}\right|1n\right\rangle=\left\langle n\left|-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{2}{r}\right|n\right\rangle=K_n$$

$$\left\langle 1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{2}{r_1}\right|n1\right\rangle=\left\langle 1n\left|-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{2}{r_2}\right|n1\right\rangle$$
$$=-2S^2. \tag{156.9}$$

在最后一行中应用了恒等式

$$\langle 1|\nabla^2|n\rangle=\langle n|\nabla^2|1\rangle.$$

于是方程(156.6)可写为

$$-2+K_n+\mathscr{C}-E+\varepsilon(-4S^2+\mathscr{E}-ES^2)=0$$

或

$$E=-2+\frac{K_n+\mathscr{C}+\varepsilon(\mathscr{E}-2S^2)}{1+\varepsilon S^2}. \tag{156.10}$$

因 $E^+=-2$ 是 He^+ 离子基态的能量，故电离能 $I=E^+-E$ 成为

$$I=-\frac{K_n+\mathscr{C}+\varepsilon(\mathscr{E}-2S^2)}{1+\varepsilon S^2}. \tag{156.11}$$

E 或 I，都可由这个表达式确定，确定的方法是对里兹(Ritz)参数所定义的有充分变动余地的函数集$|n\rangle$求出积分 S, K_n, $\mathscr{C}$, $\mathscr{E}$ 的值，并作适当的选择来求得 E 或 I 的极值.

如果重叠积分 S 和交换积分 $\mathscr{E}$ 都很小，则(156.10)式和(156.11)式简化为

$$E=-2+K_n+\mathscr{C};\quad I=-(K_n+\mathscr{C}). \tag{156.12}$$

不考虑对称化(即取 $\varepsilon=0$)时，可以得到同样的表达式，这只能解释为在多体问题中有时对称化可以省略.

利用积分 K_n 和 $\mathscr{C}$ 的定义(156.8)和(156.9)，可将(156.12)更详细地写出

$$E=-2+\langle n|\Omega|n\rangle \tag{156.13}$$

式中算符

$$\Omega=-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{2}{r}+\int d\tau'\frac{u(r')^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \tag{156.14}$$

为了选择使得 E 最小的归一化函数$|n\rangle$，我们采用变分法，即

$$\delta(\langle n|\Omega|n\rangle+\lambda\langle n|n\rangle)=0,$$

式中 λ 是拉格朗日乘子. 因

$$\delta\langle n|\Omega|n\rangle=2\langle\delta n|\Omega|n\rangle;\quad \delta\langle n|n\rangle=2\langle\delta n|n\rangle,$$

故得

$$\langle\delta n|\Omega+\lambda|n\rangle=0,$$

或者,因 $|\delta n\rangle$ 是一任意函数而得到下列微分方程:

$$(\Omega+\lambda)\,|n\rangle=0.$$

将(156.13)重写为

$$\langle n|\Omega-E-2|n\rangle=0,$$

可以看出, $\lambda=-E-2$. 所以 $|n\rangle$ 满足单电子薛定谔方程

$$-\frac{1}{2}\nabla^2|n\rangle+V_{\text{有效}}(r)\,|n\rangle=(E+2)\,|n\rangle, \qquad (156.15)$$

式中有效势

$$V_{\text{有效}}(r)=-\frac{2}{r}+\int d\tau'\frac{u(r')^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \qquad (156.16)$$

这正好是可以从泊松方程 $\nabla^2V_{\text{有效}}=+4\pi\rho$ 推导出来的静电势, 式中的电荷密度 ρ 是由核点电荷 $+2$ 和 $1s$ 电子的负空间电荷密度 $-u^2$ 组成的. 将(156.2)式的波函数 u 代入(156.16)进行计算,得到

$$V_{\text{有效}}=-\frac{1}{r}-\left(\frac{1}{r}+2\right)e^{-4r}. \qquad (156.17)$$

如果 $|n\rangle$ 由(156.15)决定, 只要 $S\ll1$ 和 $\mathscr{E}\ll\mathscr{C}$ (即 S 和 $\mathscr{E}$ 仅仅是小的修正), 则对能量表达式(156.10)的全部积分来说,可以认为这个 $|n\rangle$ 具有足够的近似.

附录 按照前面所述的一般纲要进行数值计算可能相当繁复. 作为例子, 这里给出用简略的变分步骤使(156.12)取极值所得的数值结果, 我们完成这一计算是通过对 $2s$ 态采用下列尝试函数集

$$|2\rangle=A(e^{-2r}+pre^{-\frac{1}{2}r}). \qquad (156.18)$$

它们是按 $\langle2|2\rangle=1$ 归一化的,并且是由里兹参数 p 定义的. 这些

函数在 $r=0$ 处具有有限值，它们有一个零点(这对于 $2s$ 态是必要的)，而且表现出第二项所决定的正确的渐近行为. 第一项描述在小距离上对类氢行为的偏离，因这时核电荷的屏蔽越来越弱. 因为 $1s$ 态的分布是用 e^{-2r} 来描述的，这种效应使 $|2\rangle$ 在小距离上和 r 的关系近似地和 $1s$ 态相同.

近似函数(156.18)给出下列数值结果：

$$\pi A^2=\left(\frac{1}{8}-\frac{768}{625}p+96p^2\right)^{-1};$$

$$K_2=4\pi A^2\left(-\frac{1}{16}+\frac{384}{625}p-11p^2\right);$$

$$\mathscr{C}=\pi A^2\left(\frac{5}{32}-\frac{512\cdot 6359}{125\cdot 28561}p+\frac{74688}{3125}p^2\right);$$

$$S=8\sqrt{2\pi}A\left(\frac{1}{32}-\frac{96}{625}p\right);$$

$$\mathscr{E}=128\pi A^2\left(\frac{5}{4096}-\frac{25436}{3570125}p+\frac{1056}{78125}p^2\right).$$

于是，只要适当选取 p，就可使能量表达式(156.12)取极小值. 这导致一个 p 的四次方程，有一个正根是 $p=0.1105$. 不考虑对称化得出的电离能是 $I=-(K_2+\mathscr{C})=0.145$ 原子单位，或 $I=3.94$ 电子伏特. 如采用同样的 p 值，由完全的能量表达式(156.11)计算，则得

$$I=\frac{0.145-0.021s}{1+0.0225s}\text{ 原子单位},$$

对称		$2s$ 态的电离能 (eV)	
		理论	实验
仲	$e=+1$	3.30	3.97
正	$e=-1$	4.62	4.76
差		1.32	0.79

并得到上表所列结果. 正如变分计算中常有的，理论的近似法给出比正确值稍高的能量值. 即使在这样十分简化的近似法中，相当大的正-仲裂距也能以 35% 的精确度计算出来.

问题 157 锂 基 态

试计算处于基态的锂原子($Z=3$)的结合能. 对于两个 $1s$ 电子可应用 154 题的屏蔽的类氢函数. 略去交换能不计.

解 这问题的哈密顿算符是

$$H=\left\{-\frac{1}{2}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-3\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}\right\}$$
$$+\left\{-\frac{1}{2}\nabla_3^2-\frac{1}{r_3}\right\}+\left\{\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}-\frac{2}{r_3}\right\} \qquad (157.1)$$

其中，第一个花括号对应于 Li^+ 的二电子问题，第二个花括号对应于在一个剩余正电荷的屏蔽核场中第三个电子($2s$ 态)的运动. 剩下的相互作用都集中在第三个花括号里. 如果 K 壳层的半径远小于 $2s$ 波函数的分布线度，则前面所表述的对第三个电子的处理将是十分正确的. 由于事实并非如此，所以对第三个电子采用中心电荷是 1 的氢原子波函数是一个近似.

我们把本征函数写成乘积的形式:

$$U(1,\ 2,\ 3)=u(1)u(2)v(3). \qquad (157.2)$$

这里，$u(r)$ 代表 $1s$ 函数:

$$u(r)=\frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}e^{-\alpha r} \qquad (157.3)$$

和

$$\alpha=Z-\frac{5}{16}=2.6875 \qquad (157.4)$$

有效核电荷是由 Li^+ 的两个 $1s$ 电子的相互屏蔽作用引起的(参看 154 题). $(1s)^2$ 态的能量为

$$E^+=\iint d\tau_1 d\tau_2 u(1)u(2)$$
$$\times\left\{-\frac{1}{2}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-3\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}\right\}u(1)u(2), \tag{157.5}$$

由154题可知上式的计算结果是

$$E^+=-\alpha^2. \tag{157.6}$$

第三个电子的本征函数可以从67题(氢问题)的表中选取；处于最低态 $2s$ 时它的本征函数是

$$v(r)=\frac{1}{\sqrt{8\pi}}\left(1-\frac{1}{2}r\right)e^{-\frac{1}{2}r}, \tag{157.7}$$

它满足微分方程

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_3^2-\frac{1}{r_3}\right)v(r_3)=-\frac{1}{8}v(r_3). \tag{157.8}$$

如果我们将函数(157.3)和(157.7)代入能量表达式

$$E=\iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 u(1)u(2)v(3)Hu(1)u(2)v(3), \tag{157.9}$$

式中 H 是哈密顿算符(157.1)，则(157.1)的第一个括号提供 E^+，见(157.6)式，又按照(157.8)，第二个括号为 $-\frac{1}{8}$，因此

$$E=E^+-\frac{1}{8}+\iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 u(1)^2u(2)^2v(3)^2$$
$$\times\left(\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}-\frac{2}{r_3}\right). \tag{157.10}$$

最后的一个积分仍需要计算. 它可以简化为

$$J=2\int d\tau_3 v(3)^2\left\{\int d\tau_1\frac{u(1)^2}{r_{13}}-\frac{1}{r_3}\right\}. \tag{157.11}$$

将[参看 44 题(44.19)式]

$$\int d\tau_1\frac{u(1)^2}{r_{13}}=\frac{1}{r_3}\{1-(1+\alpha r_3)e^{-2\alpha r_3}\}$$

代入(157.11)式，得出

$$J=-2\int d\tau_3\frac{v(3)^2}{r_3}(1+\alpha r_3)e^{-2\alpha r_3}.$$

将(157.7)的 v 代入，这积分虽麻烦却是初等的，经计算得出

$$J=-\frac{\frac{1}{2}+3\alpha+16\alpha^3}{(1+2\alpha)^5}. \tag{157.12}$$

于是，锂的基态能量成为

$$E=-\alpha^2-\frac{1}{8}-\frac{\frac{1}{2}+3\alpha+16\alpha^3}{(1+2\alpha)^5}. \tag{157.13}$$

将(157.4)的 α 值代入进行计算，得出电离能

$$I=E^+-E=\frac{1}{8}+\frac{\frac{1}{2}+3\alpha+16\alpha^3}{(1+2\alpha)^5} \tag{157.14}$$

的数值为 $$I=0.1553=4.23\,\text{eV}.$$

将这结果和实验值 5.37 eV 比较起来，差值相当大. 这近似法当然不是很好. 造成这个差值的原因，既不能从 K 壳层对第三个电子的完全屏蔽中找到，也不能以略去原子和离子之间 α 值的微小差异来说明. 因为这些修正值都太小，不足以解释大于 1 eV 的差异. 还有波函数的两个特点可以用来解释上述差异，这就是波函数的乘积形式和没有进行对称化，即没有考虑交换能.

问题 158　对锂基态的交换能修正

试考虑本征函数的正确的对称性而对前题所得的锂基态能量进行修正.

解　本征函数仍必须是描述两个电子在 1s 态 $u(r)$ 和一个电子在 2s 态 $v(r)$ 的状态的函数. 这和前题所定义的相同. 对称化要求包括自旋函数. 于是，总的反对称本征函数可用斯莱特行列式(见 152 题)表示如下：

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix} u(1)\alpha(1); & u(2)\alpha(2); & u(3)\alpha(3) \\ u(1)\beta(1); & u(2)\beta(2); & u(3)\beta(3) \\ v(1)\alpha(1); & v(2)\alpha(2); & v(3)\alpha(3) \end{vmatrix} \tag{158.1}$$

其中自旋函数 α 和 β 描述相反的自旋方向. 行列式(158.1)是薛定谔方程

$$(H-E)\psi=0 \tag{158.2}$$

的近似解,式中 H 代表前题中的哈密顿算符. 包括自旋求和在内的标量的希耳伯乘积方程是

$$\langle\psi\,|\,H-E\,|\,\psi\rangle=0,$$

在完成对自旋的求和以后,从这方程可以得出

$$\iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3\{u(1)u(2)v(3) - v(1)u(2)u(3)\}(H-E)u(1)u(2)v(3)=0, \tag{158.3}$$

采用下列缩写记号

$$\tilde{E}=\iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 u(1)u(2)v(3)\,Hu(1)u(2)v(3), \tag{158.4}$$

$$\mathscr{E}=\iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 v(1)u(2)u(3)\,Hu(1)u(2)v(3), \tag{158.5}$$

$$S=\int d\tau_1 v(1)u(1), \tag{158.6}$$

可得出经过修正的能量公式

$$E=\frac{\tilde{E}-\mathscr{E}}{1-S^2}. \tag{158.7}$$

这里的 $\tilde{E}$ 表示前题中(157.13)式所确定的未经修正的能量,即

$$\tilde{E}=-\left(\alpha^2+\frac{1}{8}\right)+J; \quad J=-\frac{\frac{1}{2}+3\alpha+16\alpha^3}{(1+2\alpha)^5} \tag{158.8}$$

$\mathscr{E}$ 是交换能, S 是函数 u 和 v 的重叠积分, 已知 u 和 v 不是正交

的. 现在剩下的主要问题是计算交换能积分(158.5). 如果将哈密顿算符写成下列形式:

$$H=\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{\alpha}{r_1}\right)+\left(-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{\alpha}{r_2}\right)+\left(-\frac{1}{2}\nabla_3^2-\frac{1}{r_3}\right)$$
$$-\frac{3-\alpha}{r_1}-\frac{3-\alpha}{r_2}-\frac{2}{r_3}+\frac{1}{r_{12}}+\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}, \qquad (158.9)$$

那么, 将它作用于 $u(1)u(2)v(3)$ 时, 从(158.9)的第一行得出的结果是简单地依次乘以 $-\frac{1}{2}\alpha^2$, $-\frac{1}{2}\alpha^2$, $-\frac{1}{8}$, 结果得到

$$\mathscr{E}=-\left(\alpha^2+\frac{1}{8}\right)S^2-(3-\alpha)S\int d\tau_1\frac{u(1)v(1)}{r_1}-(3-\alpha)S^2$$
$$\times\int d\tau_2\frac{u(2)^2}{r_2}-2S\int d\tau_3\frac{u(3)v(3)}{r_3}$$
$$+S\iint d\tau_1 d\tau_2\frac{u(1)v(1)\cdot u(2)^2}{r_{12}}$$
$$+\iint d\tau_1 d\tau_3\frac{u(1)v(1)\cdot u(3)v(3)}{r_{13}}$$
$$+S\iint d\tau_2 d\tau_3\frac{u(2)^2\cdot u(3)v(3)}{r_{23}}.$$

进一步利用下列缩写:

$$U=\int d\tau\frac{u^2}{r};\quad V=\int d\tau\frac{uv}{r}; \qquad (158.10)$$

$$X=\iint d\tau d\tau'\frac{u(r)v(r)\cdot u(r')v(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}; \qquad (158.11)$$

$$Y=\iint d\tau d\tau'\frac{u(r)^2\cdot u(r')v(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}, \qquad (158.12)$$

则交换能成为

$$\mathscr{E}=-\left(\alpha^2+\frac{1}{8}\right)S^2-(5-\alpha)SV-(3-\alpha)S^2U+2SY+X, \qquad (158.13)$$

从而经过修正的能量(158.7)成为

$$E=\tilde{E}+\frac{[J+(3-\alpha)U]S^2+[(5-\alpha)V-2Y]S-X}{1-S^2}. \tag{158.14}$$

最后，来计算积分 S[(158.6)式]，U，V，X，Y[(158.10-12)式]．计算中采用函数

$$u(r)=\frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}e^{-\alpha r};\quad v(r)=\frac{1}{\sqrt{8\pi}}\left(1-\frac{1}{2}r\right)e^{-\frac{1}{2}r}.$$

这里只有在二粒子积分 X 和 Y 中稍有困难，其中 $1/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ 可以展开为 $\cos(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的勒让德多项式．在这展开式中只有 P_0 项对积分有贡献，由于 u 和 v 都和极角无关，因此，X 和 Y 中的内积分成为

$$\int d\tau'\frac{u(r')U(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=4\pi\left\{\frac{1}{r}\int_0^r dr'r'^2u(r')v(r')+\int_r^\infty dr'r'u(r')v(r')\right\}.$$

所有其他计算都是初等的，并给出下列结果：

$$S=\frac{2\sqrt{2}\,\alpha^{\frac{3}{2}}(\alpha-1)}{\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)^4};\quad U=\alpha;\quad V=\frac{\alpha^2-\frac{1}{4}}{2(\alpha-1)}S;$$

$$X=\frac{\alpha^3\left(\frac{5}{2}\alpha^2-\frac{15}{4}\alpha+\frac{13}{8}\right)}{\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)^7};$$

$$Y=\frac{66\alpha^6+26\alpha^5-25\alpha^4-16\alpha^3-\frac{23}{8}\alpha^2-\frac{1}{8}\alpha}{2(\alpha-1)\left(3\alpha+\frac{1}{2}\right)^4}S.$$

对于 $\alpha=2.6875$，它们的数值为

$$S=0.203;$$

$$J=-0.030;$$

$U=2.6875$ $\quad [J+(3-\alpha)U]S^2=+0.0334$;

$V=0.419$ $\quad [(5-\alpha)V-2Y]S=+0.0735$;

$X=0.0558$;

$Y=0.303$.

于是在(158.14)分子中，正的两项之和超过负的项$-X$，因此，经过交换修正后得出的锂原子的结合能更小了．得出这个相当令人失望的结果，是由于所选择的$v(r)$在重叠区内实在太小，以致当$2s$电子穿进$1s$核心时作用于它的增加着的有效电荷被略去．这对于前题中未修正的能量只引起小的误差，但对交换修正却有大的影响．因V和Y是重叠乘积uv的线性函数，而X是uv的二次函数，所以当$v(r)$采用较好的近似时，在(158.14)分子里的第三项(负的)会增大很多，而第二项(正的)只会有中等程度的增加．因此，(158.14)的分子可以容易地改变符号．

问题 159　电介质的极化率

设原子的状态为薛定谔方程

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle$$

所描述，它的基态是$|0\rangle$．试确定原子的电介质极化系数α(或者，每立方厘米包含N个原子的物质的极化率χ)．关于碱金属原子的极化系数一般能得出什么结果?

解　如果电场$\mathscr{E}$沿z方向作用于原子上，则它引起的微扰能为

$$W=e\mathscr{E}\sum_{\lambda}z_{\lambda}, \tag{159.1}$$

其中$-e$为电子的电荷，下标λ是原子中电子的号数．于是，方程

$$(H+W)\psi=E\psi \tag{159.2}$$

的解近似地为

$$\psi = |0\rangle + \sum_n{}' \frac{\langle n|W|0\rangle}{E_0 - E_n}|n\rangle$$

或

$$\psi = |0\rangle + e\mathscr{E}\sum_n{}' \frac{\langle n|\sum z_\lambda|0\rangle}{E_0 - E_n}|n\rangle. \tag{159.3}$$

这状态的偶极矩在场方向的分量的期待值为

$$p_z = -e\langle\psi|\sum_\lambda z_\lambda|\psi\rangle. \tag{159.4}$$

在一级近似下，这期待值有两项：

$$p_z = -e\left\{\langle 0|\sum_\lambda z_\lambda|0\rangle + \sum_n{}'\left[\frac{\langle n|W|0\rangle}{E_0 - E_n}\langle 0|\sum_\lambda z_\lambda|n\rangle + \frac{\langle 0|W|n\rangle}{E_0 - E_n}\langle n|\sum_\lambda z_\lambda|0\rangle\right]\right\}.$$

上式中第一项是未受扰态的偶极矩(如果有的话)；第二项是描写场所感生的偶极矩，记作 $p_{感}$；于是原子的极化系数 α 由下式定义：

$$p_{感} = \alpha\mathscr{E}. \tag{159.5}$$

因此得到

$$\alpha = 2e^2\sum_n{}' \frac{|\langle n|\sum z_\lambda|0\rangle|^2}{E_n - E_0}. \tag{159.6}$$

因为 E_0 代表基态能量，从而分母是正的，所以原子的极化系数也是正的.

极化率 χ 和电介质极化强度 $P = Np_{感}$ 以及电场 $\mathscr{E}$ 的关系为：

$$P = \chi\mathscr{E}, \tag{159.7}$$

所以

$$\chi = 2Ne^2\sum_n{}' \frac{|\langle n|\sum z_\lambda|0\rangle|^2}{E_n - E_0} \tag{159.8}$$

且 $\chi > 0$.

对于由一个原子实和实外的单个电子所组成的碱金属原子，将原子实中的电子激发到高能态需要许多能量，因此(159.8)式的分母是大的. 所以，如果粗略一点，只要研究在不受外界影响的原

子实的场中运动的实外电子的激发就足够了. 由于基态 $|0\rangle$ 是与极角无关的 s 态, 故它的本征函数可写为

$$|0\rangle = u(r); \quad |n\rangle = v_n(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi).$$

取

$$z = r\cos\vartheta = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}$$

时, 矩阵元为

$$\langle n|z|0\rangle = \int_0^\infty dr r^3 v_n(r) u(r) \cdot \oint d\Omega Y_{l,m}^* \cos\vartheta.$$

除 $l=1$ 和 $m=0$ 的激发状态外, 这矩阵元为零. 在 $l=1$ 和 $m=0$ 时, 它成为

$$\langle n|z|0\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty dr r^3 v_n(r) u(r).$$

进一步的计算需要知道本征函数径向部分的具体形式.

如果不用无量纲的单位, 容易看出原子的极化系数 α 具有体积的量纲, 因此, 粗略地说, 它具有与 $(\hbar^2/me^2)^3$ 相同的数量级.

注 我们也可以从二级斯塔克效应的能移

$$\Delta_2 E = \sum_n' \frac{|\langle 0|W|n\rangle|^2}{E_0 - E_n}$$

来计算. 这能移必须等于 $-\frac{1}{2}\alpha\mathscr{E}^2$. 由此得到的 α 与上面的结果相同.

问题 160 氖的抗磁磁化率

试计算氖 ($Z=10$) 的抗磁磁化率, 计算中采用具有不同屏蔽常数 σ_{nl} 的类氢波函数. 屏蔽常数可以用下列数值:

$$\sigma_{1,0}=0.23 \quad \sigma_{2,0}=3.26 \quad \sigma_{2,1}=4.11.$$

解 抗磁磁化率 (每克分子的) 由公式 [参看 (128.14)]

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} N \sum \langle r^2 \rangle \tag{160.1}$$

给出, 其中 N 是洛喜密脱数 ($N=6.02\times10^{23}$), Σ 表示对一个原子

(或分子)中的所有电子求和. 在本征函数为

$$u_{n,l,m}=\frac{1}{r}\chi_{n,l}(r)Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$$

的态中，r^2 的期待值由积分

$$\langle r^2\rangle=\int_0^\infty dr\,r^2|\chi_{n,l}|^2 \tag{160.2}$$

给出. 类氢波函数的径向部分可从问题 67 的表中用 $Z-\sigma$ 代替 Z 而得到. 如果用 $(\hbar^2/me^2)^2$ 为单位，则积分(160.2)的数值结果为①

$$\begin{array}{cccc} \text{当}(n,\ l)= & (1,\ 0) & (2,\ 0) & (2,\ 1)\text{时}, \\ (Z-\sigma)^2\langle r^2\rangle= & 3 & 42 & 30 \end{array}.$$

这结果可以用初等积分来检验. 对应于这三个 (n, l) 态的电子数分别为 2, 2, 6. 磁化率的数量级决定于因子

$$\chi_0=\frac{e^2}{6mc^2}N\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2=0.790\times10^{-6}\text{厘米}^3/\text{克分子}. \tag{160.3}$$

因此，氖的磁化率是

$$\begin{aligned}\chi_{Ne}&=-\chi_0\left\{\frac{2\cdot3}{(10-\sigma_{1,0})^2}+\frac{2\cdot42}{(10-\sigma_{2,0})^2}+\frac{6\cdot30}{(10-\sigma_{2,1})^2}\right.\\&=-5.61\times10^{-6}\text{厘米}^3/\text{克分子}.\end{aligned} \tag{160.4}$$

这结果和实验值

$$\chi_{Ne}=-6.7\times10^{-6}\text{厘米}^3/\text{克分子}$$

是相近的.

(160.4)式中各项的值(以厘米^3/克分子为单位)依次为

---

① 这些是下面的一般关系的特殊情况

$$\langle r^2\rangle=\frac{n^2}{2Z^2}\{5n^2+1-3l(l+1)\}$$

这个关系式的推导是麻烦和乏味的. 详见 Bethe, H. A., Salpeter, E. E., *Encyclopedia of Physics*, vol. **35**(1957), p. 103.

$$\chi(1s) = -0.05\times10^{-6},$$

$$\chi(2s) = -1.46\times10^{-6}$$

和

$$\chi(2p) = -4.10\times10^{-6},$$

值得注意的是在这三项中最外面的(nl)支壳层对磁化率的贡献最大. 可惜最外层电子的屏蔽效应不仅很大，而且在实验上是相当不确定的.

问题 161 范德瓦耳斯引力

两个处于基态的氢原子间的距离为 R. 假定原子核是静止的. 试证明：用一级微扰计算时，两原子间的相互作用为零；二级近似得出范德瓦耳斯引力. 哈密顿量中的相互作用部分只用到和 R 的负一次幂成正比的首项(大距离近似).

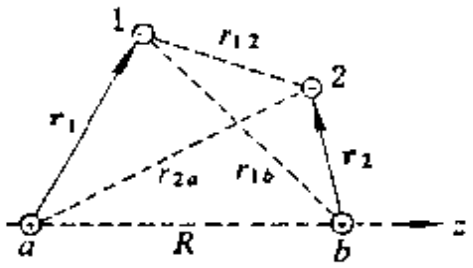


图 63 记号. 用虚线表示的距离是(161.3)式的相互作用中用到的

解 设电子 1 和原子核 a 之间的距离是 r_1，它的分量是 $x_1y_1z_1$；电子 2 和原子核 b 之间的距离是 r_2，它的分量是 $x_2y_2z_2$. z 方向和原子核的轴线一致(见图 63). 把原子核看作是静止的，即用玻恩-奥本海默(Born-Oppenheimer)近似，则哈密顿算符为

$$H = H^0 + H' \tag{161.1}$$

其中

$$H^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \tag{161.2}$$

是描写两个独立原子的，而

$$H' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \tag{161.3}$$

则代表两个原子间的相互作用. 取 H' 作为微扰能. 如将 H' 展开为 R 负幂的级数(即 $r_1 \ll R$ 和 $r_2 \ll R$)，则大距离的主要项来源

于分别具有偶极距 $\boldsymbol{p}_1=-e\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2=-e\boldsymbol{r}_2$ 的两个偶极子 a1 和 b2 的相互作用，即

$$H'=\frac{\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2}{R^3}-3\frac{(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{R})(\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{R})}{R^5}. \tag{161.4}$$

用坐标表示，(161.4) 成为

$$H'=\frac{e^2}{R^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2). \tag{161.5}$$

下面计算中将用到这个表示式.

设 $u_0(r)$ 是原子基态波函数，则整个系统的零级波函数是乘积

$$U(1,\ 2)=u_0(r_1)u_0(r_2), \tag{161.6}$$

这里没有考虑对称化，因为在大距离上交换贡献指数地趋于零，可不考虑.

在零级近似中，系统的能量是两个原子能量之和. 在一级近似中要加上

$$E'=\langle U|H'|U\rangle=0.$$

这一项必须等于零，是容易看出来的. 例如，取 (161.5) 中的第一项，有

$$\frac{e^2}{R^3}\langle U|x_1x_2|U\rangle=\frac{e^2}{R^3}\langle u_0|x|u_0\rangle^2=\frac{e^2}{R^3}\left\{\int d\tau u_0^2(r)x\right\}^2,$$

这些积分描述球对称原子状态的偶极矩，它们确是等于零的①.

二级微扰能量是

$$E''=\sum_n{}'\frac{|\langle 0|H'|n\rangle|^2}{E_0-E_n}, \tag{161.7}$$

其中求和遍及全部激发态，0 代表基态. 因 $E_n>E_0$，式中所有分

① 当两个原子处于相同的态时，这些积分不仅在 S 态时为零，而且永远等于零，见下题. 即使两个原子都处于激发态时，$|u_0|^2$ 与极角的关系也是球谐函数的平方. 它可以分解为只含偶阶的球谐函数之和. 在被积函数中含有坐标 x，y 或 z 因子，即含有一阶的，也总是奇阶的球谐函数. 球谐函数的正交性质使得乘积积分等于零.

母都是负的，于是 $E''<0$，故相互作用是引力．矩阵元只通过(161.5)式中的常数因子 R^{-3} 与 R 有关，并且这个因子位于所有积分的前面．所以 E'' 的形式必定是

$$E''=-\frac{C}{R^3},$$

其中 C 是正的常数．这正是著名的范德瓦耳斯引力对距离的关系式．

文献 Schiff, L. I.: *Quantum Mechanics*. New York 1949, pp. 174—178.

问题 162 激发简并度

两个静止的氢原子，相互间距离为 R，处于不同的量子态，一个在基态，另一个在 P 态．如上题所推导的，它们间有偶极-偶极相互作用．试证明即使在本征函数的重迭仍可忽略的大距离处，系统的一级微扰能量也不为零．试计算一级微扰能．

解 设 $|lm\rangle$ 代表量子数为 l 和 m 的原子波函数，于是基态可表示为 $|00\rangle$，三个可能的 P 态表示为 $|1m\rangle$，其中 $m=1,\ 0,\ -1$．因此，以乘积形式表示的系统的零级波函数为

$$|00,\ 1m\rangle \quad 和 \quad |1m,\ 00\rangle, \tag{162.1}$$

上式中第一对量子数属于第一个原子，第二对量子数属于第二个原子．

可以采用(161.5)式的微扰能量．引进符号

$$\xi=x+iy, \qquad \xi^{\dagger}=x-iy \tag{162.2}$$

(161.5)式可化为

$$H'=\frac{e^2}{2R^3}(\xi_1\xi_2^{\dagger}+\xi_1^{\dagger}\xi_2-4z_1z_2). \tag{162.3}$$

这算符是各个电子坐标的线性函数，只有当两个电子中的每一个

的 S 态和 P 态都组合在一起①时，这算符才有异于零的由(162.1)型函数组成的矩阵元. 这些矩阵元是

$$\langle 1m_1,\ 00|H'|00,\ 1m_2\rangle \text{ 和 } \langle 00,\ 1m_2|H'|1m_1,\ 00\rangle.$$

(162.3)式所示的 H' 的双线性结构使得这些矩阵元可分解为原子的矩阵元：

$$\langle 1m_1,\ 00|H'|00,\ 1m_2\rangle = \frac{e^2}{2R^3}\{\langle 1m_1|\xi|00\rangle\langle 00|\xi^\dagger|1m_2\rangle + \langle 1m_1|\xi^\dagger|00\rangle\langle 00|\xi|1m_2\rangle - 4\langle 1m_1|z|00\rangle\langle 00|z|1m_2\rangle\}. \tag{162.4}$$

用 $f_l(r)$ 表示原子波函数的径向部分，并采用缩写

$$r_0 = \int_0^\infty dr r^3 f_0(r) f_1(r), \tag{162.5}$$

于是(162.4)中非零的积分是

$$\begin{aligned} \langle 11|\xi|00\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}\, r_0; & \langle 00|\xi|0-1\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\, r_0; \\ \langle 1-1|\xi^\dagger|00\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\, r_0; & \langle 00|\xi^\dagger|11\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}\, r_0; \\ \langle 10|z|00\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}\, r_0; & \langle 00|z|10\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}\, r_0. \end{aligned} \tag{162.6}$$

对于量子数的所有其他组合，矩阵元都等于零. 于是，(162.4)式成为

$$\langle 1m_1,\ 00|H'|00,\ 1m_2\rangle = \frac{e^2 r_0^2}{2R^3}\left\{\frac{2}{3}\delta_{1,m_1}\delta_{1,m_2} + \frac{2}{3}\delta_{-1,m_1}\delta_{-1,m_2} - \frac{4}{3}\delta_{0,m_1}\delta_{0,m_2}\right\}. \tag{162.7}$$

因此，只有当 $m_1 = m_2$ 时，矩阵元(162.7)才不等于零.

现在，把六个简并的零级波函数(162.1)的久期行列式写出来.

① 具有偶 l 和奇 $l' = l \pm 1$ 的任何态都会有耦合，例如，P-D 耦合. 然而，这已超出(162.1)式的适用范围.

设 E' 是一级微扰能，所用的六个波函数的次序是

$$|00,\ 11\rangle;\ |11,\ 00\rangle;\ |00,\ 10\rangle;\ |10,\ 00\rangle;$$
$$|00,\ 1-1\rangle;\ |1-1,\ 00\rangle$$

则久期方程为

$$\begin{vmatrix} -E' & \frac{2}{3}\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3}\varepsilon & -E' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E' & -\frac{4}{3}\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\varepsilon & -E' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -E' & \frac{2}{3}\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}\varepsilon & -E' \end{vmatrix} = 0 \qquad (162.8)$$

其中

$$\varepsilon = \frac{e^2 r_0^2}{2R^3}. \qquad (162.9)$$

这行列式可分解为三个 2×2 的行列式，从而使计算大为简化，立即可得出附表中的结果．表中 Λ 代表两个原子的 m 值之和，也就

态	Λ	波函数(非归一化的)	E'
Π_g	1	$\|00,\ 11\rangle+\|11,\ 00\rangle$	$+\frac{2}{3}\varepsilon$
Π_u	1	$\|00,\ 11\rangle-\|11,\ 00\rangle$	$-\frac{2}{3}\varepsilon$
Σ_g	0	$\|00,\ 10\rangle+\|10,\ 00\rangle$	$-\frac{4}{3}\varepsilon$
Σ_u	0	$\|00,\ 10\rangle-\|10,\ 00\rangle$	$+\frac{4}{3}\varepsilon$
Π_g	−1	$\|00,\ 1-1\rangle+\|1-1,\ 00\rangle$	$+\frac{2}{3}\varepsilon$
Π_u	−1	$\|00,\ 1-1\rangle-\|1-1,\ 00\rangle$	$-\frac{2}{3}\varepsilon$

是代表总的电子轨道角动量沿原子核轴线的分量. 所用的分类记号是分子光谱学的记号，记号 Σ 和 Π 分别代表 $\Lambda=0$ 和 ±1，脚标 g 和 u 表示波函数的偶和奇. 具有相同能量的两个 Π_g 态仍是简并的，两个 Π_u 态也是简并的. 最后一栏列出用 ε 的倍数表示的相互作用能 E'.

引入用原子单位表示的氢原子波函数(见 67 题)

$$f_0=2e^{-r};\quad f_1=\frac{\sqrt{6}}{12}re^{-r/2},$$

可计算出(162.5)式的积分 r_0，所得结果是

$$r_0=\sqrt{6}\cdot\frac{128}{243}, \tag{162.10}$$

并从(162.9)式得

$$\varepsilon=\frac{16384}{19683}\frac{e^2a_0^2}{R^3}, \tag{162.11}$$

其中 a_0 为玻尔半径. 可见，在所有的态中，相互作用能 E' 正比于 R^{-3}；随着距离 R 的增大，它比范德瓦耳斯能($\propto R^{-6}$)减小得慢，因而在大距离处(即大 R 处)它是起支配作用的能量项. 两原子间相互作用的符号还与系统的态有关，在 Σ_u 和 Π_g 态中为斥力，而在 Σ_g 和 Π_u 态中则为引力.

文献 Herzberg, G.: *Spectra of diatomic molecules*, p. 378. Landau-Lifschitz: *Quantum Mechanics*, p. 302. Margenau, H.: Rev. Modern Phys. **11**, 1(1939). King, G. W., Van Vleck, J. H.: Phys. Rev. **55**, 1165(1939).

问题 163 中性氢分子

用类似于 44 题处理 H_2^+ 的方法，试求中性氢分子的结合能和平衡距离.

解 这是固定原子核的玻恩-奥本海默近似的二体问题. 如以 a 和 b 代表两个原子核(质子)，1 和 2 代表两个电子，则用原子

单位表示的哈密顿算符为

$$H=-\frac{1}{2}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)+\frac{1}{r_{12}}$$
$$-\left(\frac{1}{r_{a1}}+\frac{1}{r_{b1}}+\frac{1}{r_{a2}}+\frac{1}{r_{b2}}\right)+\frac{1}{R}, \qquad (163.1)$$

其中 R 为原子核间的距离. 当距离 R 大时，波函数应过渡为两个分离原子的波函数的乘积. 当电子 1 和原子核 a，电子 2 和原子核 b 各自组成原子时，波函数为 $f(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b2})$，如把两个电子位置互换，则波函数为 $f(\boldsymbol{r}_{b1})f(\boldsymbol{r}_{a2})$. 在 R 为有限距离时，一个合理的近似是将两个这样的乘积线性组合起来，并从对称性考虑，选择

$$U(1,\ 2)=\alpha[f(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b2})+f(\boldsymbol{r}_{b1})f(\boldsymbol{r}_{a2})] \qquad (163.2)$$

作为基态(按照泡利原理，在基态中电子自旋是反平行的)的对称解. 反对称的组合也是本征函数，它会导致较大的能量，但没有吸引，因而根本不能形成分子.

如果将(163.2)代入薛定谔方程

$$HU=EU, \qquad (163.3)$$

其中 H 是哈密顿算符(163.1)，则得到

$$F(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b2})+f(\boldsymbol{r}_{a1})F(\boldsymbol{r}_{b2})$$
$$+\left[\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{b1}}-\frac{1}{r_{a2}}-E+\frac{1}{R}\right]f(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b2})$$
$$+F(\boldsymbol{r}_{b1})f(\boldsymbol{r}_{a2})+f(\boldsymbol{r}_{b1})F(\boldsymbol{r}_{a2})$$
$$+\left[\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{a1}}-\frac{1}{r_{b2}}-E+\frac{1}{R}\right]f(\boldsymbol{r}_{b1})f(\boldsymbol{r}_{a2})=0, \qquad (163.4)$$

其中 F 代表缩写

$$F(\boldsymbol{r}_{a1})=\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{1}{r_{a1}}\right)f(\boldsymbol{r}_{a1}). \qquad (163.5)$$

现在将算符 $\int d\tau_1\int d\tau_2 f^*(\boldsymbol{r}_{a1})f^*(\boldsymbol{r}_{b2})\cdots$

作用于(163.4)式. 假定函数 f 是归一化的. 用缩写

$$S=\int d\tau_1 f^*(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b2}) \tag{163.6}$$

表示重叠积分；用缩写

$$\mathscr{C}=\int d\tau_1 \frac{1}{r_{b1}}|f(\boldsymbol{r}_{a1})|^2 \tag{163.7}$$

和

$$\mathscr{C}'=\iint d\tau_1 d\tau_2 \frac{1}{r_{12}}|f(\boldsymbol{r}_{a1})|^2|f(\boldsymbol{r}_{b2})|^2 \tag{163.8}$$

表示经典相互作用积分；用缩写

$$\mathscr{E}=\int d\tau_1 \frac{1}{r_{a1}}f^*(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b1}) \tag{163.9}$$

和

$$\mathscr{E}'=\iint d\tau_1 d\tau_2 \frac{1}{r_{12}}f^*(\boldsymbol{r}_{a1})f(\boldsymbol{r}_{b1})f(\boldsymbol{r}_{a2})f^*(\boldsymbol{r}_{b2}) \tag{163.10}$$

表示交换积分；用缩写

$$A=\int d\tau_1 f^*(\boldsymbol{r}_{a1})F(\boldsymbol{r}_{a1}) \tag{163.11}$$

和

$$A'=\int d\tau_1 f^*(\boldsymbol{r}_{a1})F(\boldsymbol{r}_{b1}) \tag{163.12}$$

表示余下的两个积分，这样，我们就可得到

$$\begin{aligned}&2(A+A'S)-2(\mathscr{C}+\mathscr{E}S)+(\mathscr{C}'+\mathscr{E}')\\&=\left(E-\frac{1}{R}\right)(1+S^2)\end{aligned} \tag{163.13}$$

或

$$E=2\frac{A+A'S}{1+S^2}-\frac{2(\mathscr{C}+\mathscr{E}S)-(\mathscr{C}'+\mathscr{E}')}{1+S^2}+\frac{1}{R}. \tag{163.14}$$

现在采用类似于 44 题中用于 H_2^+ 的方法，令

$$f(\boldsymbol{r})=\sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}}e^{-\gamma r} \tag{163.15}$$

当 $\gamma=1$ 时，这是原子基态的波函数，如将 γ 作为变分的里兹参数，还可得到较好的近似．针对(163.15)的波函数形式，按照(163.5)式，可得

$$F(\boldsymbol{r}_{a1})=\left(-\frac{1}{2}\gamma^2+\frac{\gamma-1}{r_{a1}}\right)f(\boldsymbol{r}_{a1})$$

所以(163.11)和(163.12)给出

$$A=-\frac{1}{2}\gamma^2+\gamma(\gamma-1);\quad A'=-\frac{1}{2}\gamma^2S+(\gamma-1)\mathscr{E},\tag{163.16}$$

进一步可以证明重叠积分 S 只和组合

$$\rho=\gamma R\tag{163.17}$$

有关，它可作为除 γ 外的第二个里兹参数，其余四个相互作用积分全都正比于 γ．因此可写为

$$\mathscr{C}=\gamma\overline{\mathscr{C}}(\rho);\quad \mathscr{C}'=\gamma\overline{\mathscr{C}'}(\rho);\quad \mathscr{E}=\gamma\overline{\mathscr{E}}(\rho);\quad \mathscr{E}'=\gamma\overline{\mathscr{E}'}(\rho).\tag{163.18}$$

于是能量表达式(163.14)成为

$$E=-a\gamma+b\gamma^2\tag{163.19}$$

其中

$$a(\rho)=\frac{2(1+\overline{\mathscr{C}})+4S\overline{\mathscr{E}}-(\overline{\mathscr{C}'}+\overline{\mathscr{E}'})}{1+S^2}-\frac{1}{\rho}\tag{163.20}$$

和

$$b(\rho)=\frac{1-S^2+2S\overline{\mathscr{E}}}{1+S^2}\tag{163.21}$$

只同 ρ 有关．因此，当

$$\frac{\partial E}{\partial\gamma}=-a+2b\gamma=0$$

或

$$\gamma=\frac{a}{2b}\tag{163.22}$$

时，得到能量极小值．将(163.22)代入(163.19)，即得

$$E=-\frac{a^2}{4b} \tag{163.23}$$

剩下的问题是计算(163.6–10)的五个积分. 在44题 H_2^+ 问题中已计算过其中的三个,即

$$S=\left(1+\rho+\frac{1}{3}\rho^2\right)e^{-\rho},$$

$$\overline{\mathscr{C}}=\frac{1}{\rho}[1-(1+\rho)e^{-2\rho}],$$

$$\overline{\mathscr{E}'}=(1+\rho)e^{-\rho}.$$

积分 $\mathscr{C}'$ 是有点难的,但仍能用初等方法算出. 计算中采用以 b 为原点,$b1$ 为极轴的球极坐标,首先对电子2的坐标积分:

$$\frac{1}{\pi}\int d\tau_2\frac{1}{r_{12}}e^{-2r_{b2}}=\overline{\mathscr{C}}(\boldsymbol{r}_{b1}).$$

然后对电子1积分,从而得出一些已知的积分,只是有些在指数中有因子2. 所得结果是

$$\overline{\mathscr{C}'}=\frac{1}{\rho}\left[1-\left(1+\frac{11}{8}\rho+\frac{3}{4}\rho^2+\frac{1}{6}\rho^3\right)e^{-2\rho}\right].$$

然而,最后的积分 $\mathscr{E}''$ 遇到的困难是不易克服的,它无法化为初等积分. 索吉拉(Sugiura)最先计算了这个积分,得到的结果是

$$\overline{\mathscr{E}''}=\left[\frac{5}{8}+\frac{23}{20}\rho+\frac{3}{5}\rho^2+\frac{1}{15}\rho^3\right]e^{-2\rho}-\frac{6}{5}\frac{\varphi(\rho)}{\rho},$$

其中

$$\varphi(\rho)=S(\rho)^2(\log\rho+C)-S(-\rho)^2E_1(4\rho)$$
$$+2S(\rho)S(-\rho)E_1(2\rho).$$

上式中的

$$E_1(z)=\int_z^\infty\frac{dt}{t}e^{-t}$$

是指数积分. 不难看出,对于大的 r,积分 $\overline{\mathscr{E}''}$ 象 $e^{-2\rho}$ 般地趋向零,而且在 $\rho=0$ 时,它有极限值 $\overline{\mathscr{E}''}(0)=\frac{5}{8}$,这和氦基态(相当于核

ρ	γ	E	I
1.3	1.145	1.130	1.133
1.4	1.152	1.127	1.214
1.5	1.160	1.131	1.293
1.6	1.164	1.137	1.374
1.7	1.166	1.139	1.458
1.8	1.164	1.137	1.546
1.9	1.161	1.133	1.635
2.0	1.156	1.129	1.730

距离为零的情况)的理论相符(参见 154 题).

数值计算的结果列于上表. 分子结合能在 $R=1.46$ 原子单位时有极大值. $R=1.46$ 原子单位相当于平衡距离 $R_0=0.77$ Å (它的实验值是 0.742 Å). 于是能量 $E=-1.139$, 这和处于基态的两个单独的氢原子的结合能 $2E_0=-1$ 是相近的. 如果分子振动的零点能用 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 表示, 则离解能是

$$D=2E_0-\left(E+\frac{1}{2}\hbar\omega\right)=0.139-\frac{1}{2}\hbar\omega.$$

零点能可以用和 44 题 H_2^+ 情况下相同样的步骤来确定. 但是, 由下表来确定极小值附近的能量抛物线, 其精确度却要差得多. 然而, 我们得到的零点能接近于 0.010 原子单位或 0.27 电子伏特, 误差约 ±5%, 这与实验值($\hbar\omega=0.54$ 电子伏特)是完全一致的. 这样得出离解能是

$$D=0.138 \text{ 原子单位}=3.75 \text{ 电子伏特},$$

而实验值是 $D=4.45$ 电子伏特. 正如我们对 H_2^+ 问题的类似情况所作的解释, 这里理论与实验的符合是不怎么坏的.

注 应该提及的是, 对大距离的 R 或 ρ, 参数 γ 趋于 1, 而函数 f 趋向于原子的基态波函数. 在原始的海特勒-伦敦方法里, 这个数值是自始至终一样的, 所以那里没有里兹参数 γ. 用那个较粗糙的图象得出的离解能只有

2.90 电子伏特，平衡距离为 0.88 Å．从表上看，当两个原子作绝热接近时，γ 增加，这说明在结合中它们的电子波函数的收缩．

文献 Heiter, W., London, F.: Z. Physik **44**, 455(1927). ——积分 $\mathscr{E}'$ 的计算见 Sugiura, Y.,Z. Physik **45**, 484(1927).——γ 的变分见 Wang, S. C., Phys. Rev. **31**, 579(1928); Rosen, N.; Phys. Rev. **38**, 2099(1931).——较好的变分近似法见 James, H. M., Coolidge, A. S., J. Chem. Phys. **1**, 825(1933); **3**, 129(1935).

问题 164　全同粒子的散射

一束带有电荷 e 的粒子与静止的同类粒子的靶相碰，试将散射的角分布与经典物理中所得的角分布作一比较，在比较中要正确选取波函数的对称性，并对自旋为 0、$\frac{1}{2}$ 和 1 的非极化粒子的散射进行讨论．

解　在 110 题中已导出质心坐标系中的卢瑟福散射振幅．它是

$$f(\vartheta)=-\frac{\varkappa^*}{2k^*}e^{2i\eta_0}\frac{e^{-i\varkappa^*\log\sin^2\frac{\vartheta}{2}}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}};\qquad \eta_0=\Gamma(1+i\varkappa^*),\tag{164.1}$$

这里的缩写 $\varkappa^*$ 和 k^* 系指质心系中的值，

$$\varkappa^*=\frac{e^2}{\hbar v};\quad k^*=\frac{m^*v}{\hbar};\quad E^*=\frac{\hbar k^{*2}}{2m^*}\tag{164.2}$$

其中 m^* 是约化质量．对两个全同的粒子，$m^*=\frac{1}{2}m$．两个粒子的相对运动 v 与坐标系无关．所以，如果 $\varkappa$、k 和 E 是实验室坐标系中的值，可得

$$\varkappa^*=\varkappa;\quad k^*=\frac{1}{2}k;\quad E^*=\frac{1}{2}E\tag{164.3}$$

因此

$$f(\vartheta)=-\frac{\varkappa}{k}\,e^{2i\gamma_0}\,\frac{e^{-i\varkappa\log\sin^2\frac{\vartheta}{2}}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}};\quad \gamma_0=\Gamma(1+i\varkappa).\tag{164.4}$$

又,对于质量相等的粒子可得出在实验室系中的偏转角 Θ 为

$$\Theta=\frac{1}{2}\vartheta,\tag{164.5}$$

其中 ϑ 是质心系中的角. 于是立体角元按

$$\begin{aligned}d\omega&=2\pi\sin\vartheta\,d\vartheta=2\pi\cdot 4\cos\Theta\sin\Theta\,d\Theta\\&=4\cos\Theta\,d\Omega\end{aligned}\tag{164.6}$$

变换,实验室系的微分卢瑟福截面则为

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega}=4\cos\Theta\left(\frac{\varkappa}{k}\right)^2\frac{1}{\sin^4\Theta},$$

其中

$$\frac{\varkappa}{k}=\frac{e^2}{mv^2}=\frac{e^2}{2E}.\tag{164.7}$$

即使从经典力学看,这公式也必须作一个重要的修正. 因为在同类粒子间的散射,不可能将散射粒子和反冲粒子区别开来,在散射截面中两者必然加在一起. 因为按照(164.5)式两种粒子所走的路线是相互垂直的,反冲粒子沿 $\frac{\pi}{2}-\Theta$ 角由靶发出,并且得到代替(164.7)的式子

$$\frac{d\sigma_{经典}}{d\Omega}=4\cos\Theta\left(\frac{\varkappa}{k}\right)^2\left\{\frac{1}{\sin^4\Theta}+\frac{1}{\cos^4\Theta}\right\}.\tag{164.8}$$

这是经典表达式. 现在来推导量子力学的散射截面表达式,然后将二者加以比较.

按照量子理论,我们不必迭加强度(即截面),只要将振幅迭加起来就可以了. 设 $u(\boldsymbol{r})$ 是质心系中的未对称化的波函数,其中 $\boldsymbol{r}$ 是相对坐标矢量. 不考虑对数相位时,它的渐近行为是

$$u(\boldsymbol{r})\to e^{ikz}+f(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r}.$$

平面波部分可写为

$$e^{ik'(z_1-z_2)},$$

它描述一个粒子以 $+\frac{1}{2}v$ 的速度而另一粒子以 $-\frac{1}{2}v$ 的速度沿 z 方向运动，如果迭加上质心运动的因子

$$e^{ik'(z_1+z_2)},$$

则粒子 2 成为静止的(靶粒子)，而留下粒子 1 按 $e^{2ik'z_1}=e^{ikz_1}$ 运动(入射粒子)。以上适用于二粒子体系的未对性化的波函数。波函数的对称化是指用

$$u(\boldsymbol{r})+\varepsilon u(-\boldsymbol{r})$$

来代替 $u(\boldsymbol{r})$，式中 $\varepsilon=\pm1$。对于渐近的球面波部分，波函数的对称化是指用

$$f(\vartheta)+\varepsilon f(\pi-\vartheta)$$

来代替 $f(\vartheta)$，而 $\boldsymbol{r}$ 保持不变。因此，对(164.4)作了这种替代以后，就得到

$$f(\vartheta)+\varepsilon f(\pi-\vartheta)=-\frac{e^2}{mv^2}e^{2i\eta_0}\left\{\frac{e^{-ik\log\sin^2\frac{\vartheta}{2}}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}}+\varepsilon\frac{e^{-ik\log\cos^2\frac{\vartheta}{2}}}{\cos^2\frac{\vartheta}{2}}\right\}\tag{164.9}$$

而且，代替经典的截面公式(164.8)，得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\cos\Theta\left(\frac{e^2}{mv^2}\right)^2\left|\frac{e^{-ik\log\sin^2\Theta}}{\sin^2\Theta}+\varepsilon\frac{e^{-ik\log\cos^2\Theta}}{\cos^2\Theta}\right|^2.\tag{164.10}$$

上式经过计算后给出

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\cos\Theta\left(\frac{e^2}{mv^2}\right)^2\times\left\{\frac{1}{\sin^4\Theta}+\frac{1}{\cos^4\Theta}+\varepsilon\frac{2\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\log\tan^2\Theta\right)}{\sin^2\Theta\cos^2\Theta}\right\},\tag{164.11}$$

比经典表式多了一个干涉项．在比较量子理论的截面和经典的截面时，下式所示的比值可能是有用的：

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{经典}}}=1+s\frac{2\tan^2\Theta\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\log\tan^2\Theta\right)}{1+\tan^4\Theta}. \quad (164.12)$$

作为最后一步，必须决定非极化束的哪一部分是对称的，哪一部分是反对称的．如果散射粒子是自旋 $\frac{1}{2}$ 的费密子（两个质子或两个电子），则它们的总的波函数就必须是反对称的．自旋对称、空间反对称的三重态的权重是 $\frac{3}{4}$，而对称性相反的单态的权重是 $\frac{1}{4}$，因此得出

$$d\sigma=\frac{3}{4}d\sigma_{-}+\frac{1}{4}d\sigma_{+},$$

其中脚标的符号指(164.11)中 e 的正负号．所以，在这样的情况下，非极化束实验给出

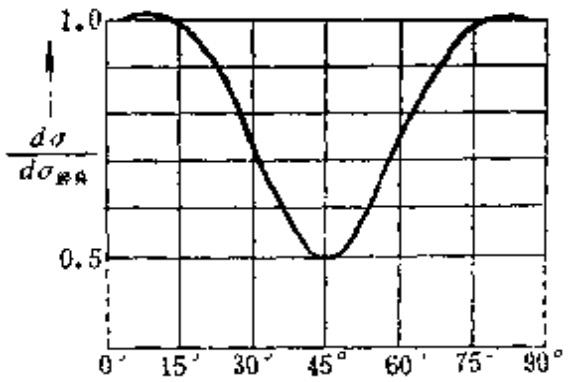


图 64　两个全同费密子的散射．图中示出量子理论的和经典的散射强度之比与散射角的关系．曲线在 0° 和 90° 间还有无限个振幅逐步下降的振动

$$s_{\text{相对}}=-\frac{3}{4}+\frac{1}{4}=-\frac{1}{2}$$

从而

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{经典}}}=1-\frac{\tan^2\Theta\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\log\tan^2\Theta\right)}{1+\tan^4\Theta}. \quad (164.13)$$

这函数画在图 64 中，是能量 $E=100$ 千电子伏的质子-质子散射的情况．这个能量接近于不发生显著反常散射的最高能量．这种反常散射是由于质子间的短程核引力所引起的（参见下题）．在这个能量上，对于质子 $s=0.50$，函数(164.13)在 $\Theta\to\frac{\pi}{2}-\Theta$ 的变

换下是不变的. 因此只需要计算在 $0<\Theta\leqq 45^\circ$ 范围里的值. 在低得多的能量值时, $\varkappa$ 将大到使得 $\cos(\varkappa\log\tan^2\Theta)$ 在这范围里有几个振动. 最后, 当 $\varkappa$ 很大时, 这些振动就快到在实验上无法分辨, 所以只剩下经典表达式.

如果粒子是无自旋的玻色子(例如两个 α 粒子或两个 π 介子), 则只有 $s=+1$ 的空间对称态. 当然, 对于 α 粒子, e^2 必须用 $4e^2$ 代替. 如果粒子是自旋为 1 的玻色子(例如两个氘核), 则总自旋可能是 2 $\left(\text{权重 }\frac{5}{9}\right)$、1 $\left(\text{权重 }\frac{3}{9}\right)$和 0 $\left(\text{权重 }\frac{1}{9}\right)$, 在总自旋为 2 和 0 时, 具有空间对称态. 于是得到

$$\varepsilon_{\text{有效}}=\left(\frac{5}{9}+\frac{1}{9}\right)-\frac{3}{9}=+\frac{1}{3}$$

从而

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{经典}}}=1+\frac{2}{3}\,\frac{\tan^2\Theta\cos\left(\dfrac{e^2}{\hbar v}\log\tan^2\Theta\right)}{1+\tan^4\Theta}. \qquad (164.14)$$

文献 最先应用经典对称化的表式(164.8)的是 Darwin, C. G.: Proc. Roy. Soc. London, **A120**, 631(1928). 推导出量子力学公式的是 Mott, N. F., 同上杂志 **A126**, 259 (1930). 这公式在实验上得到了证实, 用于 α 粒子得到结果的作者和文献是: Chadwick, J.: Proc. Roy. Soc. London, **A128**, 114(1930); Blackett, P. M. S., Champion, F. C., 同上杂志: **130**, 380(1931); 用于质子得到结果的作者和文献是: Gerthsen, C.: Ann. Physik, **9**, 769 (1931).

问题 165 反常质子-质子散射

两个质子间的短程核力所产生的引力是引起能量在约 100 千电子伏以上的散射的反常现象的原因. 试用分波 $l=0$ 的附加相移 δ_0 来描述反常现象.

解 在 112 题中我们已处理了未经对称化的带电粒子的反常

散射，并导出在质心坐标系中的(112.6)式，即

$$f(\vartheta)=-\frac{\varkappa}{2k^*\sin^2\frac{\vartheta}{2}}e^{-i\varkappa\log\sin^2\frac{\vartheta}{2}}+\frac{1}{2ik^*}(e^{2i\delta_0}-1).$$

(165.1)

引用缩写

$$f(\vartheta)=f_R(\vartheta)+f_a, \tag{165.2}$$

其中第一项描述库仑场的卢瑟福散射，第二项是反常振幅：

$$f_a=\frac{1}{2ik^*}(e^{2i\delta_0}-1)=\frac{1}{k^*}e^{i\delta_0}\sin\delta_0. \tag{165.3}$$

于是，当取

$$k^*=\frac{1}{2}k;\quad \frac{1}{2}\vartheta=\Theta \tag{165.4}$$

时，从上题可知，由对称化可引导出关系式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\cos\Theta\left\{\frac{3}{4}|f(\vartheta)-f(\pi-\vartheta)|^2+\frac{1}{4}|f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)|^2\right\}$$

(165.5)

或

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\cos\Theta\left\{\frac{3}{4}|f_R(\vartheta)-f_R(\pi-\vartheta)|^2\right.$$
$$\left.+\frac{1}{4}|f_R(\vartheta)+f_R(\pi-\vartheta)+2f_a|^2\right\}. \tag{165.6}$$

在(165.6)中的第一个平方里，与 ϑ 无关的反常振幅已消去. 值得注意的是，即使对于较高的能量，较高的角动量对 f_a 有贡献，因此

$$f_a=\frac{1}{2ik^*}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{2i(\eta_l-\eta_0)}(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\vartheta),$$

但由于

$$P_l(\cos(\pi-\vartheta))=(-1)^lP_l(\cos\vartheta),$$

所以在三重项中，偶 l 的全部贡献都消去，在单重项中奇 l 的全部贡献也都消去，因此，只有来自

$$^1S,\ ^3P,\ ^1D,\ ^3F,\ ^1G,\ \cdots$$

等项的贡献. 这结果和将泡利原理分别用到每一个分波上所得的结果完全一致($^3S,\ ^1P,\ \cdots$ 是禁戒的).

如果将绝对平方项计算出来，(165.6)式就成为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4\cos\Theta\{|f_R(\vartheta)|^2+|f_R(\pi-\vartheta)|^2$$
$$-\mathrm{Re}[f_R(\vartheta)f_R^*(\pi-\vartheta)]+\mathrm{Re}[f_cf_R^*(\vartheta)]$$
$$+\mathrm{Re}[f_cf_R^*(\pi-\vartheta)]+|f_c|^2\}. \qquad (165.7)$$

上式第一行诸项代表前题所讨论的库仑散射；第二行的前两项是库仑散射和反常散射的干涉项；最后一项是反常散射本身. 根据前面对记号 f_R 和 f_c 的定义[见(165.1–3)]，易于算出这最后三项：

$$\mathrm{Re}[f_cf_R^*(\vartheta)]=-\frac{2\varkappa}{k^2}\frac{\sin\delta_0}{\sin^2\Theta}\cos(\delta_0+\varkappa\log\sin^2\Theta);$$

$$\mathrm{Re}[f_cf_R^*(\pi-\vartheta)]=-\frac{2\varkappa}{k^2}\frac{\sin\delta_0}{\cos^2\Theta}\cos(\delta_0+\varkappa\log\cos^2\Theta);$$

$$|f_c|^2=\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0.$$

求出下式所示的称为散射比的量是有用处的：

$$R=\frac{d\sigma}{d\sigma_c}, \qquad (165.8)$$

其中 $d\sigma_c$ 是指只包含库仑散射项的部分(如前题中所导出的，或(165.7)式的第一行). 经代入计算，得

$$R=1+\frac{\left\{-\frac{2}{\varkappa}\sin\delta_0\left[\frac{\cos(\delta_0+\varkappa\log\sin^2\Theta)}{\sin^2\Theta}+\frac{\cos(\delta_0+\varkappa\log\cos^2\Theta)}{\cos^2\Theta}\right]+\frac{1}{\varkappa^2}\sin^2\delta_0\right\}}{\frac{1}{\sin^4\Theta}+\frac{1}{\cos^4\Theta}-\frac{\cos(\varkappa\log\tan^2\Theta)}{\sin^2\Theta\cos^2\Theta}}. \qquad (165.9)$$

这个公式的适用范围的上限，可达 ^3P 散射开始起作用的能量，即达到几个兆电子伏(MeV)的质子能量.

当 $\Theta=0$ 和 $\Theta=90^\circ$ 时，(165.9)式给出 $R=1$，这时，库仑散

射的奇异性远超过有限的反常散射.

在 $\Theta=45°$ 时，R 值具有更多的意义，这时

$$R(45°)=1-\frac{2}{\varkappa}\sin\delta_0\cos(\delta_0-\varkappa\log 2)+\frac{1}{\varkappa^2}\sin^2\delta_0. \quad (165.10)$$

首先对质子能量相当小时的情况讨论这个表达式. 例如，取质子能量为 250 千电子伏，则 $\varkappa=0.316$，这仍然相当大，而 δ_0 却很小，因此 (165.10) 式的第二项远超过第三项. 在 45° 处进行观察就能容易地决定附加力的符号：如果是引力，则 $\delta_0>0$，因而 $R(45°)<1$；如果是斥力，则 $\delta_0<0$，$R(45°)>1$. 实验结果表明，核力是吸引力.

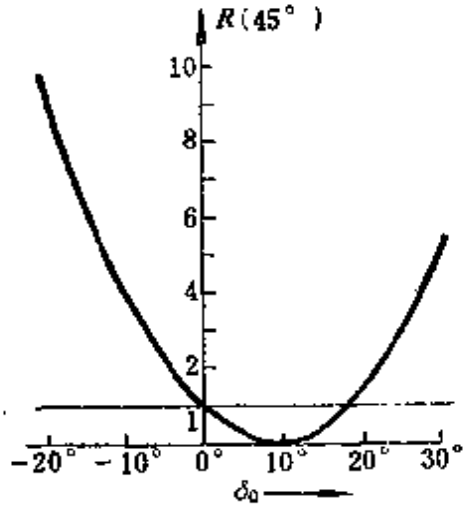


图 65 在 1 MeV 下的反常质子-质子散射. 图中示出 $\Theta=45°$ 时，实际散射与纯库仑散射之比与相角 δ_0 的关系. δ_0 的正(负)值对应于短程引力(斥力)

现在来讨论质子具有更高能量时的情况，例如取能量为 1 兆电子伏 ($\varkappa=0.158$). 于是，按照 (165.10)，可得与 δ_0 的不同的正、负值对应的 $R(45°)$ 值，其结果如图 65 所示. 因为已经确定 $\delta_0>0$ (吸引力)，所以当 $R(45°)>1$ 时，δ_0 可唯一地确定. 在 1 兆电子伏时确实观察到这个结果，这时，$R(45°)=4.6$. 由此得出相角 $\delta_0=32°$. 用这方法可以唯一地确定 δ_0 与能量的函数关系.

以这样确定的 δ_0 值代入 (165.9) 式就可算出其他偏转角时的比值 R，并将每一能量的整个角分布曲线同实验相比较. 这样，这理论就能详尽地得到证实. 已经得到理论和实验完全一致的结果.

文献 Blatt, J.M., Jackson, J. D.: Rev. Modern Phys. **22**, 77 (1950). Flügge, S.: Ergebn. exakt. Naturwiss. **26**, 165 (1952).

问题 166　非弹性散射

一束质子通过由碱金属原子组成的靶. 试确定原来处于基态的原子最外层电子的激发截面. 计算时把质子与原子间的相互作用作为微扰处理, 传递给原子实的动量忽略不计(无限重的原子).

解　若全部采用原子单位($\hbar=1$, $e=1$, $m=1$), 并设 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 分别是质子的和电子的位矢. 于是哈密顿算符可分解为三部分:

$$H=H_1+H_2+H_{12}, \tag{166.1}$$

其中描述质量为 M 的质子的自由运动的哈密顿算符是

$$H_1=-\frac{1}{2M}\nabla_1^2, \tag{166.2}$$

描述最外层电子在原子实场中的运动的哈密顿算符是

$$H_2=-\frac{1}{2}\nabla_2^2+V(r_2), \tag{166.3}$$

描述质子与原子实以及与受激发的电子的相互作用的是

$$H_{12}=-V(r_1)-\frac{1}{r_{12}}. \tag{166.4}$$

这哈密顿算符的最后一项可视为微扰. 只要质子能量还没有大到足以激发原子实的任一电子, 这个问题的上述表述就是合理的. 这样我们就可以简单地只讨论最外层的电子和一个刚性原子实的系统.

设 u_ν 是算符 H_2 在本征值为 W_ν 时的本征函数(这里的脚标 ν 包括三个量子数 n, l, m, 且 $\nu=0$ 代表基态), 则

$$H_2u_\nu(\boldsymbol{r}_2)=W_\nu u_\nu(\boldsymbol{r}_2). \tag{166.5}$$

并设 $\hbar\boldsymbol{k}$ 为未偏转的束质子的动量. 于是, 在忽略 H_{12} 时, 薛定谔方程的零阶解是

$$U^0(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}u_0(\boldsymbol{r}_2). \tag{166.6}$$

一阶解可用完全正交系 $\{u_\nu\}$ 展开为

$$U(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}u_0(\boldsymbol{r}_2)+\sum_{\mu}{}'F_\mu(\boldsymbol{r}_1)u_\mu(\boldsymbol{r}_2) \qquad (166.7)$$

上式的求和中包括对连续函数的积分而不包括 $\mu=0$.

把(166.7)代入薛定谔方程,得到

$$\sum_{\mu}{}'\{\nabla_1^2F_\mu+[k^2-2M(W_\mu-W_0)]F_\mu-2MH_{12}F_\mu\}u_\mu(\boldsymbol{r}_2)$$
$$=2MH_{12}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}u_0(\boldsymbol{r}_2).$$

在一级微扰中,略去左边的 H_{12}. 取记号

$$k_\mu^2=k^2-2M(W_\mu-W_0), \qquad (166.8)$$

则有

$$\sum_{\mu}{}'\{\nabla_1^2F_\mu(\boldsymbol{r}_1)+k_\mu^2F_\mu(\boldsymbol{r}_1)\}u_\mu(\boldsymbol{r}_2)=2MH_{12}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}u_0(\boldsymbol{r}_2). \qquad (166.9)$$

用 $u_\nu^*(\boldsymbol{r}_2)$ 乘(166.9),并对 $\boldsymbol{r}_2$ 积分,得到诸 F_ν 的一组独立的微分方程:

$$\nabla_1^2F_\nu+k_\nu^2F_\nu=\Phi_\nu(\boldsymbol{r}_1), \qquad (166.10)$$

其中

$$\Phi_\nu(\boldsymbol{r}_1)=2Me^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}\int d^3r_2u_\nu^*(\boldsymbol{r}_2)H_{12}u_0(\boldsymbol{r}_2). \qquad (166.11)$$

(166.10)是非齐次方程,可以用格林函数求解:

$$F_\nu(\boldsymbol{r}_1)=-\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\ \frac{e^{ik_\nu|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}'_1|}\Phi_\nu(\boldsymbol{r}'). \qquad (166.12)$$

为了从解中导出截面,接着就应研究当 $r_1\to\infty$ 时(166.12)的渐近行为. 因为 H_{12} 是质子与中性原子的相互作用,按照(166.4),当 $r_1\gg r_2$ 时,它趋于 $(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)/r_1^3$,于是当 r_1 大时,(166.11)中 $\Phi_\nu(\boldsymbol{r}_1)$ 里的积分与 $1/r_1^2$ 成正比地下降. 这样,(166.12)中的因子 $\Phi_\nu(\boldsymbol{r}')$ 实际上使得(166.12)的积分域限于原子的尺寸里. 所以,当 $\boldsymbol{r}_1\to\infty$ 时,可以假定 $r_1\gg r'$,于是

$$F_\nu(\boldsymbol{r}_1)\to-\frac{e^{ik_\nu r_1}}{4\pi r_1}\int d^3r'e^{-ik_\nu r'\cos(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')}\Phi_\nu(\boldsymbol{r}'). \qquad (166.13)$$

这是向外传播的球面波

$$F_\nu(\boldsymbol{r}_1)\to f(\vartheta_1)\frac{e^{ik_\nu r_1}}{r_1}, \tag{166.14}$$

其中散射振幅

$$f(\vartheta_1)=-\frac{1}{4\pi}\int d^3r' e^{ik_\nu r'\cos(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')}\Phi_\nu(\boldsymbol{r}') \tag{166.15}$$

仍与质子最后的偏转方向有关. 由此得出质子将碱金属最外层电子激发到 ν 态的非弹性微分散射截面是

$$d\sigma=\frac{k_\nu}{k}|f(\vartheta_1)|^2 d\Omega_1, \tag{166.16}$$

式中引入因子 k_ν/k, 是由于出射质子的速度, 从面质子流下降了这个比值. 用能量守恒定律来解释(166.8)式时就能立即得出这结果.

现在我们更详细地讨论非弹性散射质子的角分布. 在(166.15)的指数里, 我们在 $\boldsymbol{r}_1$ 方向上引入矢量 $\boldsymbol{k}_\nu$, 所以

$$k_\nu r'\cos(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}')=\boldsymbol{k}_\nu\cdot\boldsymbol{r}'.$$

将(166.11)和(166.4)代入(166.15), 得到

$$f(\vartheta_1)=-\frac{M}{2\pi}\int d^3r' e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_\nu)\cdot\boldsymbol{r}'}$$
$$\times\int d^3r_2 u_\nu^*(\boldsymbol{r}_2)\left\{-V(r')-\frac{1}{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2|}\right\}u_0(\boldsymbol{r}_2).$$

显然, 含有 $V(r')$ 的项对非弹性碰撞没有贡献($\nu\neq 0$). 这结果可由正交性得出, 也可从下列物理事实得出: 质子与原子实的相互作用不能激发不在原子实内的电子. 下面引进一个表示动量变化的矢量 $\boldsymbol{K}_\nu=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_\nu$, 于是得到

$$f(\vartheta_1)=\frac{M}{2\pi}\int d^3r_2 u_\nu^*(\boldsymbol{r}_2)u_0(\boldsymbol{r}_2)\int d^3r' e^{i\boldsymbol{K}_\nu\cdot\boldsymbol{r}'}\frac{1}{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2|}. \tag{166.17}$$

在这公式中, 内积分的被积函数包含两个因式, 两者都可用球

谐函数展开，一是 K_ν 与 $\boldsymbol{r}'$ 之间的 ϑ' 角的球谐函数，另一是 $\boldsymbol{r}'$ 与 $\boldsymbol{r}_2$ 之间的 δ_2 角的球谐函数：

$$e^{i\boldsymbol{K}_\nu\cdot\boldsymbol{r}'}=\frac{1}{K_\nu r'}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l j_l(K_\nu r')Y_{l,0}(\vartheta')$$

和

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2|}=\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}}R_nY_{n,0}(\vartheta_2')$$

其中

$$\left.\begin{aligned}R_n&=\frac{1}{r_2}\left(\frac{r'}{r_2}\right)^n\quad\text{当 }r'<r_2\text{ 时}\\R_n&=\frac{1}{r'}\left(\frac{r_2}{r'}\right)^n\quad\text{当 }r'>r_2\text{ 时}\end{aligned}\right\}. \tag{166.18}$$

如果把所有的角都以 $\boldsymbol{K}_\nu$ 的方向为极轴来度量，则可将球谐函数的加法定理用于 $Y_{n,0}(\delta_2')$，即

$$Y_{n,0}(\vartheta_2')=\sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}}\sum_{m=-n}^{+n}Y_{n,m}^*(\vartheta',\ \varphi')Y_{n,m}(\vartheta_2,\ \varphi_2),$$

其中 ϑ'，φ' 和 ϑ_2，φ_2 分别定义 $\boldsymbol{r}'$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 相对于 $\boldsymbol{K}_\nu$ 的方向．于是可以算出(166.17)的内积分中的角积分．即

$$\int d^3r'e^{i\boldsymbol{K}_\nu\cdot\boldsymbol{r}'}\frac{1}{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2|}$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}\int_0^\infty dr'r'^2\,\frac{4\pi}{K_\nu r'}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,i^l j_l(K_\nu r')R_lY_{l,0}(\vartheta_2).$$

利用缩写

$$g_l(r_2)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,i^l\int_0^\infty dr'r'^2\,\frac{j_l(K_\nu r')}{K_\nu r'}R_l, \tag{166.19}$$

可将(166.17)式写为

$$f(\vartheta_1)=2M\int d^3r_2u_\nu^*(\boldsymbol{r}_2)u_0(\boldsymbol{r}_2)\sum_{l=0}^{\infty}g_l(r_2)Y_{l,0}(\vartheta_2). \tag{166.20}$$

积分(166.19)可以明确地算出．用 $y=K_\nu r'$ 作为积分变量，并令 $x=K_\nu r_2$，则运用(166.18)式，就可得出

$$g_l(r_2)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,i^l\,\frac{1}{K_\nu^2}$$
$$\times\left\{x^{-l-1}\int_0^x dy y^{l+2}j_l(y)+x^l\int_x^\infty dy y^{-l}j_l(y)\right\}.$$

由贝塞耳函数理论,这些积分是大家熟知的:

$$\int_0^x dy y^{l+1}j_l(y)=x^{l+1}j_{l+1}(x);$$

$$\int_x^\infty dy y^{-l}j_l(y)=x^{-l}j_{l-1}(x).$$

因此,上面的花括号中的式子成为

$$j_{l+1}(x)+j_{l-1}(x)=(2l+1)\frac{j_l(x)}{x}.$$

所以

$$g_l(r_2)=\sqrt{4\pi(2l+1)}i^l\,\frac{j_l(K_\nu r_2)}{K_\nu^3 r_2}. \qquad (166.21)$$

对于散射振幅(166.20)的计算,还可再进一步. 我们知道态 u_ν 可分解为球谐函数. 由于基态 u_0 与角度无关,所以在(166.20)中要积分的都是两个球谐函数的乘积. 由于正交性,在(166.20)的求和中只需选择一项. 取

$$u_\nu\equiv\frac{1}{r_2}\chi_{n,l}(r_2)Y_{l,m}(\vartheta_2,\ \varphi_2) \qquad (166.22a)$$

这里已将 $\boldsymbol{K}_\nu$ 作为量子化的轴,并取

$$u_0=\frac{1}{r_2}\chi_0(r_2) \qquad (166.22b)$$

作为基态,则散射振幅成为

$$f(\vartheta_1)=\frac{2M}{K_\nu^2}\delta_{m,0}\sqrt{4\pi(2l+1)}i^l$$
$$\times\int_0^\infty dr_2\chi_{n,l}(r_2)\chi_0(r_2)\frac{j_l(K_\nu r_2)}{K_\nu r_2}. \qquad (166.23)$$

m 不同的态都是简并的. 这些态的线性组合,只有当它的角动量在动量传递矢量 $\boldsymbol{K}_\nu$ 的方向上没有分量时,才能被激发. 没有关

于 l 的选择规则. 还应注意到, 表达式(166.23)仍与质子的偏转角 ϑ_1 有关, 因为 K_ν 与 ϑ_1 有如下关系:

$$K_\nu^2 = k^2 + k_\nu^2 - 2kk_\nu\cos\vartheta_1, \qquad (166.24)$$

k_ν 是从能量定律(166.8)中导出的, 它和 ϑ_1 无关.

注 把黄金规则(183题)应用于这一过程, 可得同样结果.

B. 大量的粒子: 量子统计

问题 167 金属中的电子气

在粗略的近似中, 金属中的传导电子可看作是在表面势壁间自由运动的粒子, 这表面势壁阻止电子离开金属. 对于银的立方体(密度 $\rho=10.5$ 克/厘米^3, 原子量为 108, 每个银离子有一个传导电子), 试确定:

a) 出现在基态中的最高电子能量,

b) 电子的平均动能,

c) 电子气的压力.

温度激发可略去不计.

解 按照 18 题, 在体积为 L^3 的银的立方体中, 可能的电子能量为

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2), \qquad (167.1)$$

其中 n_1, n_2, n_3 是正整数($=1, 2, 3, \cdots$). 按照泡利原理, 三个量子数(n_1, n_2, n_3)所描述的每一个态中有二个自旋方向相反的电子. 因为在金属立方体中分布着大量的电子, 故主要的是数值大的量子数.

考虑以 n_1, n_2, n_3 为坐标的空间. 第一象限的整数坐标的每一个阵点对应于能量(167.1)的一个态. 如果用 n 表示在这空间

中由原点开始的半径，因而

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2=n^2, \tag{167.2}$$

则在第一象限中，半径 n 和 $n+dn$ 之间的球壳中的整数阵点的数目为：

$$\frac{1}{8}\cdot 4\pi n^2dn=\frac{\pi}{2}n^2dn.$$

每一阵点容纳自旋相反的两个电子，故在 n 和 $n+dn$ 之间的电子为 πn^2dn. 另一方面，因能量(167.1)只与 n 有关：

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2;\quad dE=\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}ndn \tag{167.3}$$

于是在 dn 区间里，能量在 E 和 $E+dE$ 之间的电子数为

$$dN=\pi n^2dn=\pi\sqrt{\frac{2mL^2E}{\hbar^2\pi^2}}\cdot\frac{mL^2}{\hbar^2\pi^2}dE$$

或

$$dN=\sqrt{2m}\frac{mL^3}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}dE. \tag{167.4}$$

a) **最高电子能量** 电子气处在基态时的最高电子能量 ζ 可由立方体中电子的总数 N 来求得，即

$$N=\sqrt{2m}\frac{mL^3}{\pi^2\hbar^3}\int_0^{\zeta}\sqrt{E}dE. \tag{167.5}$$

设以 $\mathcal{N}$ 表示电子密度，即

$$\mathcal{N}=\frac{N}{L^3}, \tag{167.6}$$

于是得到与我们所考虑的金属体积无关的公式：

$$\mathcal{N}=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m\zeta}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{167.7a}$$

或

$$\zeta=\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2\mathcal{N})^{\frac{2}{3}}. \tag{167.7b}$$

因 $\mathcal{N}=\rho/M$，其中 M 是银原子的质量($M=1.80\times10^{-22}$ 克)，故

$$\mathcal{N}=5.85\times10^{22}\text{厘米}^{-3},$$

从而，由(167.7b)得出能量的上限为

$$\zeta=8.80\times10^{-12}\text{尔格}=5.55\text{电子伏特}.$$

这能量远大于热能(在300 K时$kT=0.026$电子伏特)，故热激发对电子能态分布的影响确是很微小的. 这种效应称为电子气(费密气)的简并. 之所以会产生这种效应是由于(167.7b)式的分母中的电子质量m很小.

能限ζ通常称为电子气的费密能.

b) **平均能** 传导电子的平均能由

$$\overline{E}=\frac{\int dN\,E}{\int dN} \tag{167.8}$$

确定；按照(167.4)，

$$\overline{E}=\frac{\int_0^\zeta dE\,\sqrt{E}\,E}{\int_0^\zeta dE\,\sqrt{E}}=\frac{3}{5}\zeta. \tag{167.9}$$

c) **电子气的压力** 不需要运用热力学，通常可由使体积V减小dV所作的压缩功来定义压力如下

$$dW=pdV.$$

这功使气体的总内能U增加dU，即

$$dW=dU.$$

总能量(在$T=0$时)是

$$U=N\overline{E}=\frac{3}{5}N\zeta. \tag{167.10}$$

按照(167.7b)，费密能ζ依赖于$\mathcal{N}=N/V$，从而依赖于V：

$$U\propto V^{-\frac{2}{3}};\quad \frac{dU}{U}=-\frac{2}{3}\frac{dV}{V}.$$

于是得到压力

$$p=-\frac{dU}{dV}=\frac{2}{3}\frac{U}{V}=\frac{2}{5}\mathcal{N}\zeta. \tag{167.11}$$

将前面确定的 $\mathcal{N}$ 和 ζ 的值代入，得

$$p=2.06\times10^{11}\text{达因/厘米}^2,$$

或约为 200,000 大气压. 和这个巨大的压力相抗衡的是传导电子和点阵离子间的强大的库仑引力.

问题 168　金属的顺磁磁化率

试确定零度时金属的顺磁磁化率，在计算中把传导电子作为费密气体，并忽略点阵离子的极化性.

解　按照前题，传导电子形成费密气体，它的能限（费密能）是

$$\zeta=\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2\mathcal{N})^{\frac{2}{3}}, \tag{168.1}$$

其中 $\mathcal{N}$ 是单位体积中的传导电子数. 两个相继的电子能级间的能量差 ΔE 由下式得出：

$$4\pi p^2\Delta p=4\pi\sqrt{2mE}\,m\,\Delta E=\frac{(2\pi\hbar)^3}{V}. \tag{168.2}$$

在费密能级附近，上式给出（写出 $\Delta E_0\propto\zeta^{-\frac{1}{2}}=\zeta/\zeta^{\frac{3}{2}}$，并以(168.1)代 $\zeta^{\frac{3}{2}}$）

$$\Delta E_0=\frac{4}{3}\frac{\zeta}{\mathcal{N}V}. \tag{168.3}$$

在零度时，所有 $E<\zeta$ 的能级都被自旋方向相反的电子对占据，而所有 $E>\zeta$ 的能级都是空的.

如将磁场加于金属面使电子对分离，并使每对电子的自旋方向都与场强 $\mathcal{H}$ 平行，则电子气体得到能量. 如有 ν 对电子分离，电子气得到的能量应为

$$2\nu\cdot\mu\mathcal{H}\quad\text{其中}\quad\mu=\frac{e\hbar}{2mc}. \tag{168.4}$$

当然，只有使电子对中的一个电子跳到 $E=\zeta$ 界限以上的空能级上去时，这种分离才有可能. 然而，这就意味着能量的增益(168.4)是由电子的动能转化来的. 图 66 表示出分离第一对电子(将一个电子由占满的最高能级转移到空着的最低能级)所需的能量是 ΔE_0，分离第二对是 $3\Delta E_0$，分离第三对是 $5\Delta E_0$ 等等. 一般说来，分离 ν 对电子需要耗能

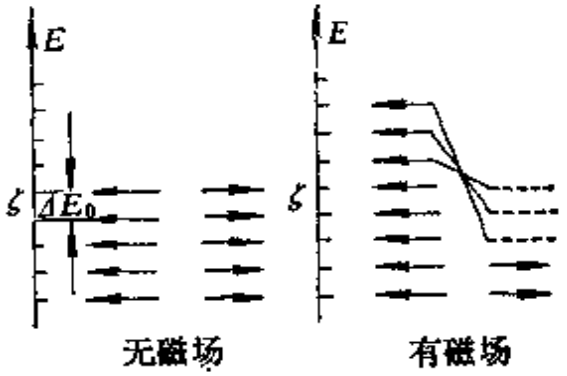


图 66　在磁场作用下，费密能级附近的自旋翻转

$$[1+3+5+\cdots+(2\nu-1)]\Delta E_0=\nu^2\Delta E_0. \qquad (168.5)$$

如果磁场所引起的电子气的总能量的变化

$$W=-2\nu\cdot\mu\mathscr{H}+\nu^2\Delta E_0 \qquad (168.6)$$

为极小值，则电子气达到平衡. 即

$$\frac{dW}{d\nu}=-2\mu\mathscr{H}+2\nu\Delta E_0=0,$$

由此得出

$$\nu=\frac{\mu\mathscr{H}}{\Delta E_0}, \qquad (168.7)$$

从而

$$W_{极小}=-\frac{(\mu\mathscr{H})^2}{\Delta E_0}. \qquad (168.8)$$

如果有更多的电子对分离，气体的总能量将再增加. 在平衡时，金属的总磁矩为

$$\mathscr{M}=2\nu\cdot\mu=\frac{2\mu^2\mathscr{H}}{\Delta E_0}.$$

由定义知金属单位体积的顺磁磁化率为

$$\chi=\frac{\mathscr{M}}{\mathscr{H}V}=\frac{2\mu^2}{V\Delta E_0}. \qquad (168.9)$$

按照(168.3)和(168.1),

$$\chi=\frac{e^2}{4\pi mc^4}\left(\frac{3\mathcal{N}}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}}. \tag{168.10}$$

为了将上式用数值表示出来,先把电子密度 $\mathcal{N}$ 表示为

$$\mathcal{N}=\frac{z\rho}{m_H A},$$

其中 ρ 为金属的质量密度, $m_H A$ 为金属一个原子的质量(A 是原子量), z 是原子价. 于是得出

$$\chi_{\text{顺磁}}=1.86\times10^{-6}\left(\frac{z\rho}{A}\right)^{\frac{1}{3}}. \tag{168.11}$$

将这结果和实验值比较时,必须减去点阵离子的抗磁磁化率.

注 在160题中已经计算了氖的抗磁磁化率,它实际上必须和 Na^+ 的抗磁磁化率相等同. 所得结果是

$$\chi_{\text{抗磁}}=-5.61\times10^{-6}\text{厘米}^3/\text{克分子}.$$

因表示钠金属密度的单位可作如下的换算: 1克/厘米$^3=\frac{1}{23}$克分子/厘米^3, 于是上式可用本题所采用的无量纲的标度来表示为

$$\chi_{\text{抗磁}}=-0.25\times10^{-6}.$$

另一方面,从(168.11)得出电子贡献的顺磁磁化率为

$$\chi_{\text{顺磁}}=+0.66\times10^{-6}.$$

这两个表达式中所示的大小是同数量级的,所以在某些金属(如铯)中甚至可以观察到合成的抗磁性.

文献 Frenkel, J.; Z. Physik **49**, 31(1928)

问题 169 未经象力修正的场致发射

试确定在高电场强度 $\mathscr{E}$ 的作用下金属表面发射的电子流. 假定温度是低的,象力和点阵结构可省略.

解 设 $z=0$ 是金属表面. 在金属表面的内部($z<0$)有恒定的势能 $V=0$, 而在它的外部($z>0$)有势能 V_0. 在金属内部,传导

电子形成基态费密气体，它们占有直到费密能 ζ 为止的所有能级．在外部，势能为

$$V(z)=V_0-e\mathscr{E}z, \tag{169.1}$$

如图 67 所示，在表面外部形成一势垒．设 E_z 是与 Z 方向上的电子速度分量对应的那一部分电子能量，则势垒有一透射系数 T，可用 WKB 近似法算出：

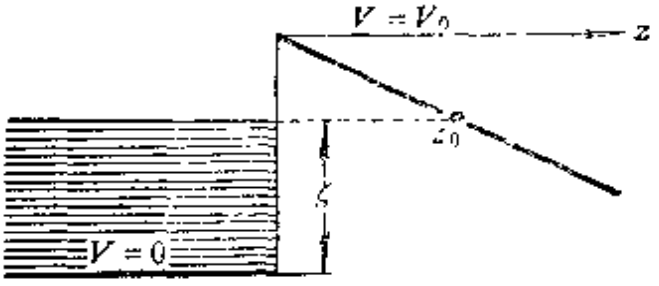


图 67　金属表面上的场致电子发射．左边：金属内部紧密排列的直到费密能 ζ 的电子能级．右边：在电场作用下金属外部的势能

$$T=\exp\left\{-2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_0^{z_0}dz\sqrt{V(z)-E_z}\right\}, \tag{169.2}$$

它随着 E_z 的减小而迅速下降．这里 V_z 就是(169.1)式，而

$$E_z=\frac{m}{2}v_z^2;\quad z_0=\frac{V_0-E_z}{e\mathscr{E}}. \tag{169.3}$$

(169.2)中的积分可用初等方法算出：

$$T=\exp\left\{-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e\mathscr{E}}(V_0-E_z)^{\frac{3}{2}}\right\}. \tag{169.4}$$

电流密度(每平方厘米)是

$$j=e\int dnv_zT, \tag{169.5}$$

其中 dn 是每立方厘米和每动量空间元 $dp_xdp_ydp_z$ 中的传导电子的数目．对于费密气，在费密球内，即当

$$p_x^2+p_y^2+p_z^2\ll 2m\zeta \tag{169.6}$$

时，有下列关系式：

$$dn=2\frac{dp_xdp_ydp_z}{\hbar^3},\qquad (h=2\pi\hbar)$$

而在费密球外，则 $dn=0$．采用动量空间的柱面坐标 ρ，φ，p_z，按照

$$p_x=\rho\cos\varphi,\quad p_y=\rho\sin\varphi,\quad \rho^2+p_z^2\leqslant 2m\zeta,$$

则积分(169.5)可写为

$$j=\frac{2e}{\hbar^3}\int_0^{\sqrt{2m\zeta}}dp_z\int_0^{\sqrt{2m\zeta-p_z^2}}d\rho\rho(p_z/m)T,$$

这积分遍及所有 $v_z>0$ 的电子. 如取辅助变量

$$\varepsilon=\zeta-E_z, \tag{169.7}$$

则这积分简化为

$$j=\frac{4\pi em}{h^3}\int_0^{\zeta}d\varepsilon\varepsilon T(\varepsilon), \tag{169.8}$$

其中

$$T=\exp\left\{-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e\mathscr{E}}(V_0-\zeta+\varepsilon)^{\frac{3}{2}}\right\}. \tag{169.9}$$

在计算积分(169.8)时，用到下面的事实：从 $\varepsilon=0$(即最大能量 $E_z=\zeta$)开始，透射系数 $T(\varepsilon)$ 随着 ε 的增加而迅速减小. 故对积分(169.8)的贡献主要来自 ε 值小的电子，因而可作下列展开：

$$(V_0-\zeta+\varepsilon)^{\frac{3}{2}}=(V_0-\zeta)^{\frac{3}{2}}+\frac{3}{2}\varepsilon(V_0-\zeta)^{\frac{1}{2}}+\cdots$$

采用缩写

$$2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e\mathscr{E}}(V_0-\zeta)^{\frac{3}{2}}=q, \tag{169.10}$$

可得

$$T=e^{-\frac{2}{3}}\exp\left(-\frac{q\varepsilon}{V_0-\zeta}\right)$$

和

$$j=\frac{4\pi em}{h^3}e^{-\frac{2}{3}q}\int_0^{\zeta}d\varepsilon\varepsilon\exp\left(-\frac{q\varepsilon}{V_0-\zeta}\right).$$

又，被积函数随着 ε 的增加而迅速减小，因此可将积分范围扩展到无限大而不致有明显的误差，故最后得出

$$j=\frac{4\pi em}{h^3}\frac{(V_0-\zeta)^2}{q^2}e^{-\frac{2}{3}q}. \tag{169.11}$$

数值 按照(169.10)和(169.11)式，电流随着场强 $\mathscr{E}$ 的减小和功函数 $V_0-\zeta$ 的增加而迅速下降. 如采用下列量度单位：场强

(伏/厘米)，功函数(电子伏特)，电流密度(安/厘米^2)，则得下列数值关系式：

$$\left.\begin{aligned} q &= 1.047\times 10^8 (V_0-\zeta)^{\frac{3}{2}}/\mathscr{E}; \\ j &= 1.59\times 10^{10}\frac{(V_0-\zeta)^2}{q^2}e^{-\frac{2}{3}q}. \end{aligned}\right\} \qquad (169.12)$$

当 q 的数量级为 1 时，电流密度可望达到 10^{10} 安/厘米^2 的数量级，即几乎每一个碰向表面的电子都会离开金属. 当然，在这样的极端条件下，模型和近似法都难于保持它们的正确性. 当 q 值变大时，电流迅速下降. 这样就不无理由询问，对于不同的功函数值，在什么场强下可期望得到 1 安/厘米^{2}的电流密度. 我们发现有下列各对的数值

$\mathscr{E}=10^6$ 伏/厘米	和	$V_0-\zeta=0.083$ 电子伏特
10^7		0.43
10^8		2.19

因在金属中 $V_0-\zeta$的数量级是几个电子伏特，故在 10^8 伏/厘米以下，不应观察到显著的场致发射. 然而，实验表明场强的阈值仅约 10^6伏/厘米. 这样大的差异，肯定不能用费密气的温度激发来解释，因它只能使功函数降低 $\frac{1}{10}$ 到 $\frac{1}{100}$ 电子伏特 $\left(\text{在常温下，}kT\sim\frac{1}{30}\text{ 电子伏特}\right)$. 然而，如下题所表明的，这个差异可从考虑象力而得到解释.

问题 170　经象力修正的场致发射

金属电子场致发射的势阈主要由于象力的存在而降低. 试研究象力对发射的电子流的影响.

解　当金属中的任一电子在金属外距离 $z>0$ 处时，在它附近的金属表面上电荷分布将发生畸变. 象力来源于这种表面电荷的

畸变. 它可由经典静电学算出. 如果 z 比点阵常数大得多，则金属可看作是连续的，计算中可以略去金属结构内部的影响. 于是得到

$$V_{象}=-\frac{e^2}{4z}. \tag{170.1}$$

对于较小的 z 值，这表达式是相当差的，显然，在 $z=0$ 处，它是没有物理意义的奇点. 然而，这个误差并不影响下面的讨论，因在讨论中只涉及电子能量以上的势壁的高度与宽度.

于是，这势壁是

$$V(z)=V_0-\frac{e^2}{4z}-e\mathscr{E}z, \tag{170.2}$$

上式中的记号与前题相同(见图 68). 我们感兴趣的是势壁中 z_1 到 z_2 之间的部分，而 z_1 和 z_2 是二次方程 $V(z)=E_z$ 的解，解得结果是

$$z_{1,2}=\frac{V_0-E_z}{2e\mathscr{E}}\pm\sqrt{\frac{(V_0-E_z)^2}{4e^2\mathscr{E}^2}-\frac{e}{4\mathscr{E}}}. \tag{170.3}$$

如果条件

$$e\mathscr{E}<\left(\frac{V_0-E_z}{e}\right)^2$$

成立，则两个解都是实根. 这条件即使在场强约为 10^9 伏/厘米时仍然成立；当场强更高时，势阈将沉没到电子海的费密能级之下. 对于实验中所用的场强(它甚至低于 10^7 伏/厘米)，完全可以假定

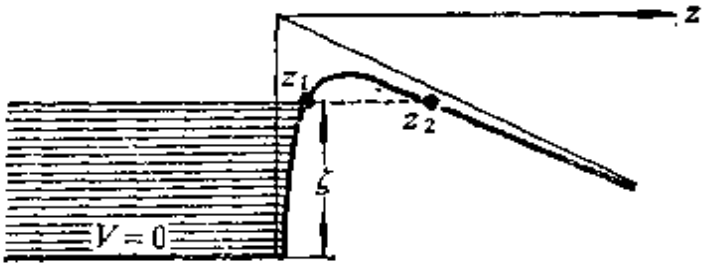


图 68 除象力修正外，与图 67 相同

$$e\mathscr{E}\ll\left(\frac{V_0-E_z}{e}\right)^2, \tag{170.4}$$

从而可将(170.3)中的根式展开. 所得结果是

$$z_1=\frac{e^2}{4(V_0-E_z)} \quad 和 \quad z_2=z_0-z_1, \tag{170.5}$$

其中

$$z_0=\frac{V_0-E_z}{e\mathscr{E}}, \tag{170.6}$$

且 $z_1\ll z_2$. 按照(170.2)式，由于象力的作用，现在势垒的顶点由 $z=0$ 移到 $z=\sqrt{\frac{e}{4\mathscr{E}}}$ 势垒的高度不是 V_0 而是

$$V_0-e\sqrt{e\mathscr{E}}.$$

按照(170.4)，这没有使阈值降低多少，而是使顶点更加平坦了，因此可以期望有一个大的透射系数. 只有在 $E_z=\zeta$ 附近会提供显著的发射电流(如上题所述)；在这个能量值时，$z_1=e^2/[4(V_0-\zeta)]$，至少与点阵常数同数量级，因此，在 $z=0$ 处的象力势能的奇异性是无关紧要的.

再用 WKB 近似法得到透射系数

$$T=\exp\left\{-2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{z_1}^{z_2}dz\sqrt{V(z)-E_z}\right\},$$

或将 $V(z)$ 写成下列形式：

$$V(z)=\frac{e\mathscr{E}}{z}(z_1-z_2)(z_2-z),$$

则得：

$$-\frac{\hbar}{2\sqrt{2me\mathscr{E}}}\log T=\int_{z_1}^{z_2}dz\sqrt{\frac{(z-z_1)(z_2-z)}{z}} \tag{170.7}$$

这是椭圆类型的积分，取新变数 $x=(z-z_1)/(z_2-z_1)$ 代替 z，可以化为标准积分，即化为下列积分：

$$(z_2-z_1)^{\frac{3}{2}}\int_0^1 dx\sqrt{\frac{x(1-x)}{x+c}} \quad 其中 \quad c=\frac{z_1}{z_2-z_1}.$$

接着令

$$\frac{z_2-z_1}{z_2}=k^2 \tag{170.8}$$

和
$$x=\frac{(1-k^2)\sin^2\varphi}{1-k^2\sin^2\varphi},$$

则(170.7)的右边成为

$$\frac{2k^4}{\sqrt{1-k^2}}z_1^{\frac{3}{2}}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{d\varphi\sin^2\varphi\cos^2\varphi}{(1-k^2\sin^2\varphi)^{\frac{5}{2}}}. \tag{170.9}$$

最后的积分可以化为二个完全的椭圆积分 $E(k)$ 和 $K(k)$：

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{d\varphi\sin^2\varphi\cos^2\varphi}{(1-k^2\sin^2\varphi)^{\frac{5}{2}}}=\frac{1}{3k^4}\left[\frac{2-k^2}{1-k^2}E(k)-2K(k)\right]. \tag{170.10}$$

(170.10)式可证明如下：令 $1-k^2\sin^2\varphi=\Delta^2$，则这两个标准形式的完全积分定义为

$$K(k)=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{d\varphi}{\Delta};\qquad E(k)=\int_0^{\frac{\pi}{2}}d\varphi\Delta.$$

现在用简单的微分就可证明下面的恒等式：

$$3k^2\frac{\sin^2\varphi\cos^2\varphi}{\Delta^5}=\frac{2-k^2}{k^2(1-k^2)}\Delta-\frac{2}{k^2\Delta}+\frac{d}{d\varphi}\left\{\sin\varphi\cos\varphi\left(\frac{1}{\Delta^3}-\frac{2-k^2}{(1-k^2)\Delta}\right)\right\}.$$

将这恒等式积分，立即得出

$$3k^2\int_0^{\frac{\pi}{2}}d\varphi\frac{\sin^2\varphi\cos^2\varphi}{\Delta^5}=\frac{2-k^2}{k^2(1-k^2)}E(k)-\frac{2}{k^2}K(k),$$

这和(170.10)完全一致.

将(170.7)式和(170.10)式结合起来，得到

$$-\frac{\hbar}{2\sqrt{2me^6}}\log T=\frac{2}{3}z_2^{\frac{3}{2}}[(2-k^2)E(k)-2(1-k^2)K(k)]. \tag{170.11}$$

这公式可以化为简单得多的形式. 前面已指出 $z_1\ll z_2$，因此 $k^2\simeq 1$，可以取参数 k'^2 代替 k^2，即取

$$k'^2=1-k^2=\frac{z_1}{z_2}\ll 1, \tag{170.12}$$

并按照下式把(170.11)展开为这个参数的极好的收敛级数①

$$K(k)=A+\frac{1}{4}(A-1)k'^2+\cdots;$$

$$E(k)=1+\frac{1}{2}\left(A-\frac{1}{2}\right)k'^2+\cdots$$

其中 $A=\log(4/k')$. 如将这些展开式代入(170.11), 则右边成为

$$\frac{2}{3}z_2^{\frac{3}{2}}\left[1+k'^2\left(\frac{3}{4}-\frac{3}{2}\log\frac{4}{k'}\right)\right]$$

$$=\frac{2}{3}z_0^{\frac{3}{2}}\left[1-\frac{3}{2}k'^2\left(\frac{1}{2}+\log\frac{4}{k'}\right)\right].$$

如果 $k'=0$, 我们将回到表式(169.9). 如把这时的透射系数记作 T_0, 则得下列结果:

$$T=T_0^{1-\lambda}, \tag{170.13}$$

其中

$$\lambda=\frac{3}{2}k'^2\left(\frac{1}{2}+\log\frac{4}{k'}\right). \tag{170.14}$$

剩下的问题是用 T 的新表达式去计算电流积分(169.8). 和前题一样,这里对电流的贡献仍然主要来自 $E_x=\zeta$ 附近. 因此,我们可在 $E_x=\zeta$ 或 $\varepsilon=0$ 处将 λ 展开并只取 ε 的线性项, 这实际上等于取

$$k'^2\simeq(z_1/z_0)_{E_x=\zeta}=\frac{e^3\mathscr{E}}{4(V_0-\zeta)^2}, \tag{170.15}$$

然后象 169 题那样来积分. 将(169.11)所表示的电流密度记作 j_0, 则电流密度表达式为

$$j=j_0e^{\frac{2}{3}\lambda a}, \tag{170.16}$$

其中 $\lambda\ll 1$. 较好的下一级近似将在分母中增加一个因子:

---

① 参看 Jahnke-Emde, 2nd edition (1933) p. 145

$$\left[1-\frac{7}{3}\lambda+k'^2\right]^2.$$

当然,(170.16)中的指数因子是主要的.

最后讨论几个数值结果. 除关系式(169.12)外,现在还有

$$k'^2=3.58\times10^{-8}\mathscr{E}/(V_0-\zeta)^2,$$

同样,$\mathscr{E}$ 的单位是伏/厘米,$V_0-\zeta$ 的单位是电子伏特. 取合理的功函数值,$V_0-\zeta=3$ 电子伏特,并取场强 $\mathscr{E}=10^7$ 伏/厘米,于是得到

$$q=54.5,\quad k'^2=0.0397,\quad \lambda=0.208,\quad e^{\frac{2}{3}\lambda q}=1860,$$

$$j_0=0.9\times10^{-8}\text{安/厘米}^2,$$

$$j=1.7\times10^{-5}\text{安/厘米}^2.$$

问题 171　白　矮　星

设白矮星的温度高到足以使它的原子实际上完全电离,而与简并电子气体的零点压力相比,其温度又低得可以把气体压力和辐射压力都略去不计(这后一假设是相当差的). 试从零点压力和引力压力的平衡出发,计算在具有一定总质量的星中的密度分布.

解　在一球形的一定质量的气体中,径向压力梯度必须与引力密度平衡(气压公式):

$$\frac{dp}{dr}=-\frac{GM_r}{r^2}\rho. \tag{171.1}$$

这里 G 是引力常数,M_r 是半径为 r 的球内的质量,

$$M_r=4\pi\int_0^r dr'r'^2\rho(r'), \tag{171.2}$$

$\rho(r)$ 是质量密度,即星物质 1 厘米^3 内所有离子和自由电子的质量. 在每立方厘米中有 $\mathcal{N}$ 个电子的完全电离的气体中有 $\mathcal{N}/Z$ 个离子(核),因此

$$\rho=\frac{\mathcal{N}}{Z}m_HA,$$

其中 m_HA 是一个中性原子的质量. 如果是不同的元素,则 A 和 Z 代表平均值. 然而值得注意的是

$$\frac{A}{Z}=2\alpha \tag{171.3}$$

这个比值几乎与化学成分无关,除氢以外 $\left(\text{对于氢, }\alpha=\frac{1}{2}\right)$, 对于从轻到重的所有元素, α 的值从 1.0 变化到 1.3. 所以

$$\rho=2\alpha m_H\mathcal{N}, \tag{171.4}$$

主要决定于电子密度.

按照 167 题,电子气的压力是它的零点压力

$$p_e=\frac{2}{5}\mathcal{N}\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2\mathcal{N})^{\frac{2}{3}}. \tag{171.5}$$

从上式零点压力与 $\mathcal{N}^{\frac{5}{3}}/m$ 成正比来看, 离子的零点压力 p_i 要小得多:

$$p_i/p_e=(\mathcal{N}_i/\mathcal{N})^{\frac{5}{3}}m/m_i=Z^{-\frac{5}{3}}\frac{m}{m_HA}.$$

即使对于氢($Z=1$, $A=1$), 我们也有 $p_i/p_e=1/1838$. 对于所有其他元素,这个比值要小很多. 所以, 我们将略去 p_i 而把(171.5)的 p_e 作为总压力 p.

消除温度效应并不很容易. 只有当 $\zeta\gg kT$ 时,才能假定气体是完全简并的,从而它的压力近似地为零点压力. 然而电子的费密能是

$$\zeta=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2\rho}{2\alpha m_H}\right)^{\frac{2}{3}}=1.64\left(\frac{\rho}{\alpha}\right)^{\frac{2}{3}}\quad\text{电子伏特.}$$

此值是可以和 10^6 度时的 $kT\simeq100$ 电子伏特相比较的. 当 $\rho=10^3$ 时, 这两个量的大小甚至是同数量级的. 离子气应是完全不简并的,于是也会有同样数量级的能值. 辐射压力是

$$p_R=2.52\times10^{-15}T^4\quad\text{达因/厘米}^2;$$

而从(171.5)和(171.4)式得出

$$p_*=3.16\times10^{12}\left(\frac{\rho}{\alpha}\right)^{\frac{5}{3}}\quad \text{达因/厘米}^2.$$

所以，当 $T=10^6$ 度时，辐射压力的数量级是 10^9 达因/厘米^2，在白矮星的密度条件下，它确是可以忽略不计的.

从(171.5)和(171.4)得出状态方程

$$p=f\rho^{\frac{5}{3}};$$

$$f=\frac{\hbar^2}{10m}\left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{\frac{2}{3}}(\alpha m_H)^{-\frac{5}{3}}$$

$$=3.17\times10^{12}\alpha^{-\frac{5}{3}}\quad \text{克}^{-\frac{2}{3}}\ \text{厘米}^4\ \text{秒}^{-2}. \tag{171.6}$$

压力和密度之间的形式为

$$p=f\rho^{1+\frac{1}{n}}$$

的任何关系，都称为指标为 n 的多变曲线. 所以白矮星是按指标 $n=\frac{3}{2}$ 的多变曲线构成的.

将(171.6)代入平衡条件(171.1)，得到

$$\frac{5}{3}f\rho^{\frac{2}{3}}\frac{d\rho}{dr}=-\frac{G\rho}{r^2}M_r,$$

或将上式微分，得到

$$\frac{5f}{3G}\frac{d}{dr}\left(r^2\rho^{-\frac{1}{3}}\frac{d\rho}{dr}\right)=-4\pi r^2\rho. \tag{171.7}$$

用无量纲函数

$$\varphi=\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{171.8}$$

代替 ρ(ρ_0 是常数)，用无量纲的变数

$$x=\frac{r}{r_1} \tag{171.9}$$

代替 r，并选择下式的 r_1 作为长度单位：

$$r_1^2=\frac{5f}{8\pi G}\rho_0^{-\frac{1}{3}}, \tag{171.10}$$

则微分方程(171.7)化为

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d\varphi}{dx}+\varphi^{\frac{2}{3}}=0, \tag{171.11}$$

它和一切物理常数无关. 如取 ρ_0 为星中心的密度, 则解(171.11)方程的边界条件为

$$\varphi(0)=1;\quad \varphi'(0)=0. \tag{171.12}$$

具有边界条件(171.12)的非线性方程(171.11)的解, 可由数值积分唯一地得出. 这个解是单调地下降的, 在

$$x=X=3.6537 \tag{171.13a}$$

处达到 $\varphi=0$, 这时的微商为

$$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=X}=-D=-0.206. \tag{171.13b}$$

按照(171.8), $\varphi=0$ 对应于星的表面, 记作 $r=R$. 所以, 星的总质量为

$$M=4\pi\int_0^R dr r^2\rho(r)=4\pi\rho_0 r_1^3\int_0^x dx x^2\varphi^{\frac{2}{3}}.$$

这积分不需要知道函数 $\varphi(x)$ 的详细数值, 只要利用(171.11)式将被积函数作如下的取代:

$$x^2\varphi^{\frac{2}{3}}=-\frac{d}{dx}\left(x^2\frac{d\varphi}{dx}\right),$$

就可计算出来. 结果是

$$M=4\pi\rho_0 r_1^3X^2D=34.5\rho_0 r_1^3. \tag{174.14}$$

如果星的质量已测定, 则 ρ_0 和 r_1 可由(171.10)和(171.14)两关系式求得, 即由

$$\left.\begin{aligned}&\rho_0^{\frac{1}{3}}r_1^2=a \text{ 其中 } a=\frac{5f}{8\pi G}=9.46\times10^{18}\alpha^{-\frac{5}{8}} \text{ 克}^{\frac{1}{3}}\text{厘米},\\&\rho_0 r_1^3=b \text{ 其中 } b=0.0290M,\end{aligned}\right\} \tag{171.15}$$

得到

$$r_1=ab^{-\frac{1}{3}};\quad \rho_0=b^2a^{-3}, \tag{171.16}$$

并得到星的半径 R 为

$$R=r_1X=3.6537r_1. \tag{171.17}$$

最后得出平均密度为

$$\bar{\rho}=\frac{3D}{X}\rho_0=0.169\rho_0, \tag{171.18}$$

即约为中心密度的 1/6.

数值例子 天狼星(大犬座 α)的伴星天狼 B 的质量由天狼星围绕此双星系统的质量中心的运动来确定. 这大致和太阳的质量相同,即 $M=1.94\times10^{33}$ 克. 由此得出下面的数值

$$r_1=2.47\times10^{8}\alpha^{-\frac{5}{3}}\text{ 厘米};$$

$$R=8.98\times10^{8}\alpha^{-\frac{5}{3}}\text{ 厘米};$$

$$\rho_0=3.73\times10^{5}\alpha^{3}\text{ 克·厘米}^{-3};$$

$$\bar{\rho}=6.15\times10^{5}\alpha^{3}\text{ 克·厘米}^{-3}.$$

因为观察到的半径约为太阳半径($R_0=6.95\times10^{10}$ 厘米)的 $\frac{1}{20}$,从而在我们的模型中得出 $\alpha=0.445$. 这虽然和氢星的 $\alpha=0.5$ 相差不很远,但却偏向了错误的一边. 这里的半径确是太小了. 压力中的相当重要的部分被忽略这件事说明:如果考虑温度效应,这星将膨胀到较大的半径.

问题 172 托马斯-费密近似法

试计算原子或正离子的电子密度. 假定在某些区域里,静电势能是缓慢变化的,但包含有足够多的电子,因而可用统计方法处理. 试求出合适的近似方法来解决这样的问题.

解 在这问题的模型里有两个基本的概念:一是静电的,另

一是量子统计的. 先从静电这一方面来讨论. 设 $n(r)$ 是离原子核距离为 r 处单位体积内的电子数，则由核和电子所产生的静电势满足泊松方程，即本题的第一个基本方程：

$$\nabla^2\Phi = 4\pi e \cdot n(r), \tag{172.1}$$

而 $\rho(r) = -en(r)$ 代表电子云的电荷密度. 这方程的解所遵循的边界条件是：在核电荷 Ze 附近

$$\Phi \approx \frac{Ze}{r} \quad \text{当 } r \to 0, \tag{172.2}$$

并且

$$\Phi = \frac{ze}{r} \quad \text{当 } r \geqq R, \tag{172.3}$$

其中 R 是电荷为 ze 的正离子的半径. 这半径有待确定.

电荷密度在 $r=R$ 处不可能有奇点，因此电势和场强也都必须是连续的. 于是边界条件(172.3)可以改写为如下形式：

$$\Phi(R) = \frac{ze}{R} \quad \text{和} \quad \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)_R = -\frac{ze}{R^2}. \tag{172.4}$$

现在，从第二个基本概念，即从问题的量子统计方面来讨论. 原子或离子内部的任一体积元中的电子的动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 的关系为

$$E = \frac{p^2}{2m} - e\Phi(r).$$

为了束缚住电子，原子内部的这个能量值显然必须小于原子表面的势能 $-e\Phi(\boldsymbol{R})$. 因此在离核距离为 $\boldsymbol{r}$ 处，电子的动量不可能大于下式所给出的 $\boldsymbol{p}_{最大}$

$$\frac{p_{最大}^2}{2m} = e[\Phi(r) - \Phi(R)]. \tag{172.5}$$

根据量子统计，$\boldsymbol{p}_{最大}$ 和电子密度 $n(\boldsymbol{r})$ 的关系为(参见问题 167)：

$$n = 2 \cdot \frac{4\pi}{3} p_{最大}^3 \Big/ (2\pi h)^3. \tag{172.6}$$

从(172.5)和(172.6)消去 $\boldsymbol{p}_{最大}$，得到第二个基本方程

$$n(\boldsymbol{r})=\frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\{2me[\Phi(r)-\Phi(R)]\}^{\frac{3}{2}}. \qquad (172.7)$$

两个函数 $n(r)$ 和 $\Phi(r)$ 原则上都可以从方程(172.1)和(172.7)确定. 现在消去 $n(r)$，并利用系统的中心对称性，得到

$$\nabla^2\Phi\equiv\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\Phi)=\frac{4e}{3\pi\hbar^3}\{2me[\Phi(r)-\Phi(R)]\}^{\frac{3}{2}}.$$

用无量纲函数

$$\varphi(r)=\frac{r}{Ze}[\Phi(r)-\Phi(R)] \qquad (172.8)$$

代替 $\Phi(r)$，并用无量纲变数

$$x=\frac{r}{a},\quad 其中\quad a=\left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)\frac{\hbar^2}{me^2}=0.88534Z^{-\frac{1}{3}}\frac{\hbar^2}{me^2} \qquad (172.9)$$

代替 r，则得普适的微分方程

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}=\frac{\varphi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{x}}. \qquad (172.10)$$

边界条件(172.2)和(172.4)化为

$$\varphi(0)=1 \qquad (172.11)$$

和

$$\varphi(X)=0;\quad X\varphi'(X)=-\frac{z}{Z}, \qquad (172.12)$$

其中 $X=\dfrac{R}{a}$.

应注意，用这样的边界条件时，所有$(Z-z)$个电子确都包含在以 R 为半径的球内. 这是容易证明的，先由(172.7)和(172.9)得出

$$4\pi\int_0^R n(r)r^2dr=Z\int_0^X dx\sqrt{x}\,\varphi(x)^{\frac{3}{2}},$$

再利用微分方程(172.10)，用 φ'' 代替 $\varphi^{\frac{3}{2}}$：

$$上式右边=Z\int_0^X dx x\varphi''=Z[x\varphi'-\varphi]_0^X=Z[\varphi(0)+X\varphi'(X)].$$

然后将边界条件(172.11)和(172.12)代入，则

$$\text{上式右边}=Z\left(1-\frac{s}{Z}\right)=Z-s,$$

这确是电子数.

这样，问题就化为以(172.11)和(172.12)为边界条件的方程(172.10)的积分. 若要普遍考察解的多样性，可将微分方程在 $\varphi(0)=1$ 和不同的初始切线斜率 $\varphi'(0)<0$ 下进行积分. 图69中画出四个这样的解. 线(1)和(2)导致有限半径 X_1 和 X_2. 因对这些解 $\varphi'(x)<0$，按照方程(172.12)，它们属于正离子. 对于中性原子，(172.12)给出 $\varphi'(X)=0$，但当 X 为有限值时，这是不可能的，于是就导致图69的具有无限大原子半径的线(3). (4)型的解对于自由原子或离子没有直接的物理意义，但是可以用来很好地描述在改变了的边界条件下束缚于晶体点阵中的原子.

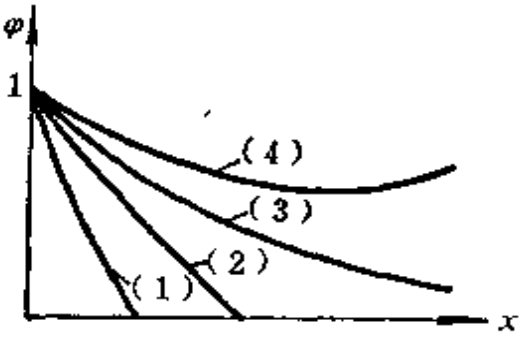


图69 具有不同初始切线斜率的托马斯-费密方程(172.10)的解

我们主要着眼于中性原子的线(3). 我们称它为标准解 $\varphi_0(x)$. 附表中给出它的数值解. 它属于初始切线斜率 $\varphi_0'(0)=-1.58807$. 它的渐近行为由 $\varphi_0(x)\to 144/x^3$ 给出(顺便说一下，除在 $x=0$ 处有一奇点外，这个渐近解准确地满足微分方程)，然而这个表达式对于实际问题是相当无用的，即使在 $x=100$ 这样大的数值时，它和 $\varphi_0(x)$ 仍约相差40%. 另一方面，在 x 大时，φ_0 无疑地应出现类似指数型那样的急剧下降. 和任何统计模型一样，托马斯-费密近似法的误差随粒子数的减小而迅速增加，而且由于粒子数在大距离处越来越小，这方法在这里就不再适用了，尽管在原子内部它可以给出好的结果.

为了得到与标准解差异不太远的其他的解，我们写出

$$\varphi(x)=\varphi_0(x)+k\eta_0(x) \tag{172.13}$$

即具有线性化的小偏离 $k\eta_0$. 于是由(172.10)得

$$\frac{d^2\eta_0}{dx^2}=\frac{3}{2}\left(\frac{\varphi_0}{x}\right)^{\frac{1}{2}}\eta_0. \tag{172.14}$$

为了满足边界条件(172.11), 必须 $\eta_0(0)=0$. 我们进一步选择 $\eta_0'(0)=1$ 来使 η_0 标准化, 适当地选取参数 k 可使 $\eta_0'(0)=1$ 满足边界条件(172.12). k 可从下面关系式中任选一个:

$$k=-\frac{\varphi_0(X)}{\eta_0(X)}; \tag{172.15a}$$

$$k=-\frac{1}{\eta_0'(X)}\left(\frac{1}{ZX}-\varphi_0'(X)\right); \tag{172.15b}$$

$$k=\varphi'(0)-\varphi_0'(0). \tag{172.15c}$$

(172.15a)式使 k 和离子半径 X 之间有简单的关系. 函数 $\eta_0(x)$ 和它的微商 $\eta_0'(x)$ 列表如下.

x	$\varphi_0(x)$	$-\varphi_0'(x)$	$\eta_0(x)$	$\eta_0'(x)$
0.00	1.0000	1.5881	0.0000	1.0000
0.02	0.9720	1.3093	0.0200	1.0028
0.04	0.9470	1.1991	0.0401	1.0079
0.06	0.9238	1.1177	0.0604	1.0144
0.08	0.9022	1.0516	0.0807	1.0220
0.10	0.8817	0.9954	0.1012	1.0306
0.2	0.7931	0.7942	0.2069	1.0846
0.3	0.7206	0.6618	0.3186	1.1528
0.4	0.6595	0.5646	0.4378	1.2321
0.5	0.6070	0.4894	0.5654	1.3210
0.6	0.5612	0.4292	0.7023	1.4187
0.7	0.5208	0.3798	0.8494	1.5246
0.8	0.4849	0.3386	1.0075	1.6384
0.9	0.4529	0.3038	1.1773	1.7599
1.0	0.4240	0.2740	1.3597	1.8890
1.2	0.3742	0.2259	1.7650	2.1696
1.4	0.3329	0.1890	2.2296	2.4805

(续表)

x	$\varphi_0(x)$	$-\varphi_0'(x)$	$r_0(x)$	$r_0'(x)$
1.6	0.2981	0.1601	2.7593	2.8222
1.8	0.2685	0.1370	3.3605	3.1954
2.0	0.2430	0.1182	4.0396	3.6012
2.2	0.2210	0.1028	4.8032	4.0406
2.4	0.2017	0.0900	5.6582	4.5149
2.6	0.1848	0.0793	6.6116	5.0253
2.8	0.1699	0.0702	7.6708	5.5730
3.0	0.1566	0.0625	8.8434	6.1594
3.2	0.1448	0.0558	10.137	6.7858
3.4	0.1343	0.0501	11.561	7.4538
3.6	0.1247	0.0451	13.122	8.1646
3.8	0.1162	0.0408	14.829	8.9198
4.0	0.1084	0.0369	16.693	9.7208
4.5	0.0919	0.0293	22.09	11.93
5.0	0.0788	0.0236	28.68	14.47
5.5	0.0682	0.0192	36.62	17.34
6.0	0.0594	0.0159	46.08	20.59
6.5	0.0522	0.0132	57.27	24.23
7.0	0.0461	0.0111	70.39	28.30
7.5	0.0410	0.0095	85.64	32.81
8.0	0.0366	0.0081	103.27	37.80
8.5	0.0328	0.0070	123.52	43.29
9.0	0.0296	0.0060	146.66	49.32
9.5	0.0268	0.0053	172.94	55.92
10.0	0.0243	0.0046	202.67	63.11

问题 173　中性原子的阿马耳迪(Amaldi)修正

在作为托马斯-费密模型基础的泊松方程中，右边引进除一个电子以外的所有电子的电荷密度，会更正确，因为这方程可用来确定电子之一在其中运动的势场．这个修正是对研究中性原子的托马斯-费密模型的修正．

解　现在以

$$\nabla^2\Phi = 4\pi e \cdot \frac{Z-1}{Z} n(r) \tag{173.1}$$

代替(172.1)，其中Φ是由$Z-1$个电子产生的、作用于第Z个电子上的势场. 至于取哪一个电子作为试探电子，对这个简单的修正并无影响；而这一忽略对于统计图象来说却是很有用的. 小r处的边界条件决定于原子核，因而和前题一样：

$$\Phi(r) = \frac{Ze}{r} \quad \text{当 } r \to 0, \tag{173.2}$$

而在原子的表面，对于中性原子则是

$$\Phi(R) = \frac{e}{R}; \quad \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)_R = -\frac{e}{R^2}. \tag{173.3}$$

这是由于原子核为$Z-1$个电子屏蔽后只剩下电荷e，这剩余电荷e对所考虑的试探电子仍然有作用.

由量子统计得出的另一基本方程保持不变，因此仍有

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} \{2me[\Phi(r) - \Psi(R)]\}^{\frac{3}{2}}. \tag{173.4}$$

从(173.1)和(173.4)消去$n(r)$，并再利用

$$\varphi = \frac{r}{Ze}[\Phi(r) - \Phi(R)], \tag{173.5}$$

则得到相同的普适微分方程：

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{x}}, \tag{173.6}$$

只是其中的变数$x = \frac{r}{\tilde{a}}$现在是由下式定义

$$\tilde{a} = a\left(1 - \frac{1}{Z}\right)^{-\frac{2}{3}}, \tag{173.7}$$

上式中的a就是(172.9)式中的特征长度.

因为$\tilde{a} > a$，所以第一眼得到的印象是修正使原子变大了. 这和泊松方程中修正的物理意义正好相反. 泊松方程中的修正降低

了电子间的相斥作用，从而加强了束缚力而使原子变小．然而改变一下边界条件，这矛盾就解决了．如果用函数 $\varphi(x)$ 表示方程(173.3)，则原子表面的边界条件成为

$$\varphi(X)=0 \quad 和 \quad X\varphi'(X)=-\frac{1}{Z}. \tag{173.8}$$

这些条件是只有有限半径才能满足的．这样一来就足以补偿 $\tilde{a}$ 的伸长效应而有余．

问题 174　托马斯-费密原子的能量

试计算中性托马斯-费密原子所包含的总能量．计算中采用使能量极小的变分步骤导出电子密度 $n(r)$ 以及静电势 $\Phi(r)$ 的微分方程．

解　原子的总能量分三部分：电子的动能、电子和原子核电荷 Ze 间相互作用的势能 $E_{势}^{(1)}$ 以及电子之间的相互作用势能 $E_{势}^{(2)}$．

动能可从 167 题的基本考虑得出．设 $n(r)$ 是离原子核距离为 r 的某处的电子密度，则在此处的电子平均动能为

$$\overline{E}=\frac{3}{5}\zeta=\varkappa n^{\frac{2}{3}} \quad 其中 \quad \varkappa=\frac{3\hbar^2}{10m}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}. \tag{174.1}$$

于是电子的总动能为

$$E_{动}=\int d\tau\, n(r)\overline{E}(r)$$

或

$$E_{动}=\varkappa\int d\tau\, n^{\frac{5}{3}}. \tag{174.2}$$

由静电学可知，两部分势能为

$$E_{势}^{(1)}=-Ze^2\int\frac{d\tau}{r}\,n(r) \tag{174.3}$$

和

$$E_{势}^{(2)}=\frac{1}{2}e^2\iint d\tau d\tau'\,\frac{n(r)n(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \tag{174.4}$$

总能量，即(174.2)、(174.3)和(174.4)之和，为

$$E=\int d\tau\left\{\varkappa n^{\frac{5}{3}}-\frac{Ze^2}{r}n+\frac{1}{2}e^2n\int d\tau'\frac{n(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right\}\equiv\int d\tau\eta. \tag{174.5}$$

必须适当选取$n(r)$使E取极小值，$n(r)$受

$$\int d\tau\, n(r)=Z \tag{174.6}$$

的制约，这一积分是电子的总数．这是一个变分问题，由

$$\delta\int d\tau(\eta+\lambda n)=0 \tag{174.7}$$

来求解，其中λ为一乘数．将(174.5)代入(174.7)，得到

$$\int d\tau\delta n(r)\left\{\frac{5}{3}\varkappa n^{\frac{2}{3}}-\frac{Ze^2}{r}+e^2\int d\tau'\frac{n(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\lambda\right\}=0. \tag{174.8}$$

在得到上式中的第三项时已经运用了下述事实：在双重积分中$n(r)$和$n(r')$的变分项是相同的．如果(174.8)式的花括号内的式子等于零，则得E的极值．

由于在原子中n只和r有关而和方向无关，故花括号里的第三项可用球谐函数展开而写作

$$\int d\tau'\frac{n(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{4\pi}{r}\int_0^r dr'r'^2n(r')+4\pi\int_r^\infty dr'r'n(r').$$

所以，(174.8)的变分结果为

$$\frac{5}{3}\varkappa n^{\frac{2}{3}}-\frac{Ze^2}{r}+\frac{4\pi e^2}{r}\int_0^r dr'r'^2n(r')+4\pi e^2\times\int_r^\infty dr'r'n(r')+\lambda=0.$$

再对r微分消去λ，得

$$\frac{10}{9}\varkappa n^{-\frac{1}{3}}\frac{dn}{dr}+\frac{Ze^2}{r^2}-\frac{4\pi e^2}{r^2}\int_0^r dr'r'^2n(r')=0.$$

在计算中，积分对它们的极限的微分所得的各项相互消去．上式

乘上 r^2，再对 r 微分，可将积分去掉，而得到下列微分方程

$$\frac{10}{9}\varkappa\frac{d}{dr}\left(r^2n^{-\frac{1}{3}}\frac{dn}{dr}\right)=4\pi e^2r^2n. \tag{174.9}$$

用静电势 $\Phi(r)$ 代替 $n(r)$ 来表示上述方程式是有好处的，这可按照 172 题中引入的

$$n=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2me\Phi}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{174.10}$$

来变换，n 满足泊松方程 $\nabla^2\Phi=4\pi en$. 进一步取缩写

$$C=\frac{8}{3\pi}\frac{me^2}{\hbar^3}\sqrt{2me}, \tag{174.11}$$

于是得

$$\nabla^2\Phi=C\Phi^{\frac{3}{2}}, \tag{174.12}$$

这就是问题 172 中已经推导出来的方程，其中

$$\nabla^2\Phi=\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\Phi).$$

利用关系式(174.10)和(174.11)可将能量表达式(174.2)、(174.3)和(174.4)中的 n 的分数幂消去；为此，令

$$n=\frac{1}{4\pi e}\nabla^2\Phi \quad 或 \quad n=\frac{C}{4\pi e}\Phi^{\frac{3}{2}}. \tag{174.13}$$

这样就可得出

$$E_{动}=\frac{3}{20\pi}\int d\tau\rho\nabla^2\Phi; \tag{174.14a}$$

$$E_{势}^{(1)}=-\frac{Ze}{4\pi}\int d\tau\frac{\nabla^2\Phi}{r}; \tag{174.14b}$$

$$E_{势}^{(2)}=\frac{1}{32\pi^2}\iint d\tau d\tau_1\frac{\nabla^2\Phi\nabla_1^2\Phi}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1|}. \tag{174.14c}$$

利用中心对称性和引入函数

$$\varphi(r)=\frac{r}{Ze}\Phi(r) \tag{174.15}$$

代替 $\Phi(r)$，能使上述积分大为简化. 由上式得

$$\nabla^2\Phi=\frac{Ze}{r}\varphi''(r),$$

由(174.14a)得

$$E_{动}=\frac{3}{5}\int_0^\infty dr r^2\cdot\frac{Ze}{r}\varphi\cdot\frac{Ze}{r}\varphi''$$

$$=\frac{3}{5}Z^2e^2\left\{-(\varphi\varphi')_{r=0}-\int_0^\infty dr\varphi'^2\right\}. \qquad (174.16a)$$

同样,由(174.14b)得

$$E_{势}^{(1)}=-\frac{Ze}{4\pi}\int\frac{d\tau}{r}\frac{Ze}{r}\varphi''=Z^2e^2\varphi'(0). \qquad (174.16b)$$

为了计算积分(174.14c),先算内积分

$$I(r)=\frac{1}{4\pi}\int dr_1\frac{\nabla_1^2\Phi(r_1)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1|}=\frac{1}{r}\int_0^r dr_1 r_1^2\nabla_1^2\Phi+\int_r^\infty dr_1 r_1\nabla_1^2\Phi$$

$$=\frac{Ze}{r}\int_0^r dr_1 r_1\varphi''(r_1)+Ze\int_r^\infty dr_1\varphi''(r_1)$$

$$=\frac{Ze}{r}\{(\varphi-r\varphi')_{r=0}-\varphi(r)\},$$

于是,由(147.14c)得出

$$E_{势}^{(2)}=\frac{1}{8\pi}\int d\tau I(r)\nabla^2\Phi=\frac{1}{2}Ze\int_0^\infty dr r^2 I(r)\frac{\varphi''}{r}$$

$$=\frac{1}{2}Z^2e^2\left\{\int_0^\infty dr\varphi'^2+[r\varphi'^2]_{r=0}\right\}. \qquad (174.16c)$$

为方便起见,用 172 题中定义的无量纲变数

$$x=\frac{r}{a};\quad a=\left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\hbar^2}{mc^2} \qquad (174.17)$$

代替 r. 由于当 r 或 x 小时,有

$$\varphi(x)=1-\mu x+\cdots$$

于是在(174.16a–c)诸式中可以令

$$-(\varphi\varphi')_{r=0}=\mu/a;\ \left(\frac{d\varphi}{dr}\right)_{r=0}=-\mu/a;\ \left[r\left(\frac{d\varphi}{dr}\right)^2\right]_{r=0}=0,$$

于是，最后得到表达式

$$\left.\begin{aligned} E_{动} &= \frac{3}{5}\,\frac{Z^2e^2}{a}(\mu - J); \\ E_{势}^{(1)} &= -\frac{Z^2e^2}{a}\,\mu; \\ E_{势}^{(2)} &= \frac{1}{2}\,\frac{Z^2e^2}{a}\,J; \end{aligned}\right\} \tag{174.18}$$

其中

$$J = \int_0^\infty dx \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2. \tag{174.19}$$

这里积分 J 和微商 μ 都是与 Z 无关的，这是由于它们只与普适函数 $\varphi(x)$ 的性质有关. 它们的数值由 $\varphi(r)$ 确定，从 172 题知

$$\mu = -\varphi'(0) = 1.588, \quad J = 0.454. \tag{174.20}$$

于是原子的总能量，即(174.18)的三个表达式的总和为:

$$E = -\frac{Z^2e^2}{a}\left(\frac{2}{5}\,\mu + \frac{1}{10}\,J\right) = -0.680\,\frac{Z^2e^2}{a}, \tag{174.21}$$

它与 $Z^{\frac{7}{3}}$ 成正比，因其中 $a \propto Z^{-\frac{1}{3}}$. 用数值表出

$$E = -0.7687Z^{\frac{7}{3}} \text{ 里德伯} = -20.93Z^{\frac{7}{3}} \text{ 电子伏特}. \tag{174.22}$$

问题 175　用于托马斯-费密原子的维里定理

试按 151 题的程序来证明用于中性的托马斯-费密原子的维里定理. 从维里定理能得出(174.20)式的 μ 和 J 之间有什么关系？关于三部分能量间的比值能得到什么结论？

解　用标度变换法，以函数系列

$$n_\lambda(r) = \lambda^3 n(\lambda r)$$

代替 $n(r)$. 这系列中的函数都满足归一化条件:

$$\int d\tau\, n_\lambda(r) = Z.$$

于是，能量表达式(174.2)、(174.3)和(174.4)变换为

$$E_{动}(\lambda)=\lambda^2 E_{动};\quad E_{势}^{(1)}(\lambda)=\lambda E_{势}^{(1)};\quad E_{势}^{(2)}(\lambda)=\lambda E_{势}^{(2)}.$$

这样就得出

$$E(\lambda)=\lambda^2 E_{动}+\lambda E_{势}.$$

象151题中那样，在 $\partial E(\lambda)/d\lambda=0$ 中令 $\lambda=1$，可以得出维里定理：

$$2E_{动}+E_{势}=0. \tag{175.1}$$

如将三个能量表达式(174.18)代入上式，则得

$$\mu=\frac{7}{2}J. \tag{175.2}$$

(174.20)的数值证实了这个关系式. 于是(174.18)的能量表达式都可写作 J 的函数，即

$$E_{动}=\frac{3}{2}U;\quad E_{势}^{(1)}=-\frac{7}{2}U;\quad E_{势}^{(2)}=+\frac{1}{2}U, \tag{175.3}$$

而

$$U=\frac{Z^2e^2}{a}J. \tag{175.4}$$

由上述各式之和得总能量

$$E=-\frac{3}{2}U. \tag{175.5}$$

由上式再次得出前题末所给出的数值结果. 将总能(175.5)与动能(175.3)相比较，证实了维里定理.

问题176　托马斯-费密场的梯兹(Tietz)近似法

当 α(与 Z 无关)取适当值时，函数

$$\tilde{\varphi}(x)=\frac{1}{(1+\alpha x)^2} \tag{176.1}$$

可作为中性原子的托马斯-费密函数 $\varphi_0(x)$ 的良好的近似. 试运用允许 $\tilde{\varphi}$ 准确归一化的方法来确定常数 α 的值，并将 $\tilde{\varphi}$ 和 φ_0 作数值比较.

解 在172题中已证明，把电子密度 $n(r)$ 和原子势能(用原子单位)

$$V(r)=-\frac{Z}{r}\varphi_0(r) \tag{176.2}$$

之间的关系是

$$n(r)=\frac{1}{3\pi^2}(-2V)^{\frac{3}{2}}. \tag{176.3}$$

因此，归一化条件

$$4\pi\int_0^\infty dr\,r^2n(r)=Z \tag{176.4}$$

可写为

$$\frac{4}{3\pi}(2Z)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty dr\,r^{\frac{1}{2}}\varphi_0^{\frac{3}{2}}=Z. \tag{176.5}$$

这方程准确地为费密函数 $\varphi_0(x)$ 所满足，其中变量

$$x=r/a \quad 且 \quad a=0.88534Z^{-\frac{1}{3}}. \tag{176.6}$$

现在用(176.1)式的近似函数 $\tilde{\varphi}$ 代替 φ_0，并仍保持上述归一化．引入积分变量 $y=\alpha x=\frac{\alpha}{a}r$，可得出

$$\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\sqrt{Z}\left(\frac{a}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty\frac{dy\sqrt{y}}{(1+y)^3}=1. \tag{176.7}$$

作 $y=u^2$ 的代换，上积分就能解出．容易验证

$$\int\frac{dy\sqrt{y}}{(1+y)^3}=2\int du\,\frac{u^2}{(u^2+1)^3}$$

$$=\frac{1}{4}\left[\frac{u(u^2-1)}{(u^2+1)^2}+\tan^{-1}u\right].$$

所以，在 $0\leqslant y<\infty$ 的范围内，这积分的值为 $\pi/8$，将此值代入(176.7)式，得

$$\alpha=\left(\frac{2Z}{9}\right)^{\frac{1}{3}}a=0.60570Z^{\frac{1}{3}}a, \tag{176.8}$$

或将(176.6)中的 α 值代入，得

$$\alpha=0.53625. \tag{176.9}$$

用这个 α 值算出的函数 $\tilde{\varphi}$ 和费密函数 φ_0 的比较列于附表中.

x	$\tilde{\varphi}$	φ_0	$\tilde{\varphi}-\varphi_0$
0	1	1	0
0.1	0.9008	0.8817	+0.0191
0.2	0.8156	0.7931	+0.0225
0.5	0.6219	0.6070	+0.0149
1.0	0.4237	0.4240	−0.0103
2.0	0.2328	0.2430	−0.0102
5.0	0.0738	0.0788	−0.0050
10.0	0.0247	0.0243	+0.0004

文献 Tietz, T.; J. Chem. Physics **25**, 787 (1956); Z. Naturforsch. **23a**, 191(1968).——在梯兹原始论文中与(176.8)式归一化因子 0.60570 相当的因子是0.64309.所以梯兹近似法并不满足归一化条件.然而，他的 $\tilde{\varphi}-\varphi_0$ 偏差值在最重要的区域 $0<x<0.5$ 里稍小，但当 $x>1$ 时，却又大得多.

问题 177　托马斯-费密场的变分近似法

试用梯兹函数集

$$\tilde{\varphi}(x)=\frac{1}{(1+\alpha x)^2} \tag{177.1}$$

作为一变分问题的近似解的试探函数(带有里兹参数 α)。这变分问题是和托马斯-费密微分方程等效的.

解　微分方程

$$\varphi''=x^{-\frac{1}{2}}\varphi^{\frac{3}{2}} \tag{177.2}$$

可以用变分问题来代替。使积分

$$J=\int_0^\infty dx\left(\frac{1}{2}\varphi'^2+\frac{2}{5}x^{-\frac{1}{2}}\varphi^{\frac{5}{2}}\right) \tag{177.3}$$

取极值并具有固定的边界条件 $\varphi(0)=1$ 和 $\varphi(\infty)=0$。将满足边

界条件的试探函数(177.1)代入积分(177.3),得

$$J=\int_0^\infty dx\left\{\frac{2\alpha^2}{(1+\alpha x)^5}+\frac{2}{5}x^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{(1+\alpha x)^5}\right\}.$$

为了计算这积分,在第二项里令 $\alpha x=t^2$,于是,可以利用下面的公式计算,

$$\int\frac{dt}{(1+t)^5}=\frac{1}{8}\left\{\frac{t}{(1+t^2)^4}+\frac{7}{6}\frac{t}{(1+t^2)^3}\right.$$
$$\left.+\frac{35}{24}\frac{t}{(1+t^2)^2}+\frac{35}{16}\frac{t}{1+t^2}+\frac{35}{16}\tan^{-1}t\right\}.$$

这公式是容易验证的. 经计算得出

$$J=\frac{2}{5}\left(\alpha+\frac{35}{128}\alpha^{-\frac{1}{2}}\right). \tag{177.4}$$

由极值条件 $\frac{dJ}{d\alpha}=0$ 得出

$$\alpha=\left(\frac{35}{256}\right)^{\frac{2}{3}}=0.570. \tag{177.5}$$

这个值与前题的 $\alpha=0.536$ 只稍有偏差. 前题中的 α 值满足归一化条件

$$\int_0^\infty dx\sqrt{x}\,\varphi^2=1; \tag{177.6}$$

用现在的 α 值,它给出

$$\alpha^{-\frac{3}{2}}\cdot\frac{1}{8}=\frac{32}{35},$$

即:使积分 J 取极小值的近似场对应于原子中有 $\frac{32}{35}Z$ 个电子,而不是对应于 Z 个电子.

问题 178 K 电子的屏蔽

试将梯兹近似方法用于托马斯-费密模型来确定 K 电子结合能的屏蔽修正.

解 设从电荷数为Z的原子中移去两个K电子中的一个电子和一个单位的核电荷. 结果得到一个电荷数为$(Z-1)$的中性原子. 然后再把移去的核电荷加上去,但忽略它对$(Z-1)$个剩下电子的影响. 于是得到具有静电势(用原子单位)

$$\Phi(r)=\frac{1}{r}+\frac{Z-1}{r}\varphi(x) \tag{178.1}$$

的电荷分布,其中$\varphi(x)$是托马斯-费密函数,它的变数为

$$x=\frac{r}{a};\quad a=0.88534(Z-1)^{-\frac{1}{3}}. \tag{178.2}$$

在这势场中运动的电子(电荷为-1)的势能应是

$$V(r)=-\Phi(r); \tag{178.3}$$

所以,如将移去的K电子放回原子中去,它就会在这势能场中运动.

现在应用微扰理论. 不考虑屏蔽时,应有

$$V_0(r)=-\frac{Z}{r};$$

考虑屏蔽后,则有

$$\begin{aligned}V(r)&=-\frac{1}{r}+\frac{Z-1}{r}\varphi(x)\\&=V_0(r)+\frac{Z-1}{r}[1-\varphi(x)].\end{aligned} \tag{178.4}$$

不考虑屏蔽时,K电子的本征值E_0和本征函数$u_0(r)$为

$$E_0=-\frac{1}{2}Z^2;\quad u_0=\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}e^{-Zr}. \tag{178.5}$$

于是,由于屏蔽而产生的一级能移是

$$\Delta E_s=\int d\tau u_0^*\frac{Z-1}{r}(1-\varphi)u_0,$$

将u_0代入,得

$$\Delta E_s=4Z^3(Z-1)\int_0^\infty drre^{-2Zr}[1-\varphi(x)]. \tag{178.6}$$

现在引入梯兹近似法(见176题):

$$\varphi(x)=\frac{1}{(1+\alpha x)^2};\quad \alpha=0.53625. \tag{178.7}$$

为了计算积分(178.6),采用辅助变量

$$t=\beta(1+\alpha x), \tag{178.8}$$

其中

$$\beta=2Z\frac{a}{\alpha}=3.302Z(Z-1)^{-\frac{1}{3}}, \tag{178.9}$$

于是得到

$$\Delta E_s=Z(Z-1)e^{\beta}\int_{\beta}^{\infty}dte^{-t}\left(t-\beta-\frac{\beta^2}{t}+\frac{\beta^3}{t^2}\right). \tag{178.10}$$

这里遇到的指数积分

$$E_2(\beta)=\int_{\beta}^{\infty}\frac{dt}{t}e^{-t} \tag{178.11}$$

是一个熟知的函数,在β大时,它的渐近行为用半收敛级数

$$E_1(\beta)=\frac{e^{-\beta}}{\beta}\left\{1-\frac{1!}{\beta}+\frac{2!}{\beta^2}-\frac{3!}{\beta^3}\pm\cdots\right\} \tag{178.12}$$

来描写. (178.10)中最后一项的积分可化为如下函数

$$E_2(\beta)=\int_{\beta}^{\infty}\frac{dt}{t^2}e^{-t}=\frac{e^{-\beta}}{\beta}-E_1(\beta). \tag{178.13}$$

这样就可得到

$$\Delta E_s=Z(Z-1)\{1+\beta^2-\beta^2(1+\beta)e^{\beta}E_1(\beta)\}, \tag{178.14}$$

当$\beta\gg1$时,按照(178.12)用半收敛级数展开

$$\Delta E_s=Z(Z-1)\frac{4}{\beta}\left(1-\frac{9/2}{\beta}+\frac{24}{\beta^2}-\frac{150}{\beta^3}\pm\cdots\right). \tag{178.15}$$

现在转到能移ΔE_s的数值计算. 从(178.9)得出的β值确是大的(见下面的表),因此,(178.15)的近似是合理的. 表中以

Z	β	$(1-\cdots)$	ΔE_s	$\lvert E_0\rvert$	s	ΔE_r	$s_{修正}$
20	24.75	0.847	52.2	200	2.81		
30	32.25	0.880	95.2	450	3.36		
40	38.96	0.897	144.3	800	3.79	−17.1	3.35
50	45.12	0.910	198.0	1250	4.13	−41.7	3.26
60	50.90	0.921	257.3	1800	4.42	−86.3	2.94
70	56.35	0.927	318.6	2450	4.71	−160	2.34
80	61.56	0.932	384.0	3200	4.96	−273	1.62

$(1-\cdots)$标记的那一栏内的数值，是从(178.15)式的括号中的部分算出的，这级数是迅速收敛的. 当 Z 从 20 增至 80 时，能移 ΔE_s 的变化在 $|E_0|$ 的 26% 到 12% 之间. 作了这些修正已足够. 因为这些修正并不很小，二级微扰计算不会使它们有百分之几的改变；另一方面，托马斯-费密模型本身太粗糙，使得进一步的修正没有多少物理意义.

在 X 射线能谱学中习惯上用屏蔽常数 s 描述能移，s 由下式定义

$$E=-\frac{1}{2}Z^2+\Delta E_s=-\frac{1}{2}(Z-s)^2; \qquad (178.16)$$

即

$$s=Z\left(1-\sqrt{1-\frac{\Delta E_s}{|E_0|}}\right). \qquad (178.17)$$

表中所列屏蔽常数即由此式算出. 因 $\Delta E_s\lesssim\frac{1}{4}|E_0|$，(178.17)中的根式可粗略地展开，从而得

$$s\simeq Z\frac{\Delta E_s}{2|E_0|}=\frac{\Delta E_s}{Z},$$

它大约与 $Z^{\frac{1}{3}}$ 成正比. 如果试取下列型式的粗略公式，即

$$s=\sigma Z^{\frac{1}{3}},$$

则可得下列各对值：

$$Z = \quad 20 \qquad 50 \qquad 80$$

$$\sigma = \quad 1.03 \quad 1.12 \quad 1.15$$

然而，作这种详细计算并无好处．查看一下实验值就知道，直到大约 $Z=50$，这里计算的 s 值都是相当好的．但是，在 Z 超过 50 以后，s 的计算值随 Z 的增加缓慢上升；而实验上却与此不同，s 值不超过最大值 3.7，并且开始下降，先是缓慢下降，$Z=70$ 以后则迅速下降．Z 值大时的这种分歧，显然必须用相对论效应来解释．这情况大体示于表中的最后两栏中，只是粗略了些．按照相对论量子力学(参见 203 题)未微扰的 K 电子能量减少了

$$\Delta E_r = \frac{1}{8} Z^2 \left(\frac{Z}{137}\right)^2;$$

在计算表中最后一栏的屏蔽常数之前，必须先将这些能移和屏蔽能移 ΔE_s 加在一起．因为，对于大的 Z，总能移

$$\Delta E = \Delta E_s + \Delta E_r$$

比原来的 ΔE_s 小，并且随 Z 的增加而越来越小，于是对非屏蔽核场的偏离，即修正的 s 值，也将越来越小．这结果已为实验所证实．当然，严格说来，相对论修正不仅要用于 E_0，还要用于 ΔE_s．所以这里的结果仍然有些粗略．但是，托马斯-费密场的一般应用的结果大体都如此，因为这个场忽略了所有的壳层结构效应、

V. 非定态问题

问题 179　与时间无关微扰的二能级系统

对于一个只有两个定态 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$，及能量为 $\hbar\omega_1<\hbar\omega_2$ 的原子系统．在 $t=0$ 时，体系处在基态，与时间无关的微扰 W 作用上去．试计算在 t 时刻，体系处在随便哪一个态上的几率．

解　设 H 是无微扰体系的哈密顿量，用

$$H|1\rangle=\hbar\omega_1|1\rangle;\quad H|2\rangle=\hbar\omega_2|2\rangle \tag{179.1}$$

来定义它的两个定态．于是，具有微扰的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=(H+W)\psi \tag{179.2}$$

可用定态函数

$$\psi(t)=c_1(t)e^{-i\omega_1 t}|1\rangle+c_2(t)e^{-i\omega_2 t}|2\rangle \tag{179.3}$$

来解．这样建成严格的解是可能的，因为 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 组成一个完全正交归一集，所以(179.3)式是 ψ 对于这个集合的展开式，并具有与时间有关的系数．系数由初始条件

$$c_1(0)=1;\quad c_2(0)=0 \tag{179.4}$$

确定．

若把(179.3)式代入(179.2)式，并用 $\langle 1|$ 或 $\langle 2|$ 去乘①，则得两个关于系数的一阶微分方程：

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar}{i}\dot{c}_1e^{-i\omega_1 t}&=\langle 1|W|1\rangle c_1e^{-i\omega_1 t}+\langle 1|W|2\rangle c_2e^{-i\omega_2 t}\\ -\frac{\hbar}{i}\dot{c}_2e^{-i\omega_2 t}&=\langle 2|W|1\rangle c_1e^{-i\omega_1 t}+\langle 2|W|2\rangle c_2e^{-i\omega_2 t}\end{aligned} \tag{179.5}$$

让我们采用下列简洁写法：

① 在这里"乘法"的意思是指在希耳伯空间中标量积的组成，也就是一对态之间的矩阵元．

$$\langle \mu | W | \nu \rangle = W_{\nu\mu},$$

于是，由于算符 W 是厄密性的，对角矩阵元 W_{11} 和 W_{22} 是实数，而复数非对角元是共轭的：

$$W_{12} = W_{21}^*.$$

利用缩写

$$\omega_0 = \omega_2 - \omega_1 \tag{179.6}$$

（因此 $\hbar\omega_0$ 是两个能级的能量差），则方程(179.5)式可以写为

$$\left.\begin{aligned} \hbar\dot{c}_1 &= W_{11}c_1 + W_{21}e^{-i\omega_0 t}c_2, \\ \hbar\dot{c}_2 &= W_{12}e^{i\omega_0 t}c_1 + W_{22}c_2. \end{aligned}\right\} \tag{179.7}$$

显然，可以用

$$c_1 = Ae^{-i\omega t}; \quad c_2 = Be^{-i(\omega-\omega_0)t} \tag{179.8}$$

来解这些方程．把(179.8)式代入(179.7)式，立刻可以得到线性方程

$$(W_{11} - \hbar\omega)A + W_{21}B = 0,$$

$$W_{12}A + (W_{22} - \hbar\omega + \hbar\omega_0)B = 0.$$

对于下述两种频率，这两个方程的行列式为零：

$$\omega_{\mathrm{I,II}} = \frac{W_{11}}{\hbar} + \frac{1}{2}\gamma \pm \sigma \tag{179.9}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} \hbar\gamma &= W_{22} - W_{11} + \hbar\omega_0, \\ \hbar\sigma &= \sqrt{\frac{1}{4}\gamma^2 + |W_{12}|^2}. \end{aligned}\right\} \tag{179.10}$$

进一步，得到

$$B_{\mathrm{I,II}} = \frac{\hbar\omega_{\mathrm{I,II}} - W_{11}}{W_{21}} A_{\mathrm{I,II}} \tag{179.11}$$

因此

$$c_1(t) = A_{\mathrm{I}}e^{-i\omega_{\mathrm{I}}t} + A_{\mathrm{II}}e^{-i\omega_{\mathrm{II}}t};$$

$$c_2(t) = \frac{1}{W_{21}} e^{i\omega_0 t}\{(\hbar\omega_{\mathrm{I}} - W_{11})A_{\mathrm{I}}e^{-i\omega_{\mathrm{I}}t} + (\hbar\omega_{\mathrm{II}} - W_{11})A_{\mathrm{II}}e^{-i\omega_{\mathrm{II}}t}\}.$$

可以利用初始条件(179.4)式来计算常数 A_{I} 和 A_{II} 的值．经简单

计算后，得到下列结果：

$$c_1(t)=\exp\left[-i\left(\frac{W_{11}}{\hbar}+\frac{1}{2}\gamma\right)t\right]\left\{\cos\sigma t+i\frac{\gamma}{2\sigma}\sin\sigma t\right\};$$

(179.12a)

$$c_2(t)=-i\frac{W_{12}}{\hbar\sigma}\exp\left[-i\left(\frac{W_{11}}{\hbar}+\frac{1}{2}\gamma-\omega_0\right)t\right]\sin\sigma t.$$

(179.12b)

于是，体系处在激发态时的几率将是

$$|c_2(t)|^2=\frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2\sigma^2}\sin^2\sigma t$$

或者，利用(179.10)式

$$|c_2(t)|^2=\frac{4|W_{12}|^2}{(\hbar\gamma)^2+4|W_{12}|^2}\sin^2\sigma t. \qquad (179.13)$$

另一方面，体系再处于原来基态的几率变为

$$|c_1(t)|^2=\cos^2\sigma t+\left(\frac{\gamma}{2\sigma}\right)^2\sin^2\sigma t$$

或者

$$|c_1(t)|^2=1-\frac{4|W_{12}|^2}{(\hbar\gamma)^2+4|W_{12}|^2}\sin^2\sigma t. \qquad (179.14)$$

注意，(179.13)式和(179.14)式之和是 1. 这系统是在两个能级之间振荡，其时间周期为 π/σ.

问题 180 二能级系统的周期微扰

给出和前题同样的二能级系统. 然而，在 $t=0$ 时，有一个周期微扰 $W\cos\omega t$ 作用上去(例如光波)，它的频率 ω 几乎与两条能级的能量差 $\hbar\omega_0=\hbar(\omega_2-\omega_1)$ 相当. 试计算在 t 时刻去掉微扰之后，这系统分别处在两个态上的几率.

解 薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=[H+W\cos\omega t]\psi \qquad (180.1)$$

可用下述函数来解

$$\psi(t)=c_1(t)e^{-i\omega_1 t}|1\rangle+c_2(t)e^{-i\omega_2 t}|2\rangle, \tag{180.2}$$

其初始条件为

$$\psi(0)=1, \quad 或 \quad c_1(0)=1; \quad c_2(0)=0. \tag{180.3}$$

这里，$|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 是定态方程

$$H|1\rangle=\hbar\omega_1|1\rangle;\ H|2\rangle=\hbar\omega_2|2\rangle \tag{180.4}$$

的解，并且假定 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 是正交归一的．把 (180.2) 式代入 (180.1)式，并把结果和$\langle 1|$或$\langle 2|$作标量乘法，得到两个关于 $c_1(t)$ 和 $c_2(t)$ 的微分方程如下：

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar}{i}\dot{c}_1e^{-i\omega_1 t}&=\cos\omega t\{\langle 1|W|1\rangle c_1e^{-i\omega_1 t}+\langle 1|W|2\rangle c_2e^{-i\omega_2 t}\};\\
-\frac{\hbar}{i}\dot{c}_2e^{-i\omega_2 t}&=\cos\omega t\{\langle 2|W|1\rangle c_1e^{-i\omega_1 t}+\langle 2|W|2\rangle c_2e^{-i\omega_2 t}\}.
\end{aligned} \tag{180.5}$$

引入缩写

$$\omega_0=\omega_2-\omega_1$$

并且写出

$$\omega-\omega_0=\Delta\omega; \tag{180.6}$$

于是可假设

$$|\Delta\omega|\ll\omega_0. \tag{180.7}$$

因此方程(180.5)变为

$$\begin{aligned}
i\dot{c}_1&=\frac{1}{2\hbar}\{\langle 1|W|1\rangle(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})c_1+\langle 1|W|2\rangle\\
&\quad\times(e^{i\Delta\omega t}+e^{-i(\omega+\omega_0)t})c_2\};\\
i\dot{c}_2&=\frac{1}{2\hbar}\{\langle 2|W|1\rangle(e^{i(\omega+\omega_0)t}+e^{-i\Delta\omega t})c_1+\langle 2|W|2\rangle\\
&\quad\times(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})c_2\}.
\end{aligned}$$

在这里遇到了频率为 ω 和 2ω 的高频项和频率为 $\Delta\omega$ 的低频项之间的非常显著的差别．对于时间间隔 $2\pi/\omega$ 取平均，所有的高频项贡献相互抵消．所以若用

$$C_\mu(t)=\frac{1}{2\tau}\int_{t-\tau}^{t+\tau}dt'c_\mu(t')\quad 其中\quad \tau=\pi/\omega$$

来代替 c_1 和 c_2，则这些平均值满足更简单的方程：

$$\left.\begin{aligned}i\dot{C}_1&=\frac{1}{2\hbar}\langle 1|W|2\rangle e^{i\Delta\omega t}C_2;\\ i\dot{C}_2&=\frac{1}{2\hbar}\langle 2|W|1\rangle e^{-i\Delta\omega t}C_1\end{aligned}\right\}\tag{180.8}$$

上式右边缓慢变化的因子 $\exp(\pm i\Delta\omega t)$ 在取平均时是当作常数来处理的.

微分方程 (180.8) 是可以严格求解的. 先分别对两个式子求微分，并利用原来的方程(180.8)来消去另外一个变量和它的一阶导数. 如此得到

$$\left.\begin{aligned}\ddot{C}_1-i\Delta\omega\dot{C}_1+\frac{1}{4}\Omega^2C_1&=0;\\ \ddot{C}_2+i\Delta\omega\dot{C}_2+\frac{1}{4}\Omega^2C_2&=0\end{aligned}\right\}\tag{180.9}$$

其中

$$\Omega^2=\frac{1}{\hbar^2}\langle 1|W|2\rangle\langle 2|W|1\rangle=\frac{1}{\hbar^2}|\langle 2|W|1\rangle|^2.\tag{180.10}$$

利用缩写

$$R=\sqrt{\Omega^2+(\Delta\omega)^2}\tag{180.11}$$

可导出满足初始条件(180.3)的下述解：

$$\left.\begin{aligned}C_1&=e^{i\frac{\Delta\omega}{2}t}\left\{\cos\frac{Rt}{2}+A\sin\frac{Rt}{2}\right\};\\ C_2&=e^{-i\frac{\Delta\omega}{2}t}B\sin\frac{Rt}{2}.\end{aligned}\right\}\tag{180.12}$$

把(180.12)代入一次方程(180.8)，可以算出两个积分常数 A 和 B. 结果是

$$A=-i\frac{\Delta\omega}{R};\quad B=-i\frac{\langle 2|W|1\rangle}{\hbar R}.\tag{180.13}$$

在时刻 t 这体系处在激发态的几率是

$$|C_2|^2 = \frac{\Omega^2}{(\Delta\omega)^2}\sin^2\frac{Rt}{2}, \qquad (180.14)$$

这体系又处于基态的几率是

$$|C_1|^2 = \cos^2\frac{Rt}{2} + \frac{(\Delta\omega)^2}{\Omega^2+(\Delta\omega)^2}\sin^2\frac{Rt}{2}. \qquad (180.15)$$

根据 (180.14) 式，这个激发是典型的共振过程，它的几率随着 $|\Delta\omega|$ 值的增加很快地减小. 不用说，这仅在条件 (180.7) 式仍然满足时才成立. 这个过程以频率 R 周期地重复，R 由方程 (180.11) 决定，即主要由矩阵元的值决定，因此经过一个时间间隔

$$t_n = \frac{2\pi n}{R}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (180.16)$$

之后，这体系又将处于基态. 若周期微扰是这样进行的. 例如把一个光波在时刻 $t=0$ 作用上去，而在时刻 $t=t_n$ 去掉，则这个体系不会有变化.

应用 设哈密顿量 H 描写一个 s 态电子在 z 方向的磁场 $\mathscr{H}_0$ 中产生的塞曼效应，于是 $\hbar(\omega_2-\omega_1)$ 是两个自旋取向之间的能级分裂，即 $\omega_0 = 2\mu\mathscr{H}_0/\hbar$ ($|2\rangle$ 是较高的态，$|1\rangle$ 是较低的态). 现在设微扰是由周期磁场 $\mathscr{H}'\cos\omega t$ 构成的，因此

$$W' = -\mu(\sigma\cdot\mathscr{H}')\cos\omega t, \quad \mu = -\frac{e\hbar}{2mc}.$$

若磁场 $\mathscr{H}'$ 平行于 $\mathscr{H}_0$，则矩阵元 $\langle 1|W|2\rangle$ 为零；于是态 $|1\rangle$ 和态 $|2\rangle$ 独立地被微扰，而不引起跃迁. 与此相反，若取 $\mathscr{H}'$ 垂直于 $\mathscr{H}_0$，例如在 x 方向，则 W' 的对角矩阵元为零. 我们正好得到上面用

$$\langle 1|W|2\rangle = \langle 2|W|1\rangle = -\mu\mathscr{H}'$$

描述的情况. 和前面一样，若 $\omega \approx \omega_0$，就会出现共振，这体系将在它的两个磁态之间交替. 这是顺磁共振的最简单情况.

问题 181　狄拉克的微扰方法

假定一个原子体系具有非简并的定态 ψ_k. 设在时刻 $t=0$ 这体系处在基态 ψ_0，然后引入微扰（与时间有关或与时间无关）使它

跃迁到其他的态 ψ_l. 试确定微扰很小时，在时刻 t 去掉微扰后，体系处在态 ψ_l 上的几率.

解 设无微扰态满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}_k = H\psi_k \quad \text{其中} \quad \psi_k = |k\rangle e^{-i\omega_k t};\ E_k = \hbar\omega_k \tag{181.1}$$

和

$$\langle l|k\rangle = \delta_{kl}. \tag{181.2}$$

微扰 W 作用上去以后，有微分方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi} = (H+W)\psi, \tag{181.3}$$

其中波函数 ψ 可以展开成一个级数

$$\psi = \sum_k a_k(t)\psi_k. \tag{181.4}$$

由于(181.2)式，于是从(181.4)式得到①

$$\sum_k |a_k(t)|^2 = 1. \tag{181.5}$$

每一个 $|a_k|^2$ 是体系在时刻 t 处在状态 ψ_k 上的几率.

把(181.4)式代入微分方程(181.3)中，得到

$$-\frac{\hbar}{i}\sum_k(\dot{a}_k - i\omega_k a_k)\psi_k = \sum_k(\hbar\omega_k + W)a_k\psi_k,$$

或者，用 $\langle l|$ 组成希耳伯空间中的标量积，并利用(181.2)式得到

$$\dot{a}_l = -\frac{i}{\hbar}\sum_k e^{-i(\omega_k-\omega_l)t}\langle l|W|k\rangle a_k. \tag{181.6}$$

直到现在为止，没有作过任何近似；这个方程说明任何态 $|l\rangle$ 随时间的变化率与体系在微扰作用下所有和 $|l\rangle$ 相联系的态有关. 当然，这是(181.5)式的结果：若其中一个系数 a_l 改变，则为了保持(181.5)式的求和为常数，其他系数也必须变化(参考关于只有两

① 若除不连续谱外还有连续谱存在，则利用一个周期性体积，可以使它变换成形式上不连续的谱，这样就能包括在(181.4)式和(181.5)式的求和号内，而没有其他数学上的困难.

个态的体系的问题179).

若微扰很小，在一级近似下，可以在(181.6)式的右边代入初始值

$$a_k(0)=\delta_{k0}. \tag{181.7}$$

于是，对于 $l\neq 0$，方程组(181.6)变为

$$\dot{a}_l=-\frac{i}{\hbar}e^{-i(\omega_0-\omega_l)t}\langle l|W|0\rangle. \tag{181.8}$$

(与问题179相比，这是更为特殊的行为，因为它忽略掉从 $|l\rangle$ 到 $|0\rangle$的相反的跃迁，等等). (181.8)式积分，得到

$$a_l(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt\langle l|W|0\rangle e^{-i(\omega_0-\omega_l)t}. \tag{181.9}$$

当然，这个积分在很大程度上决定于微扰 W (从而它的矩阵元)与时间之间有怎样的关系.

我们的近似只有在

$$|\langle l|W|0\rangle|t/\hbar\ll 1 \tag{181.10}$$

的条件下有效，因此系数 $a_l(t)$ 始终是很小的. 因为从(181.10)式可以得到下式：

$$(\omega_l-\omega_0)t\ll\frac{\hbar(\omega_l-\omega_0)}{|\langle l|W|0\rangle|}.$$

上式分子中的激发能常常比分母中的矩阵元大得多，在(181.8)式或(181.9)式中的指数部分仍然可以很大，因此产生 $a_l(t)$ 的周期振荡，这一点和一级微扰近似的基本概念不大一致. 然而，在下面的问题中，我们将说明如何消除这个困难.

问题182 周期微扰：共振

假设前一问题的原子体系受到下面的周期场的微扰：

$$W(t)=\mathscr{W}e^{-i\omega t}+\mathscr{W}^{\dagger}e^{i\omega t} \tag{182.1}$$

试讨论共振吸收和辐照场的有限频宽对跃迁的影响.

解 若把(182.1)式代入一般的一级微扰公式(181.9)式，并进行积分，则得

$$a_l(t)=-\frac{i}{\hbar}\left\{\langle l|\mathscr{W}|0\rangle\frac{e^{i(\omega_l-\omega_0-\omega)t}-1}{i(\omega_l-\omega_0-\omega)}\right.$$

$$\left.+\langle l|\mathscr{W}^{\dagger}|0\rangle\frac{e^{i(\omega_l-\omega_0+\omega)t}-1}{i(\omega_l-\omega_0+\omega)}\right\}. \tag{182.2}$$

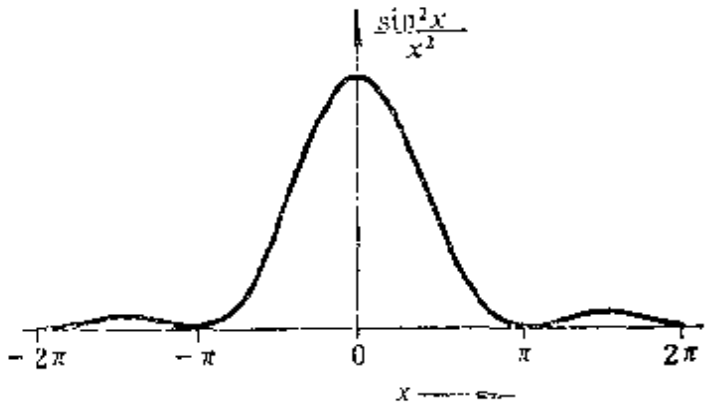


图 70 自然线形 $\sin^2 x/x^2$

激发能

$$E_{ex}=\hbar(\omega_l-\omega_0)$$

是正的，若 $\hbar\omega=E_{ex}$，则第一项有共振，而第二项没有共振．因此，若玻尔频率条件

$$\omega=\omega_l-\omega_0 \tag{182.3}$$

成立，则这体系能够从所加的交变场中吸收能量：

$$|a_l(t)|^2=\frac{4|\langle l|\mathscr{W}|0\rangle|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_l-\omega_0-\omega)t}{(\omega_l-\omega_0-\omega)^2}. \tag{182.4}$$

这个公式还应对辐照场的有限频宽作修正．设 $\rho(\omega)d\omega$ 是 ω 和 $\omega+d\omega$ 之间的辐照场的强度，则

$$|a_l(t)|^2=\int d\omega\rho(\omega)\cdot 4|\langle l|\mathscr{W}|0\rangle|^2\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_l-\omega_0-\omega)t}{\hbar^2(\omega_l-\omega_0-\omega)^2} \tag{182.5}$$

或者用

$$\frac{1}{2}[\omega-(\omega_l-\omega_0)]t=x$$

作为积分变量，则有

$$|a_l(t)|^2=2t\int dx\rho(\omega_l-\omega_0+2x/t)\left|\left\langle l\left|\frac{\mathscr{W}}{\hbar}\right|0\right\rangle\right|^2\frac{\sin^2 x}{x^2}.$$

这里，最后一个因子 $\sin^2 x/x^2$ 在 $x=0$ 处有一个明显的极大值，在它的两边很快地减小(图 70)，因此 $|x|<\pi$ 给下列积分带来主要的贡献：

$$\int dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \pi.$$

在这个 x 值的范围中 $|2x/t|<2\pi/t$，或者因为前题的条件(181.10)式必须成立，即

$$\langle l|\mathscr{W}|0\rangle 1 \ll \frac{\hbar}{t},$$

并且因为这个矩阵元通常比激发能小得多，因此可把 ρ 的自变量简单地用 $\omega_l-\omega_0$ 来代替．类似的讨论对于矩阵元也成立，它也可以作为与 x 无关的常数来处理，因此得到

$$|a_l(t)|^2 = 2\pi t \left|\left\langle l\left|\frac{\mathscr{W}}{\hbar}\right|0\right\rangle\right|^2 \rho(\omega_l-\omega_0). \qquad (182.6)$$

体系处在任一态 $|l\rangle$ 上的几率与时间成正比地增加．因此我们可以合理地定义一个与时间无关的跃迁几率：

$$P_l = \frac{1}{t}|a_l(t)|^2, \qquad (182.7)$$

即

$$P_l = 2\pi \left|\left\langle l\left|\frac{\mathscr{W}}{\hbar}\right|0\right\rangle\right|^2 \rho(\omega_l-\omega_0). \qquad (182.8)$$

注 最后的结果表明它很类似问题 183 所讨论的黄金规则．然而，必须记住，黄金规则是描写对很接近的末态的求和，而我们引入的是对初始场性质的连续区的求和，这里没有证明这种求和对于求几率的方程(182.5)是必需的，而对于求振幅的公式(182.2)是不需要的．

问题 183　散射的黄金规则

假设一束初动量为 $\boldsymbol{p}_i=\hbar\boldsymbol{k}_i$ 的粒子，被势 $W(r)$ 弹性散射到处于立体角元 $d\Omega_f$ 内的、末动量为 $\boldsymbol{p}_f=\hbar\boldsymbol{k}_f$ 的状态．试用狄拉克微扰法推导出微分散射截面 $d\sigma/d\Omega_f$．

解 在一级狄拉克近似下，可以从(181.9)式推得

$$a_f(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt\langle f|W|i\rangle e^{-i(\omega_i-\omega_f)t}. \tag{183.1}$$

若假设矩阵元与时间无关，则上式可以积分，并得到下列基本的公式

$$|a_f(t)|^2=\frac{4|\langle f|W|i\rangle|^2}{\hbar^2(\omega_i-\omega_f)^2}\sin^2\frac{(\omega_i-\omega_f)t}{2}. \tag{183.2}$$

现在初态和末态都处在连续谱中．采用归一化体积 V，初、末态波函数分别是：

$$|i\rangle=V^{-\frac{1}{2}}e^{ik_i\cdot r};\quad \langle f|=V^{-\frac{1}{2}}e^{-ik_f\cdot r}. \tag{183.3}$$

即使对于有限体积 V，在 $\langle f|$ 的附近也有许多末态，因此在 $V\to\infty$ 的极限下，在无限小的范围内就有无限多的末态．若问一个具有明确的 k_f 的末态 $\langle f|$ 的几率是多少，就变得没有意义了；我们只可以问到达一定间隔的几率是多少．

假定 $\rho_f(E_f)dE_f$ 是末态能量为 E_f，动量在立体角元 $d\Omega_f$ 之内，处在间隔 dE_f 中的能级，于是每单位时间跃迁到这个角区间内的跃迁几率为

$$dT=\frac{1}{t}\int dE_f\rho_f(E_f)|a_f(t)|^2. \tag{183.4}$$

只是因为这个表达式与时间无关，而且积分间隔是一个非常窄的能量区间，所以这个定义是合理的．

若引入变量

$$x=\frac{1}{2}(\omega_f-\omega_i)t,$$

并把 $E_f=\hbar\omega_f$ 代入，因此得到

$$dE_f=\frac{2\hbar}{t}dx,$$

则根据(183.2)和(183.4)式，得到，

$$dT=\frac{2}{\hbar}\int dx\rho_f(E_f)\frac{\sin^2 x}{x^2}|\langle f|W|i\rangle|^2,$$

对于这个积分，前题的讨论在这里仍然适用，因此

$$dT=\frac{2\pi}{\hbar}\rho_f(E)\,|\langle f|W|i\rangle|^2. \tag{183.5}$$

对于在 $x=0$ 周围的非常大的区间求积分，相当于对共振能量 $E_f=E_i$ 附近很窄的一个能量间隔求积分. 因为无限小区间 $d\Omega_f$ 仍包含在 ρ_f (将这里的 ρ_f 写为 $d\rho_f$ 也许更好)内，所以用微分记号 dT 是合适的. 方程(183.5)称为黄金规则.

跃迁几率还明显地依赖于归一化体积 V 和粒子打在障碍物上的初速度 $v_0=\hbar k_i/m$,

$$dT=\frac{v_0}{V}d\sigma, \tag{183.6}$$

这里 $d\sigma$ 与 V 无关，是一个有物理意义的量. 它具有 cm^2 的量纲，就是微分截面，可从黄金规则的表达式(183.5)得出：

$$d\sigma=\frac{2\pi}{\hbar}\rho_f(E)\frac{V}{v_0}|\langle f|W|i\rangle|^2. \tag{183.7}$$

这里还需要计算末态密度 ρ_f 和矩阵元的值.

末态密度可以根据下述事实推导出来. 在一个等于 $(2\pi\hbar)^3/V$ 的动量空间元 d^3p 中，只有一个态(设粒子没有自旋). 因此，在任意元 d^3p 中，将有

$$\frac{d^3pV}{8\pi^3\hbar^3}$$

个态. 由于

$$d^3p=p^2dp\,d\Omega=mp\,dE\,d\Omega,$$

我们有

$$\rho_f dE_f=\frac{mp_f\,dE_f\,d\Omega_f V}{8\pi^3\hbar^3}, \tag{183.8}$$

因此

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f}=\left(\frac{mV}{2\pi\hbar^2}\right)^2\frac{k_f}{k_i}|\langle f|W|i\rangle|^2 d\Omega_f, \tag{183.9}$$

对于弹性散射，上式中的因子 $k_f/k_i=1$，可以略去。

对于中心对称的势 $W(r)$，用平面波(183.3)组成的矩阵元可以写为

$$\langle f|W|i\rangle=\frac{1}{V}\int d^3x e^{-i(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r})}W(r), \tag{183.10}$$

其中 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k}_i$ 是动量转移矢量(以 $\hbar$ 为单位)。对极角求积分，得出

$$\langle f|W|i\rangle=\frac{4\pi}{V}\int_0^\infty dr r^2 W(r)\frac{\sin Kr}{Kr}. \tag{183.11}$$

因此，最后得到截面公式为：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f}=\left|\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr r^2 W(r)\frac{\sin Kr}{Kr}\right|^2, \tag{183.12}$$

也就是一级玻恩近似的结果(参看 102 题)。当然，这是可以预料到的，因为在开始用的方程(183.1)中，已经把散射势当作微扰来处理，因而必然用平面波来描写初态和末态。

问题 184　在动量空间中的玻恩散射

试用与时间有关的微扰方法，在一级近似下推导在动量空间中的微分散射截面。假定微扰在 $t=0$ 时作用上去并且以后当作一个常数。

解　根据问题 14，与时间有关的薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi \tag{184.1}$$

对应于动量空间中的积分-微分方程：

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{f}(\boldsymbol{k},\ t)=\frac{\hbar^2}{2m}k^2 f(\boldsymbol{k},\ t)+\int d^3k' W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')f(\boldsymbol{k}',\ t), \tag{184.2}$$

其中 $f(\boldsymbol{k},\ t)$ 是 $\psi(\boldsymbol{r},\ t)$ 的傅里叶变换式，$W(\boldsymbol{k})$ 是 $V(\boldsymbol{r})$ 的傅里叶变换式，并采用问题 14 中所取的归一化。将 f 写为下列形式

$$f(\boldsymbol{k},\ t)=v(\boldsymbol{k},\ t)e^{-i\omega t};\quad \omega=\frac{\hbar}{2m}k^2, \tag{184.3}$$

可使方程(184.2)稍为简化. 于是得到

$$\frac{\partial v(\boldsymbol{k},\ t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\int d^3k'W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')e^{i(\omega-\omega')t}v(\boldsymbol{k}',\ t). \tag{184.4}$$

为了在一级近似下来解(184.4)式,我们用未微扰的函数

$$v_0(\boldsymbol{k},\ t)=C(2\pi)^{\frac{3}{2}}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) \tag{184.5}$$

代替积分号内的 v,也就是用平面波的傅里叶变换式

$$\psi_0(\boldsymbol{r},\ t)=Ce^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{184.6}$$

来代替 v. 于是方程(184.4)简化为

$$\frac{\partial v(\boldsymbol{k},\ t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}C(2\pi)^{\frac{3}{2}}W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)e^{i(\omega-\omega_0)t},$$

并且由积分得到

$$v(\boldsymbol{k},\ t)=-\frac{C}{\hbar}(2\pi)^{\frac{3}{2}}W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\frac{e^{i(\omega-\omega_0)t}-1}{\omega-\omega_0}. \tag{184.7}$$

于是,在时刻 t,一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子在 d^3k 内被找到的几率为(参考问题 15)

$$|v(\boldsymbol{k},\ t)|^2d^3k=\frac{|C|^2(2\pi)^3}{\hbar^2}|W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)|^2t^2\frac{\sin^2x}{x^2}k^2dk\,d\Omega,$$

其中

$$x=\frac{1}{2}(\omega-\omega_0)t.$$

这个表达式还必须对能量共振积分(参考问题 183);因为

$$kdk=\frac{2m}{\hbar t}dx$$

和

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\frac{\sin^2x}{x^2}=\pi,$$

我们得到一个含 t 的一次方的表达式. 因而由下式定义的跃迁几

率

$$dT=\frac{1}{t}d\Omega\int dk\,k^2|v(\boldsymbol{k},\ t)|^2 \tag{184.8}$$

变为

$$dT=\frac{|C|^2(2\pi)^4mk}{\hbar^3}|W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)|^2d\Omega. \tag{184.9}$$

微分截面由下式定义：

$$dT=|C|^2v_0\,d\sigma=|C|^2\frac{\hbar k}{m}\,d\sigma; \tag{184.10}$$

于是得出

$$d\sigma=\frac{(2\pi)^4m^2}{\hbar^4}|W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)|^2d\Omega. \tag{184.11}$$

这个一般的公式对于有心力势 $V(r)$ 还可以简化一些，在辏力势的傅里叶变换式中，有可能对极角求积分：

$$\begin{aligned}W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)&=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3x e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}V(r)\\&=\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dr\,r^2V(r)\,\frac{\sin Kr}{Kr},\end{aligned} \tag{184.12}$$

其中 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0$ 是动量转移（以 $\hbar$ 为单位），也就是

$$K=2k_0\sin\frac{\vartheta}{2}, \tag{184.13}$$

这里 ϑ 是偏转角. 把(184.12)式代入(184.11)式中，最后得到熟知的玻恩结果：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left\{\frac{2m}{\hbar^3}\int_0^\infty dr\,r^2V(r)\,\frac{\sin Kr}{Kr}\right\}^2. \tag{184.14}$$

注意 从动量函数 f 到 v 的转换，一般地讲，就是从薛定谔表象到相互作用表象的转换，因为如果没有相互作用 $W(\boldsymbol{k})$，v 就不再与时间有关. 截面公式(184.14)也曾在问题 105 中推得. 还必须注意，傅里叶变换式 $W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)$ 就是（归一化因子除外）势 $V(r)$ 在通常空间中的矩阵元：

$$(2\pi)^3W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)=\int d^3k'e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}=\langle\boldsymbol{k}|V|\boldsymbol{k}_0\rangle.$$

利用上式可将截面公式(184.11)写成下列形式:

$$d\sigma=\left|\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle \boldsymbol{k}|V|\boldsymbol{k}_0\rangle\right|^2 d\Omega. \tag{184.15}$$

问题 185　原子的库仑激发

假定一个速度为 v 的电子在离开碱金属原子的距离为 b ("碰撞参数")处经过; 假定它的速度比原子中的价电子的速度大得多. 它和后者的库仑相互作用可能引起激发, 试用微扰方法来确定激发截面.

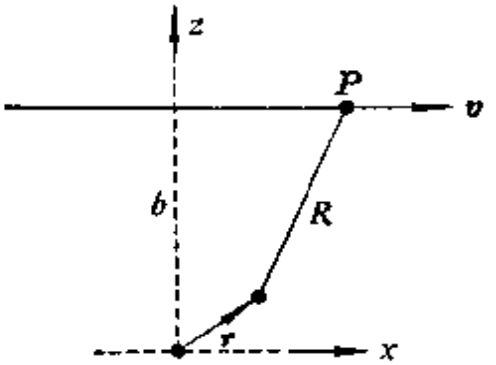


图 71　两个相互作用粒子的位置的示意图

解　原子电子的位置在图 71 中示出, 它相对于原子核心的位置 $\boldsymbol{r}$ 具有坐标 x, y, z, 如图所示. 它和经过 P 点的电子的相互作用是

$$V(t)=\frac{e^2}{R(t)}, \tag{185.1}$$

其中

$$R^2=(vt-x)^2+y^2+(b-z)^2. \tag{185.2}$$

这里忽略入射电子的偏转和减速. 当然, 经典的处理是不考虑交换现象之类的重叠效应的. 对于比距离 b 和原子的尺寸小得多的波长, 这种近似是合理的. 让我们进一步假设碰撞参数 b 比原子大很多, 因此可以展开

$$\frac{1}{R}=\frac{1}{\sqrt{(vt)^2+b^2}}\left\{1+\frac{vtx+bz}{(vt)^2+b^2}\right\}. \tag{185.2'}$$

于是, 在这种近似下, 基态(下标为 0) 和激发态 (k) 之间的矩阵元变为

$$\langle k|V(t)|0\rangle=\frac{e^2}{[(vt)^2+b^2]^{3/2}}\{vt\langle k|x|0\rangle+b\langle k|z|0\rangle\},\tag{185.3}$$

(185.2′) 式中第一(静态的)项仅对弹性散射的对角元 $\langle 0|V|0\rangle$ 有贡献.

若未微扰的波函数 $|k\rangle$ 满足薛定谔方程

$$H|k\rangle=\hbar\omega_k|k\rangle,$$

则微扰的波函数可以写为:

$$\psi=e^{-i\omega_0 t}|0\rangle+\sum_k{}'a_k(t)e^{-i\omega_k t}|k\rangle,\tag{185.4}$$

其中(参考问题 181)

$$a_k(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt e^{i(\omega_k-\omega_0)t}\langle k|V(t)|0\rangle.\tag{185.5}$$

于是当入射电子经过以后,原子处在激发态 $|k\rangle$ 上的几率是

$$p_k=|a_k(\infty)|^2,\tag{185.6}$$

通过对碰撞参数求积分,得到态 $|k\rangle$ 的激发截面为

$$\sigma_k=2\pi\int_0^\infty db\,b|a_k(\infty)|^2.\tag{185.7}$$

因此这个问题化为用矩阵元(185.3)来计算 $a_k(\infty)$ 的值:

$$a_k(\infty)=-\frac{i}{\hbar}e^2\int_{-\infty}^{+\infty}dt\frac{e^{i(\omega_k-\omega_0)t}}{[v^2t^2+b^2]^{\frac{3}{2}}}\{vt\langle k|x|0\rangle+b\langle k|z\ 0\rangle\}.$$

用缩写

$$\beta=\frac{(\omega_k-\omega_0)b}{v};\quad s=\frac{v}{b}t\tag{185.8}$$

上式可以写为

$$a_k(\infty)=-\frac{ie^2}{\hbar vb}\left\{\langle k|x|0\rangle\int_{-\infty}^{+\infty}ds\frac{se^{i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}\right.$$
$$\left.+\langle k|z\ 0\rangle\int_{-\infty}^{+\infty}ds\frac{e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}\right\}.\tag{185.9}$$

上式中的两个积分可利用修正汉克耳函数的积分表达式

$$\int_0^\infty ds\frac{\cos\beta s}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}=\beta K_1(\beta) \tag{185.10}$$

来确定. 上式也可以写为

$$\frac{1}{2}\int_0^\infty\frac{ds\,e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}+\frac{1}{2}\int_0^\infty\frac{ds\,e^{-i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{ds\,e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}},$$

因此

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{ds\,e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}=2\beta K_1(\beta). \tag{185.11}$$

上式对β的导数是

$$i\int_{-\infty}^{+\infty}ds\frac{se^{i\beta s}}{(1+s^2)^{\frac{3}{2}}}=2\frac{d}{d\beta}[\beta K_1(\beta)]=-2\beta K_0(\beta). \tag{185.12}$$

因此得到

$$a_k(\infty)=-\frac{e^2}{\hbar v}\cdot\frac{2}{b}\{\langle k|x|0\rangle(-\beta K_0(\beta))+i\langle k|z|0\rangle\beta K_1(\beta)\}. \tag{185.13}$$

若原子是未取向的,则在统计平均中

$$\overline{\langle k|x|0\rangle}=\overline{\langle k|z|0\rangle}=0;\quad \overline{|\langle k|x|0\rangle|^2}=\overline{|\langle k|z|0\rangle|^2}, \tag{185.14}$$

因此

$$\overline{|a_k(\infty)|^2}=\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\frac{4}{b^2}\overline{|\langle k|x|0\rangle|^2}\beta^2[K_0^2(\beta)+K_1^2(\beta)]. \tag{185.15}$$

根据(185.7)式和(185.8)式推出态$|k\rangle$的激发截面:

$$\sigma_k=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\overline{|\langle k|x|0\rangle|^2}\int_0^\infty d\beta\beta[K_0^2(\beta)+K_1^2(\beta)]. \tag{185.16}$$

上式最后的积分可对一有限的下限求值:

$$\int_\beta^\infty d\beta\beta[K_0^2(\beta)+K_1^2(\beta)]=\beta K_0(\beta)K_1(\beta). \tag{185.17}$$

对于小 β 值，函数的极限值是

$$\beta K_1(\beta)\to 1;\quad K_0(\beta)\to C+\log\frac{2}{\beta},\qquad (185.18)$$

其中 $C=0.5772\cdots$ 为欧勒常数. 因此，这积分在很小的 β 值是发散的，或者按照(185.8)式，当碰撞参数 b 很小时，这积分是发散的. 这个发散是由于相互作用的展开式 (185.2′) 引起的，此式仅当原子电子离开原子核的距离 r 比碰撞参数 b 小很多时才成立. 这个发散可以用在 $b=r_0$ 处截断的方法在某种程度上加以补救，其中 r_0 有些类似原子半径，或者利用(185.8)式，得

$$\beta_{最小}=\frac{r_0(\omega_k-\omega_0)}{v}.\qquad (185.19)$$

因为 v 比原子电子的速度大得多，$\beta_{最小}\ll 1$，所以公式 (185.18) 成立. 于是截面公式为：

$$\sigma_k=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\overline{|\langle k|x|0\rangle|^2}\left\{\log\frac{2v}{r_0(\omega_k-\omega_0)}-C\right\}.\qquad (185.20)$$

因为对数随自变量的变化相当慢，所以并不需要 r_0 的准确值.

文献　这个方法是原子核库仑激发理论中所用方法的节略形式. 参考 Alder, K., Winther, W.: Dan. Mat.-Fys. Medd. **29**, 19(1955).

问题 186　光 电 效 应

在 z 方向上传播的线偏振 ($\mathscr{E}\parallel x$, $\mathscr{H}\parallel y$) 的光波照射到氢原子上，这时氢原子的电子处在基态. 所发射的光电子的角分布怎样？光电发射的微分截面怎样？忽略推迟效应，末态近似地用平面波来描写.

解　光波可以用矢势 $\boldsymbol{A}$ 来描写

$$A_x=\frac{c}{\omega}\mathscr{E}_0\cos\left[\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)+\delta\right];\quad A_y=0;\quad A_z=0,\qquad (186.1)$$

然后可以推导出场强度的分量：

$$\mathscr{E}_x=-\frac{1}{c}\dot{A}_x=\mathscr{E}_0\sin\left[\omega'\left(t-\frac{z}{c}\right)+\delta\right];$$

$$\mathscr{H}_y=\frac{\partial A_x}{\partial z}=\mathscr{E}_0\sin\left[\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)+\delta\right],$$

所有其他分量都为零. 在 z 方向上的平均坡印廷矢量是

$$\overline{S}=\frac{c}{4\pi}\overline{\mathscr{E}_x\mathscr{H}_y}=\frac{c}{8\pi}\mathscr{E}_0^2,$$

因此每平方厘米每秒有

$$n=\frac{c\mathscr{E}_0^2}{8\pi\hbar\omega} \tag{186.2}$$

个入射光子.

根据问题 125, 光和电子之间的相互作用能是

$$W=-\frac{e\hbar}{mc}i(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)=\mathrm{W}e^{-i\omega t}+\mathrm{W}^{\dagger}e^{i\omega t} \tag{186.3}$$

其中

$$\mathrm{W}=-\frac{e\hbar}{2m\omega}\mathscr{E}_0 ie^{-i\delta}\frac{\partial}{\partial x}. \tag{186.4}$$

并已取推迟因子 $\exp\left(i\frac{\omega z}{c}\right)=1$.

于是, 我们可以应用问题 182 中所讨论的方法. 只有相互作用项 W 导致一共振分母 $\omega_f-\omega_i-\omega$, 因此满足能量守恒关系 $\hbar(\omega_f-\omega_i)=\hbar\omega$. 令

$$x=\frac{1}{2}(\omega_f-\omega_i-\omega)t,$$

则得

$$|a_f(t)|^2=\frac{4}{\hbar^2}|\langle f|\mathrm{W}|i\rangle|^2\frac{\sin^2 x}{x^2},$$

因此, 从初态 $|i\rangle$ 到末态 $|f\rangle$ 的跃迁几率 P_f 为

$$P_f=\frac{2\pi}{\hbar}\rho_f|\langle f|\mathrm{W}|i\rangle|^2. \tag{186.5}$$

这里 ρ_f 是末态密度, 以出射电子能量作为参照标准. 按照 (183.8)

式,有

$$\rho_f = \frac{mV}{8\pi^3\hbar^2} k_f d\Omega_f, \tag{186.6}$$

上式中 V 是归一化体积, $\hbar k$ 是光电子的动量. 光电发射到立体角元 $d\Omega_f$ 内的微分截面是 P_f/n, 因此从(186.2)和(186.4-6)等表达式,我们可以得到一般公式

$$d\sigma = \frac{e^2V}{2\pi mc\omega} k_f d\Omega_f \left| \langle f \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| i \rangle \right|^2. \tag{186.7}$$

我们现在讨论的是在中心对称的势场中的波函数,其基态 $|i\rangle$ 与极角无关. 于是

$$\frac{\partial}{\partial x}|i\rangle = \frac{d|i\rangle}{dr} \sin\vartheta\cos\varphi \tag{186.8}$$

正比于一阶球谐函数,因此,若电子不发射到 P 态,矩阵元必须为零.

让末态近似地用平面波来描写

$$|f\rangle = V^{-\frac{1}{2}} e^{ik_f r\cos\gamma} = \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1) i^l j_l(k_f r) P_l(\cos\gamma), \tag{186.9}$$

上式中 γ 是 $\boldsymbol{k}_f$ 和 $\boldsymbol{r}$ 之间的夹角, $\boldsymbol{k}_f$ 具有极角 Θ, Φ; $\boldsymbol{r}$ 具有极角 ϑ 和 φ. 于是只有 $l=1$ 项(P 项)对矩阵元有贡献,因此

$$\left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| i \right\rangle = \frac{3i}{\sqrt{V}} \int_0^\infty dr r^2 \frac{j_1(kr)}{kr} \frac{d|i\rangle}{dr} \oint d\Omega \cos\gamma \sin\vartheta\cos\varphi.$$

因为

$$\cos\gamma = \cos\vartheta\cos\Theta + \sin\vartheta\sin\Theta(\cos\varphi\cos\Phi + \sin\varphi\sin\Phi),$$

则由角度部分的积分得到

$$\sin\Theta\cos\Phi \oint d\Omega \sin^2\vartheta\cos^2\varphi = \frac{4\pi}{3}\sin\Theta\cos\Phi,$$

因此得到

$$\left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| i \right\rangle = \frac{4\pi i}{\sqrt{V}} \sin\Theta\cos\Phi \int_0^\infty dr r^2 \frac{j_1(k_f r)}{k_f r} \frac{d|i\rangle}{dr}$$

按照(186.7)式,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f}=\frac{8\pi e^2}{mc\omega k_f}\left\{\int_0^\infty dr\, r j_1(k_f r)\,\frac{d|i\rangle}{dr}\right\}^2\sin^2\Theta\cos\Phi. \tag{186.10}$$

这里的径向函数 j_1 是来自平面波近似，为了定量计算必须用更正确的表达式来代替. 然而，光电子的角分布是正确的，和经典预料的完全一致，因为 $\sin^2\Theta\cos^2\Phi$ 在电场强度的 x 方向上有最大值.

注　对于一个 K 壳层电子

$$|i\rangle=\pi^{-\frac{1}{2}}a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}};\quad a=\frac{\hbar^2}{(Z-s)me^2}$$

(s 为屏蔽常数，见问题 178). 对于(186.10)式中的积分，我们得到

$$J=\int_0^\infty dr\, r j_1(k_f r)\,\frac{d|i\rangle}{dr}=-\frac{1}{k_f^2a^2\sqrt{\pi a}}\int_0^\infty dx x\left(\frac{\sin x}{x}-\cos x\right)e^{-\frac{x}{k_f a}},$$

式中 $x=k_f r$. 这个积分可以用初等方法算出:

$$J=-\frac{2}{\sqrt{\pi a}}\frac{k_f^3a^3}{(1+k_f^2a^2)^2}.$$

这个公式仅当 $k_f a\gg 1$ 时才成立，否则平面波近似就很不满足要求；因此我们可以写出

$$J\simeq-\frac{2}{\sqrt{\pi a}}(k_f a)^{-2}$$

和

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f}=\frac{32e^2}{mca^6}\cdot\frac{1}{\omega k_f^5}\cdot\sin^2\Theta\cos^2\Phi^*$$

或者用

$$\frac{\hbar^2k_f^2}{2m}=\hbar\omega_f,$$

最后得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\simeq 8(Z-s)^5\sin^2\Theta\cos^2\Phi\,\frac{e^2}{\hbar c}\,\frac{m^3e^{10}}{\hbar^7}\,\frac{1}{\omega\omega_f^2k_f}.$$

这公式表明，更精确计算的一些主要特点是：微分截面随着 $(Z-s)$ 的增加而迅速增加；随着量子能量 $\hbar\omega$ 的增大而迅速下降，(下降趋势大致正比于 $\omega^{-3.5}$)，给出了微分截面的数量级(以 $e^2/\hbar c$ 为单位)和正确的角分布.

文献　Stobbe, M.: Ann. Physik **7**, 661(1930).—氢原子中的推迟效应; Sommerfeld, A., Schur, G., Ann. Physik **4**, 409 (1930). —相对论处理; Sauter, F., Ann. Physik **11** 454(1931).

---

* 本式原文漏掉因子 $\sin^2\Theta\cos^2\Phi$. ——译者注

问题 187　光的色散．振子强度

前题所定义的一个光波(但取 $\delta=0$) 和一原子相互作用．试计算感应极化，并从感生极化推导振子强度．只考虑一个电子，由于忽略推迟效应，所有矩阵元都化为电偶极矩的矩阵元．

解　用问题 181 的狄拉克的表示法，若 $|l\rangle$ 是未微扰原子的一个状态，则在光波作用下的原子波函数可以写为

$$\psi=\sum_l a_l(t)\,|l\rangle e^{-i\omega_l t}.$$

系数 $a_l(t)$ 用(182.2)式表示，并略去光波的所有初始瞬时效应，则得到

$$\psi=|0\rangle e^{-i\omega_0 t}-\frac{1}{\hbar}\sum_l\left\{\langle l|\mathrm{W}|0\rangle\frac{e^{i(\omega_l-\omega_0-\omega)t}}{\omega_l-\omega_0-\omega}+\langle l|\mathrm{W}^\dagger|0\rangle\frac{e^{i(\omega_l-\omega_0+\omega)t}}{\omega_l-\omega_0+\omega}\right\}|l\rangle e^{-i\omega_l t}.$$

上式中 $|0\rangle$ 表示原子基态，$|l\rangle$ 表示任一激发态，因此 $\omega_l-\omega_0>0$，仅求和号内第一项表示共振．于是，略去另一项，我们就可以从下列波函数出发

$$\psi=\left\{|0\rangle-\frac{1}{\hbar}e^{-i\omega t}\sum_l'\frac{\langle l|\mathrm{W}|0\rangle}{\omega_l-\omega_0-\omega}|l\rangle\right\}e^{-i\omega_0 t}. \qquad (187.1)$$

现在我们知道，对于光学性质来说，感生偶极矩 $\boldsymbol{p}_{\text{感}}$ 起着主要作用．后者可按照公式

$$\boldsymbol{p}_{\text{感}}=-e\left\{\int d^3x\psi^*\boldsymbol{r}\psi-\langle 0|\boldsymbol{r}|0\rangle\right\}. \qquad (187.2)$$

由(187.1)式算出．忽略二级修正，得到

$$\boldsymbol{p}_{\text{感}}=\frac{e}{\hbar}\sum_l'\frac{\langle 0|\boldsymbol{r}|l\rangle\langle l|\mathrm{W}|0\rangle e^{-i\omega t}+\langle l|\boldsymbol{r}|0\rangle\langle l|\mathrm{W}|0\rangle^* e^{i\omega t}}{\omega_l-\omega_0-\omega}. \qquad (187.3)$$

若把相互作用

$$\mathrm{W}=-\frac{e\hbar}{2m\omega}\mathscr{E}_0 i\frac{\partial}{\partial x} \qquad (187.4)$$

的矩阵元$\langle l|\mathrm{W}|0\rangle$用原子矩 $\boldsymbol{p}$ 在场的方向上的矩阵元，

$$\langle l|p_x|0\rangle = -e\langle l|x|0\rangle \tag{187.5}$$

来代替，则(187.3)式可以大大化简．利用关系式

$$\left\langle l\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|k\right\rangle = \frac{m}{\hbar}(\omega_k-\omega_l)\langle l|x|k\rangle, \tag{187.6}$$

可以做到这一点．此关系式对任何一对状态 $|l\rangle$ 和 $|k\rangle$ 都成立．

方程(187.6)可以从下列两个薛定谔方程

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right\}|k\rangle=\hbar\omega_k|k\rangle;\quad \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right\}\langle l|=\hbar\omega_l\langle l|$$

导出．用 x 乘上述两式并组成矩阵元，将两方程相减，消去含 V 的项，得到：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\{\langle l|x\nabla^2|k\rangle-\langle k|x\nabla^2|l\rangle^*\}=\hbar(\omega_k-\omega_l)\langle l|x|k\rangle. \tag{187.6'}$$

现在根据

$$\int d^3x(vx)\nabla^2u=-\int d^3x\nabla(vx)\cdot\nabla u=-\int d^3x\left(x\nabla v\cdot\nabla u+v\frac{\partial u}{\partial x}\right),$$

(187.6′) 式左边的花括号可以变为

$$-\left\langle l\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|k\right\rangle+\left\langle k\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|l\right\rangle^*=-2\left\langle l\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|k\right\rangle,$$

它和(187.6)式的左边成正比，而(187.6′) 式右边则已经是所需要的偶极矩矩阵元．

利用(187.6)式，可以把感生偶极矩(187.3)式写成简单的形式

$$\boldsymbol{p}_{\text{感}}=-\frac{\mathscr{E}_0}{2i\hbar}\sum_l\frac{\langle 0|\boldsymbol{p}|l\rangle\langle l|p_x|0\rangle e^{-i\omega t}-\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle\langle l|p_x|0\rangle^* e^{i\omega t}}{\omega_l-\omega_0-\omega}. \tag{187.7}$$

在偶极矩 $\boldsymbol{p}$ 沿所有方向取向的许多原子的统计分布中，$\boldsymbol{p}_{\text{感}}$ 的 y 和 z 分量将抵消，仅留下 x 方向的，即平行于所加电场方向的感生偶极矩．在(187.7)式的第一项中，我们再利用 $\langle 0|\boldsymbol{p}|l\rangle=\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle^*$ 的厄米性，然后利用下列统计平均关系：

$$\overline{|\langle l|p_x|0\rangle|^2}=\frac{1}{3}|\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle|^2,$$

上式右边不需要进一步求平均，它与原子的取向无关. 因此我们得到下列结果：

$$\boldsymbol{p}_{\text{感}}=\frac{\mathscr{E}_0}{3\hbar}\sum_l\frac{|\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle|^2}{\omega_l-\omega_0-\omega}\sin\omega t.$$

因为 $\mathscr{E}_0\sin\omega t=\mathscr{E}$ 是电场强度的瞬时值，我们可以用通常的方法由 $\boldsymbol{p}_{\text{感}}=\alpha\mathscr{E}$ 来定义原子的极化系数 α，因此

$$\alpha=\frac{1}{3}\sum_l\frac{|\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle|^2}{\hbar(\omega_l-\omega_0-\omega)}. \tag{187.8}$$

在经典光学中，折射率 n 是从下列公式推得：

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{4\pi}{3}N\alpha, \tag{187.9}$$

其中 N 是每单位体积的原子数(这个表达式称为折射公式). 于是经典极化系数的计算，是对所有电子的贡献(下标 λ) 求和，可写为下列形式：

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{4\pi}{3}N\frac{e^2}{m}\sum_\lambda\frac{f_\lambda}{\omega_\lambda^2-\omega^2}. \tag{187.10}$$

在这种经典图象中，ω_λ 是第 λ 个电子的本征频率，而所谓振子强度 f_λ 表示处在本征频率 ω_λ 状态时每个原子的电子数目. 实验上测得的振子强度不是整数，这在经典图象中首先引起疑问.

量子理论的公式(187.8)在形式上给出一个很类似的结果. 我们可以写出

$$\alpha=\frac{1}{3}\sum_l\frac{(\omega_l-\omega_0+\omega)|\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle|^2}{\hbar[(\omega_l-\omega_0)^2-\omega^2]}\simeq\frac{2\omega}{3\hbar}\sum_l\frac{|\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle|^2}{(\omega_l-\omega_0)^2-\omega^2};$$

然后由(187.9)式得出折射公式：

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{4\pi}{3}N\frac{e^2}{m}\sum_l\frac{f_l}{(\omega_l-\omega_0)^2-\omega^2}, \tag{187.11}$$

其中 f_l 为振子强度：

$$f_l=\frac{2m\omega}{3\hbar e^2}|\langle l|\boldsymbol{p}|0\rangle|^2. \tag{187.12}$$

然而量子理论的结果(187.11)和经典的结果(187.10)仅仅在形式

上类似. 其实在(187.11)式中不是对所有的电子求和而是对激发态求和. 因此, 即使对于一个电子的问题, 也需要对许多项求和. 本征频率 ω_k 是用频率差 $\omega_l-\omega_0$ 来代替. 最后, 振子强度 f_l 不再表示电子的数目, 而是相当复杂的强度常数, 可根据(187.12)式从偶极跃迁矩阵元计算出来. 因此, 这些数目不是整数, 也就不足为奇了.

问题 188　在磁共振装置中自旋取向的翻转

假定一个自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$ 和磁矩为 μ 的粒子沿 y 方向穿过一个平行于 z 轴的均匀磁场 $\mathscr{H}_0$. 在这个场中粒子自旋的取向不是 $+z$ 就是 $-z$ 方向. 让我们假设它指向正 z 方向. 当在时刻 $t=0$ 经过 $y=0$ 点时, 粒子进入一个平行于 x 轴的附加的均匀磁场 $\mathscr{H}'$. 在时刻 $t=t_0$, $y=l$ 点处粒子离开这个辅助场. 问在这个时间间隔内自旋取向翻转的几率是多大?

解　在薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\mathscr{H}}\psi \tag{188.1}$$

中, 最后一项是磁场 $\boldsymbol{\mathscr{H}}$ 和粒子磁矩 $\boldsymbol{\mu}$ 的相互作用能. 后者定义为矢量算符

$$\boldsymbol{\mu}=\mu\boldsymbol{\sigma}, \tag{188.2}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为自旋矢量, 它的三个分量是泡利矩阵(参考问题 129).

当 $t<0$ 时, 只有场 $\mathscr{H}_0\parallel z$ 作用在粒子上; 于是(188.1)式的解为

$$\psi=e^{i(ky-\omega t)}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \tag{188.3}$$

粒子的能量为

$$\hbar\omega=\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\mathscr{H}_0. \tag{188.4}$$

若在 $t=0$ 时, 把场 $\mathscr{H}'\parallel x$ 作用上去, 则粒子的状态发生变化,

因此它的波函数可以写为

$$\psi = e^{i(ky-\omega t)}\left\{a(t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+b(t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}=e^{i(ky-\omega_0 t)}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix} \tag{188.5}$$

其中缩写

$$\hbar\omega_0=\frac{\hbar^2k^2}{2m}. \tag{188.6}$$

如果垂直于 y 方向的洛伦兹力的作用所引起的路线弯曲可以忽略，则可假定 y 方向上的动量 $\hbar k$ 始终不变.

把(188.5)式代入(188.1)式中，关于磁相互作用项有

$$(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\mathscr{H}})=\mu(\mathscr{H}_0\sigma_z+\mathscr{H}'\sigma_x)=\mu\begin{pmatrix}\mathscr{H}_0 & \mathscr{H}'\\ \mathscr{H}' & -\mathscr{H}_0\end{pmatrix},$$

因此

$$(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\mathscr{H}})\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\mu\begin{pmatrix}\mathscr{H}_0a+\mathscr{H}'b\\ \mathscr{H}'a-\mathscr{H}_0b\end{pmatrix}.$$

将薛定谔方程的两部分分开，得

$$\left.\begin{aligned}-\frac{\hbar}{i}\dot{a}&=-\mu(\mathscr{H}_0a+\mathscr{H}'b);\\ -\frac{\hbar}{i}\dot{b}&=-\mu(\mathscr{H}'a-\mathscr{H}_0b).\end{aligned}\right\} \tag{188.7}$$

为了解这些方程，我们设

$$a(t)=Ae^{i\omega' t};\quad b(t)=Be^{i\omega' t};$$

于是(188.7)式变成下列线性方程代数组：

$$(\mu\mathscr{H}_0-\hbar\omega')A+\mu\mathscr{H}'B=0;$$
$$\mu\mathscr{H}'A-(\mu\mathscr{H}_0+\hbar\omega')B=0.$$

对于两个不同的 ω' 值：

$$\omega'=\pm\frac{\mu}{\hbar}\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}, \tag{188.8}$$

行列式为零；下面将这两个根写成 ω' 和 $-\omega'$，于是方程组(188.7)的解为

$$a(t)=A_{\mathrm{I}}e^{i\omega' t}+A_{\mathrm{II}}e^{-i\omega' t};$$
$$b(t)=B_{\mathrm{I}}e^{i\omega' t}+B_{\mathrm{II}}e^{-i\omega' t},$$

其中

$$B_{\mathrm{I,II}}=\frac{\pm\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}-\mathscr{H}_0}{\mathscr{H}'}A_{\mathrm{I,II}}.$$

剩下的两个积分常数 A_{I} 和 A_{II}，可由初始条件确定：

$$a(0)=1;\quad b(0)=0. \tag{188.9}$$

由此得出：

$$A_{\mathrm{I}}=\frac{\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}+\mathscr{H}_0}{2\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}};\qquad A_{\mathrm{II}}=\frac{\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}-\mathscr{H}_0}{2\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}},$$

经过一些简单的运算以后，可以得到公式

$$a(t)=\cos\omega' t+i\frac{\mathscr{H}_0}{\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}}\sin\omega' t;$$
$$b(t)=i\frac{\mathscr{H}'}{\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}}\sin\omega' t. \tag{188.10}$$

容易验证

$$|a(t)|^2+|b(t)|^2=1.$$

在时刻 $t=t_0=l/v$，粒子离开辅助场 $\mathscr{H}'$ 以后自旋取向翻转的几率，也就是粒子的自旋朝下(在负 z 方向上)的几率，根据(188.10)式和(188.8)式，将是

$$|b(t_0)|^2=\frac{\mathscr{H}'^2}{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}\sin^2\left\{\frac{\mu}{\hbar}\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}\,t_0\right\}. \tag{188.11}$$

方程(188.11)式表明，这实验装置可以用来确定自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$ 的原子(如在基态的碱金属原子)的磁矩. 假如自旋取向不翻转的原子被聚焦，而取向翻转的原子被散焦，并且在实验过程中改变磁场，则在

$$\frac{\mu}{\hbar}\sqrt{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}\,\frac{l}{v}=\frac{\pi}{2} \tag{188.12}$$

时，射线强度变得最小：

$$|a(t_0)|^2_{\text{最小}}=\frac{\mathscr{H}_0^2}{\mathscr{H}_0^2+\mathscr{H}'^2}.$$

当然，只有进行速度选择并且 v 为已知时，这种测定才是可能的. 我们描述的方法已经简化了，因为忽略了一些细节，例如洛伦兹力引起的偏转、聚焦磁场的不均匀性、杂散场和塞曼效应所引起的磁矩的非静态变化(这是最重要的). 我们的问题倒是和退耦矩的帕邢-巴克效应相当，然而，这和场弱到可以忽略垂直动量转移的想法是有矛盾的.

注　当然一个"在点 $y=0$，时刻 $t=0$，等等"的粒子，必须用波包来描写，参考问题17. 然而，对于目前的问题，这没有多大用处，因此略去.

Ⅵ. 相对论性狄拉克方程

说明 本章中我们利用第四个坐标 $x_4=ict$ 和欧几里得度规. 希腊字母下标(例如 x_μ)取 $\mu=1, 2, 3, 4$, 拉丁字母下标(x_k)只取 $k=1, 2, 3$.

问题 189 狄拉克方程的叠代

试由狄拉克平面波的相对论性色散定律导出 γ 矩阵的对易关系. 然后给出 γ 矩阵的一个不可约表示, 使得 γ_4 在这表示中是对角的.

解 如果自由粒子的狄拉克方程

$$\sum_\mu \gamma_\mu \partial_\mu \psi + \varkappa\psi = 0 \tag{189.1}$$

的平面波解是

$$\psi = Ce^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}, \tag{189.2}$$

则 γ_μ 必定满足代数关系式

$$i\sum_\mu k_\mu\gamma_\mu + \varkappa = 0; \quad k_4 = \frac{i\omega}{c}. \tag{189.3}$$

现在 γ_μ 应与 k_μ 的特殊选择无关. 为了从(189.3)式中消去 k_μ, 唯一可利用的是相对论性色散定律

$$\sum_\mu k_\mu^2 \equiv k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = -\varkappa^2, \tag{189.4}$$

上式能够从(189.3)式的叠代得到:

$$\varkappa^2 = (i\sum_\mu k_\mu\gamma_\mu)^2 = -\sum_\mu\sum_\nu k_\mu k_\nu \gamma_\mu\gamma_\nu. \tag{189.5}$$

(189.5)式与(189.4)式恒等的充要条件是, 上式中的双重求和化为具有适当归一化的对角项求和. 事实上, 只要 γ_μ 满足下述关系即可

$$\gamma_\mu\gamma_\nu+\gamma_\nu\gamma_\mu=2\delta_{\mu\nu}. \tag{189.6}$$

如果将类似的步骤直接应用于狄拉克方程(189.1),而不用平面波,则有

$$\varkappa^2\psi=\left(\sum_\mu\gamma_\mu\partial_\mu\right)^2\psi=\sum_\mu\sum_\nu\gamma_\mu\gamma_\nu\partial_\mu\partial_\nu\psi.$$

考虑到反对易关系(189.6),上式化为克莱因-戈登方程

$$\Box^2\psi-\varkappa^2\psi=0. \tag{189.7}$$

用 4×4 矩阵表示的 γ_μ 有许多不可约表示. 如果 γ_μ 是其中的一个表示,则任何幺正变换 $U^\dagger\gamma_\mu U$ 将给出另一个表示. 因此总可以假设 γ 矩阵中的某一个,譬如说 γ_4,是对角的. 由于 $\gamma_4^2=1$,它的本征值必定是 $+1$ 和 -1. 因此我们可以将 γ_μ 写成

$$\gamma_k=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_k & \boldsymbol{B}_k\\ \boldsymbol{C}_k & \boldsymbol{D}_k\end{pmatrix}(k=1,\ 2,\ 3);\quad \gamma_4=\begin{pmatrix}\boldsymbol{1} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & -\boldsymbol{1}\end{pmatrix} \tag{189.8}$$

其中所有黑体字母都是 2×2 矩阵. 将这些表示式代入(189.6),则得

$$\gamma_i\gamma_k+\gamma_k\gamma_i=\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{C}_k+\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{C}_i & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{C}_i\boldsymbol{B}_k+\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{B}_i\end{pmatrix}=2\delta_{ik}; \tag{189.9a}$$

$$\gamma_k\gamma_4+\gamma_4\gamma_k=\begin{pmatrix}2\boldsymbol{A}_k & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & -2\boldsymbol{D}_k\end{pmatrix}=0. \tag{189.9b}$$

对前三个 γ 矩阵,由(189.9b)式得到 $\boldsymbol{A}_k=0$, $\boldsymbol{D}_k=0$. 而由(189.9a)式得到

$$\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{C}_k=1;\quad \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{C}_k+\boldsymbol{C}_k\boldsymbol{B}_i=0. \tag{189.10}$$

(189.10)式的第二个等式是 2×2 矩阵满足的三个反对易关系,因此可约化为泡利矩阵 σ_k(参见 129 题). 如果 a、b 是两个数,则

$$\boldsymbol{B}_k=a\sigma_k;\quad \boldsymbol{C}_k=b\sigma_k;\quad ab=1 \tag{189.11}$$

就可以满足(189.10)式,因此具有下列形式的任意表示均满足对易关系(189.6):

$$\gamma_k=\begin{pmatrix}\mathbf{0}; & b^{-1}\sigma_k\\ b\sigma_k; & \mathbf{0}\end{pmatrix};\ \gamma_4=\begin{pmatrix}\mathbf{1} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & -\mathbf{1}\end{pmatrix}. \tag{189.12}$$

选择 $b=i$, 则给出所谓标准表示(在下面的问题中经常用到); 它们是

$$\gamma_1=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&-i&0\\0&i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix};\quad \gamma_2=\begin{pmatrix}0&0&0&-1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix};$$

$$\gamma_3=\begin{pmatrix}0&0&-i&0\\0&0&0&i\\i&0&0&0\\0&-i&0&0\end{pmatrix};\quad \gamma_4=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}. \tag{189.13}$$

注 当 $b=a=1$ 时,代替三个 γ_k 而得到另外三个矩阵

$$\alpha_k=\begin{pmatrix}\mathbf{0} & \sigma_k\\ \sigma_k & \mathbf{0}\end{pmatrix}. \tag{189.14}$$

它们与上面的 $\gamma_4\equiv\beta$ 一起满足同样的对易关系. α_k、β 与 γ_μ 的关系是

$$\gamma_k=-i\beta\alpha_k,\quad \gamma_4=\beta, \tag{189.15}$$

在狄拉克哈密顿量中,用矩阵 α_k 和 β 比较方便(参见问题 200).

问题 190 正能量的平面狄拉克波

试确定在标准表示下具有正螺旋性和负螺旋性的平面狄拉克波的旋量振幅,但只限于讨论正能量的情况.

解 由于

$$\psi=Ce^{i(kr-\omega t)}, \tag{190.1}$$

我们得到(参见(189.3)式),在标准表示中四个分量满足的联立方程

$$(k_x-ik_y)C_4+k_zC_3+\left(\frac{-\omega}{c}+\varkappa\right)C_1=0,$$

$$(k_x+ik_y)C_3-k_zC_4+\left(-\frac{\omega}{c}+\varkappa\right)C_2=0,$$

$$-(k_x-ik_y)C_2-k_zC_1+\left(\frac{\omega}{c}+\varkappa\right)C_3=0, \qquad (190.2)$$

$$-(k_x+ik_y)C_1+k_zC_2+\left(\frac{\omega}{c}+\varkappa\right)C_4=0.$$

利用缩写

$$k\eta=\frac{\omega}{c}-\varkappa; \quad \frac{k}{\eta}=\frac{\omega}{c}+\varkappa, \qquad (190.3)$$

其中 η 是一个合适的参量，可以用它表示粒子的最重要的一些物理量，即粒子的动量

$$p=\hbar k=mc\frac{2\eta}{1-\eta^2}, \qquad (190.4a)$$

动能

$$E=\hbar\omega=mc^2\frac{1+\eta^2}{1-\eta^2} \qquad (190.4b)$$

以及粒子的速度

$$v=c\frac{2\eta}{1+\eta^2}. \qquad (190.4c)$$

通常还引入确定矢量 $\boldsymbol{k}$ 的方向的两个极角，ϑ 和 φ

$$k_x\pm ik_y=k\sin\vartheta e^{\pm i\varphi}; \quad k_z=k\cos\vartheta. \qquad (190.5)$$

于是方程(190.2)可以写成

$$\begin{aligned}
&\sin\vartheta e^{-i\varphi}C_4+\cos\vartheta C_3-\eta C_4=0,\\
&\sin\vartheta e^{+i\varphi}C_3-\cos\vartheta C_4-\eta C_2=0,\\
&-\sin\vartheta e^{-i\varphi}C_2-\cos\vartheta C_1+\frac{1}{\eta}C_3=0,\\
&-\sin\vartheta e^{+i\varphi}C_1+\cos\vartheta C_2+\frac{1}{\eta}C_4=0.
\end{aligned} \qquad (190.6)$$

这是四个 C_μ 满足的线性齐次方程组．不难验证，它的行列式为零．而且这行列式还可分解为两个行列式的乘积，每个行列式也等于零．因此，不可能将所有四个 C_μ 表示成其中某一个的倍数，

因而有两个 C_μ 可以任意选择. 下面我们将用另外的方法解这组方程.

首先我们来求螺旋性算符(即"在 $\boldsymbol{k}$ 方向上的自旋分量"算符)

$$\mathbf{h}=\frac{1}{k}\sum_j \sigma_j k_j \tag{190.7}$$

的本征函数. 由于在标准表示中自旋矩阵仅由两个 2×2 的泡利矩阵 s_j 组成:

$$\sigma_j=\begin{pmatrix} s_j & 0 \\ 0 & s_j \end{pmatrix},$$

因此定义(190.7)化为

$$\mathbf{h}=\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix}. \tag{190.8}$$

设本征值为 h, 则本征值方程 $\mathbf{h}C=hC$ 可以分解为两组联立方程, 一组是关于 C_1 和 C_2 的:

$$\begin{aligned} C_1\cos\vartheta+C_2\sin\vartheta e^{-i\varphi}&=hC_1; \\ C_1\sin\vartheta e^{i\varphi}-C_2\cos\vartheta&=hC_2, \end{aligned} \tag{190.9}$$

另一组是关于 C_3 和 C_4 的, 形式与上式完全相同. 当 $h=\pm 1$ 时, (190.9)的行列式为零; 因此得到两个解:

$h=+1$(自旋平行于 $\boldsymbol{k}$):

$$C_2=\tan\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi}C_1;\qquad C_4=\tan\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi}C_3 \tag{190.10}$$

和 $h=-1$ (自旋反平行于 $\boldsymbol{k}$):

$$C_2=-\cot\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi}C_1;\qquad C_4=-\cot\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi}C_3, \tag{190.11}$$

C_1 和 C_3 仍可任意选择.

现在将这些结果代入(190.6)式, 利用基本恒等式

$$\sin\vartheta\tan\frac{\vartheta}{2}+\cos\vartheta=1;\quad \sin\vartheta\cot\frac{\vartheta}{2}-\cos\vartheta=1;$$

$$\sin\vartheta-\cos\vartheta\tan\frac{\vartheta}{2}=\tan\frac{\vartheta}{2};\quad \sin\vartheta+\cos\vartheta\cot\frac{\vartheta}{2}=\cot\frac{\vartheta}{2}$$

则(190.6)的四个方程分别化为

$$C_3=\eta C_1 \quad 对于 \quad h=+1 \tag{190.12}$$

和

$$C_3=-\eta C_1 \quad 对于 \quad h=-1 \tag{190.13}$$

因此，如果选择归一化，使得

$$\int_V d^3x\psi^\dagger\psi=\int_V d^3x C^\dagger C=1^{①}, \tag{190.14}$$

则得如下的旋量振幅：

对于 $h=+1$

$$C_+=\frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}}\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \sin\dfrac{\vartheta}{2}e^{+\frac{i}{2}\varphi}\\ \eta\cos\dfrac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \eta\sin\dfrac{\vartheta}{2}e^{+\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix} \tag{190.15}$$

和

对于 $h=-1$

$$C_-=\frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}}\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\vartheta}{2}e^{+\frac{i}{2}\varphi}\\ -\eta\sin\dfrac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \eta\cos\dfrac{\vartheta}{2}e^{+\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix}. \tag{190.16}$$

---

① 必须指出，这归一化条件是洛伦兹不变的，积分与体积 V 中的总电荷成正比。另一个常用的洛伦兹不变的归一化条件是 $\psi\psi=1$。

注　对于非相对论性的情况，按照(190.4c)式，有 $\eta \ll 1$. 这时旋量的 ψ_3 和 ψ_4 分量可以略去，于是我们回到二分量的泡利自旋理论.

问题 191　旋量的变换性质

在无限小洛伦兹变换下，旋量 ψ 如何变换?

解　无限小洛伦兹变换的定义是

$$x'_\mu = x_\mu + \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} x_\rho; \quad \varepsilon_{\mu\rho} = -\varepsilon_{\rho\mu}; \quad |\varepsilon_{\rho\mu}| \ll 1. \tag{191.1}$$

其中所有的 ε_{k4} 都是实数，而三个 ε_{k4} 都是纯虚数. 在上述变换下，狄拉克方程

$$\sum_\mu \gamma_\mu D_\mu \psi + \varkappa \psi = 0 \tag{191.2}$$

将变换成

$$\sum_\mu \gamma_\mu D'_\mu \psi' + \varkappa \psi' = 0 \tag{191.2'}$$

γ_μ 和 $\varkappa$ 与变换无关，因此保持不变. 算符 D_μ 是四元矢量，它的变换规律与坐标变换的(191.1)式相同:

$$D'_\mu = D_\mu + \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} D_\rho; \tag{191.3}$$

ψ 的变换公式可以写成

$$\psi' = (1+\xi)\psi, \tag{191.4}$$

其中 ξ 是与 $\varepsilon_{\mu\rho}$ 的一次方有关的一个无限小算符，称为克利福特(Clifford) 数.

将(191.3)和(191.4)代入(191.2')，则得

$$\sum_\mu \gamma_\mu \left(D_\mu + \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} D_\rho\right)(1+\xi)\psi + \varkappa(1+\xi)\psi = 0.$$

如果上式左乘以 $(1-\xi)$，则最后一项(在略去 ξ^2 项后)变为 $\varkappa\psi$，按(191.2)式，就等于 $-\sum_\mu \gamma_\mu D_\mu \psi$，因此必须选取算符 ξ，使上式化为

$$\sum_\mu (1-\xi)\gamma_\mu \left(D_\mu + \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} D_\rho\right)(1+\xi)\psi = \sum_\mu \gamma_\mu D_\mu \psi. \tag{191.5}$$

由这个方程就可以确定算符 ξ. 略去所有二级无穷小项后，上式化为

$$\sum_{\mu}(\gamma_\mu\xi-\xi\gamma_\mu)D_\mu\psi+\sum_{\mu}\sum_{\rho}\varepsilon_{\mu\rho}\gamma_\mu D_\rho\psi=0$$

或者，交换双重求和中的哑下标 μ 和 ρ（并将 ρ 改写成 ν），则

$$\sum_{\mu}\{(\gamma_\mu\xi-\xi\gamma_\mu)-\sum_{\nu}\varepsilon_{\mu\nu}\gamma_\nu\}D_\mu\psi=0.$$

由于假定上式对任意 ψ 都成立，所以每一项都必定分别等于零：

$$\gamma_\mu\xi-\xi\gamma_\mu=\sum_{\nu}\varepsilon_{\mu\nu}\gamma_\nu. \tag{191.6}$$

不难证明，唯一能满足这四个对易关系的克利福特数（只含 $\varepsilon_{\mu\nu}$ 的一次项）是

$$\xi=\frac{1}{4}\sum_{\rho}\sum_{\sigma}\varepsilon_{\rho\sigma}\gamma_\rho\gamma_\sigma. \tag{191.7}$$

证明如下：将(191.7)代入(191.6)式左边，则得

$$\gamma_\mu\xi-\xi\gamma_\mu=\frac{1}{4}\sum_{\rho}\sum_{\sigma}\varepsilon_{\rho\sigma}(\gamma_\mu\gamma_\rho\gamma_\sigma-\gamma_\rho\gamma_\sigma\gamma_\mu);$$

利用反对易关系(189.6)，则得

$$\gamma_\rho\gamma_\sigma\gamma_\mu=\gamma_\rho(-\gamma_\mu\gamma_\sigma+2\delta_{\mu\sigma})=(\gamma_\mu\gamma_\rho-2\delta_{\mu\rho})\gamma_\sigma+2\gamma_\rho\delta_{\mu\sigma},$$

于是 $$\gamma_\mu\gamma_\rho\gamma_\sigma-\gamma_\rho\gamma_\sigma\gamma_\mu=2(\gamma_\sigma\delta_{\mu\rho}-\gamma_\rho\delta_{\mu\sigma});$$

因此

$$\gamma_\mu\xi-\xi\gamma_\mu=\frac{1}{2}\sum_{\rho}\sum_{\sigma}\varepsilon_{\rho\sigma}(\gamma_\sigma\delta_{\mu\rho}-\gamma_\rho\delta_{\mu\sigma})$$

$$=\frac{1}{2}(\sum_{\sigma}\varepsilon_{\mu\sigma}\gamma_\sigma-\sum_{\rho}\varepsilon_{\rho\mu}\gamma_\rho)=\sum_{\nu}\varepsilon_{\mu\nu}\gamma_\nu;$$

即得所证.

因此旋量 ψ 的变换公式是

$$\psi'=\psi+\frac{1}{4}\sum_{\rho}\sum_{\sigma}\varepsilon_{\rho\sigma}\gamma_\rho\gamma_\sigma\psi. \tag{191.8}$$

问题 192　洛伦兹协变量

当 l' 是克利福特代数的 16 个基元之一时，可构成哪些具有

如下形式的洛伦兹协变量?

$$G=\bar{\psi}\Gamma\psi;\quad \bar{\psi}=\psi^{\dagger}\gamma_4 \tag{192.1}$$

解 克利福特代数的 16 个基元可以归并为五组:

(1) 1,

(2) $\gamma_1,\ \gamma_2,\ \gamma_3,\ \gamma_4$,

(3) $\gamma_1\gamma_2,\ \gamma_1\gamma_3,\ \gamma_1\gamma_4,\ \gamma_2\gamma_3,\ \gamma_2\gamma_4,\ \gamma_3\gamma_4$,

(4) $\gamma_2\gamma_3\gamma_4,\ \gamma_3\gamma_4\gamma_1,\ \gamma_4\gamma_1\gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2\gamma_3$,

(5) $\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$, (192.2)

表达式(192.1)也将分别归并为五组，每一组由(192.2)中相对应的组构成.

在详细讨论之前，我们先研究一下(192.1)的 16 个量中的任一个在无穷小洛伦兹变换

$$x'_{\mu}=x_{\mu}+\sum_{\rho}\varepsilon_{\mu\rho}x_{\rho} \tag{192.3}$$

下的变换性质. 在上题中已证明,在上述变换下,ψ 变为

$$\psi'=(1+\xi)\psi \tag{192.4a}$$

其中

$$\xi=\frac{1}{4}\sum_{\rho}\sum_{\sigma}\varepsilon_{\rho\sigma}\gamma_{\rho}\gamma_{\sigma};\ \ \gamma_{\mu}\xi-\xi\gamma_{\mu}=\sum_{\nu}\varepsilon_{\mu\nu}\gamma_{\nu}. \tag{192.4b}$$

G 的变换是

$$G'=\psi'^{\dagger}\gamma_4\Gamma\psi'=\psi^{\dagger}(1+\xi^{\dagger})\gamma_4\Gamma(1+\xi)\psi.$$

形式上可以写成

$$G'=\bar{\psi}\Gamma'\psi;\ \Gamma'=\gamma_4(1+\xi^{\dagger})\gamma_4\Gamma(1+\xi). \tag{192.5}$$

为了进一步简化上式,需要了解厄密共轭 $\xi^{\dagger}$ 的性质.按照(192.4b)的第二式,它应当满足如下的对易关系(由于 $\gamma_{\nu}^{\dagger}=\gamma_{\nu}$)

$$\xi^{\dagger}\gamma_4-\gamma_4\xi^{\dagger}=\sum_{k}\varepsilon_{4k}^{*}\gamma_k.$$

对于洛伦兹变换(192.3)，转动角 ε_{4k} 是纯虚数，因此 $\varepsilon_{4k}^{*}=-\varepsilon_{4k}$，于是得到

$$\gamma_4\xi^\dagger-\xi^\dagger\gamma_4=\sum_k\varepsilon_{4k}\gamma_k$$

上式左乘以 γ_4，移项后，则得

$$\gamma_4\xi^\dagger\gamma_4=\gamma_4\{\gamma_4\xi^\dagger-\sum_k\varepsilon_{4k}\gamma_k\}=\xi^\dagger-\sum_k\varepsilon_{4k}\gamma_4\gamma_k. \tag{192.6}$$

另一方面，将(192.4b)的 ξ 分成二部分

$$\xi=\frac{1}{4}\sum_k\sum_l\varepsilon_{kl}\gamma_k\gamma_l+\frac{1}{2}\sum_k\varepsilon_{k4}\gamma_k\gamma_4 \tag{192.7a}$$

取厄密共轭后，由于 $\varepsilon_{kl}^*=\varepsilon_{kl}$（三维空间的实转动），则有

$$\xi^\dagger=-\frac{1}{4}\sum_k\sum_l\varepsilon_{kl}\gamma_k\gamma_l+\frac{1}{2}\sum_k\varepsilon_{k4}\gamma_k\gamma_4, \tag{192.7b}$$

于是

$$\xi+\xi^\dagger=\sum_k\varepsilon_{k4}\gamma_k\gamma_4. \tag{192.8}$$

将它代入(192.6)，则得

$$\gamma_4\xi^\dagger\gamma_4=-\xi. \tag{192.9}$$

将这个结果代入(192.5)式，则"变换后的算符" Γ' 最后可以写成（略去 ξ^2 项）

$$\Gamma'=\Gamma+(\Gamma\xi-\xi\Gamma). \tag{192.10}$$

现在可以用这个简单的公式依次讨论 (192.2) 中五组量的变换性质.

1. $\Gamma=1$，由(192.10)式立即得出 $\Gamma'=1$，于是

$$G=\bar\psi\psi\to G'=\bar\psi\psi;\quad G'=G. \tag{192.11}$$

因此量 G 的变换行为和标量一样.

2. $\Gamma=\gamma_\mu$，由(192.10)和(192.4b)得出

$$\Gamma'=\gamma_\mu+\sum_\nu\varepsilon_{\mu\nu}\gamma_\nu,$$

于是 G_μ 的变换公式是

$$G_\mu=\bar\psi\gamma_\mu\psi\to G'_\mu=G_\mu+\sum_\nu\varepsilon_{\mu\nu}G_\nu, \tag{192.12}$$

即 G_μ 象矢量的分量一样变换.

3. $\Gamma=\gamma_\mu\gamma_\nu$, 最好先将乘积 $\gamma_\mu\gamma_\nu$ 分解为一个对称组合和一个反对称组合之和:

$$\gamma_\mu\gamma_\nu=\frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu+\gamma_\nu\gamma_\mu)+\frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\nu\gamma_\mu).$$

第一项就是 $\delta_{\mu\nu}$, 即 (192.11) 的标量乘上一个单位张量. 新的特征明显地只来自反对称部分; 所以在这一组中, 我们只限于讨论反对称组合

$$\sigma_{\mu\nu}=\frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\nu\gamma_\mu). \tag{192.13}$$

按照(192.4b), 我们有

$$\xi\gamma_\mu\gamma_\nu-(\gamma_\mu\xi-\sum_\rho{}'\varepsilon_{\mu\rho}\gamma_\rho)\gamma_\nu=\gamma_\mu(\gamma_\nu\xi-\sum_\rho{}'\varepsilon_{\nu\rho}\gamma_\rho)$$
$$-\sum_\rho{}'\varepsilon_{\mu\rho}\gamma_\rho\gamma_\nu$$

或

$$\gamma_\mu\gamma_\nu\xi-\xi\gamma_\mu\gamma_\nu=\sum_\rho{}'(\varepsilon_{\nu\rho}\gamma_\mu\gamma_\rho+\varepsilon_{\mu\rho}\gamma_\rho\gamma_\nu),$$

因此变换公式是

$$G_{\mu\nu}=\bar\psi\sigma_{\mu\nu}\psi\to G'_{\mu\nu}=G_{\mu\nu}+\sum_\rho{}'(\varepsilon_{\mu\rho}G_{\rho\nu}+\varepsilon_{\nu\rho}G_{\mu\rho}). \tag{192.14}$$

这正是在无限小转动下二秩张量的变换行为.

4. 当 Γ 是三个不同 γ 的乘积时, 利用克利福特数

$$\gamma_5=\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \tag{192.15}$$

可以将这组 Γ 写成较简单的形式:

$$\gamma_2\gamma_3\gamma_4=\gamma_1\gamma_5;\quad -\gamma_3\gamma_4\gamma_1=\gamma_2\gamma_5;\quad \gamma_4\gamma_1\gamma_2=\gamma_3\gamma_5;$$
$$-\gamma_1\gamma_2\gamma_3=\gamma_4\gamma_5.$$

由于 γ_5 与所有 4 个 γ_μ 都是反对易的

$$\gamma_\mu\gamma_5+\gamma_5\gamma_\mu=0, \tag{192.16}$$

因此 γ_5 与 ξ 对易, 将(192.10)应用于 $\Gamma=\gamma_\mu\gamma_5$, 则得

$$\Gamma'=\gamma_\mu\gamma_5+(\gamma_\mu\gamma_5\xi-\xi\gamma_\mu\gamma_5)=[\gamma_\mu+(\gamma_\mu\xi-\xi\gamma_\mu)]\gamma_5.$$

因此我们实质上又回到情况 2, 得到的是一个矢量的分量的变

换规律

$$G_\mu=\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_5\psi\to G'_\mu=G_\mu+\sum_\nu\varepsilon_{\mu\nu}G_\nu. \tag{192.17}$$

严格地说，这并不是一个(极)矢量，而是一个赝矢量，这将在下一问题中加以说明.

5. $\Gamma=\gamma_5$，按照(192.15)和(192.16)，我们得到

$$G=\bar{\psi}\gamma_5\psi\to G'=G, \tag{192.18}$$

即最后这个组合满足标量的变换规律，在下一题中我们将看到这个量更正确地应称为赝标量.

问题193 宇称变换

上题中的五类洛伦兹协变量在空间坐标反射(即宇称变换)下如何变换?

解 我们先来研究旋量ψ在下面所定义的反射变换下的行为. 这种变换是假设狄拉克方程

$$\sum_\mu\gamma_\mu D_\mu\psi+\varkappa\psi=0 \tag{193.1}$$

在宇称变换

$$x'_k=-x_k;\quad x'_4=x_4 \tag{193.2}$$

下将变成

$$\sum_\mu\gamma_\mu D'_\mu\psi'+\varkappa\psi'=0. \tag{193.1'}$$

在有电磁场的情况下，$D_\mu=\partial_\mu-\frac{ie}{\hbar c}A_\mu$ [参见第I卷125题(125.1)式]在宇称变换下，算符∂_μ的变换与(193.2)式一样(即$\partial'_k=-\partial_k;\partial'_4=\partial_4$)，矢势的分量$A_\mu$与电场的分量$\mathscr{E}_k$有如下关系:

$$\mathscr{E}_k=-\frac{1}{c}\dot{A}_k-\partial_k\Phi=-i(\partial_4A_k-\partial_kA_4).$$

由于电场是一个三维极矢量，因此在宇称变换下$\mathscr{E}_k$改变符号，这就给出

$$A'_k=-A_k;\quad A'_4=A_4. \tag{193.3}$$

即 A_μ 的变换和 ∂_μ 一样，因而 D_μ 也以同样方式变换. 因此 (193.1′) 式可以改写为

$$-\sum_k \gamma_k D_k \psi' + \gamma_4 D_4 \psi' + \varkappa \psi' = 0.$$

由此立即可以看出，当

$$\psi' = \gamma_4 \psi \tag{193.4}$$

时，上式就回到(193.1)式. 因此(193.4)式确定了旋量 ψ 的宇称变换性质.

于是，任何一个量

$$G = \bar{\psi} \Gamma \psi = \psi^\dagger \gamma_4 \Gamma \psi$$

将变换为

$$G' = \psi'^\dagger \gamma_4 \Gamma \psi' = \psi^\dagger \Gamma \gamma_4 \psi = \bar{\psi} \gamma_4 \Gamma \gamma_4 \psi,$$

因此得到

$$G = \bar{\psi} \Gamma \psi \to G' = \bar{\psi} \Gamma' \psi; \quad \Gamma' = \gamma_4 \Gamma \gamma_4. \tag{193.5}$$

现在将上述结果应用于上题中的五类协变量

(1) $$G = \bar{\psi}\psi; \quad \Gamma = 1; \quad \Gamma' = 1; \quad G' = G; \tag{193.6}$$

(5) $$G = \bar{\psi}\gamma_5\psi; \quad \Gamma = \gamma_5; \quad \Gamma' = \gamma_4\gamma_5\gamma_4 = -\gamma_5;$$

$$G' = -G. \tag{193.7}$$

这两类量在转动下的变换性质相同，但是现在在空间反射下却相反. (1)称为(真正的)标量而(5)称为赝标量.

(2) $$G_\mu = \bar{\psi}\gamma_\mu\psi; \quad \Gamma = \gamma_\mu; \quad \Gamma'_k = \gamma_4\gamma_k\gamma_4 = -\gamma_k; \quad G'_k = -G_k;$$

$$\Gamma'_4 = \gamma_4 \quad G'_4 = +G_4. \tag{193.8}$$

(4) $$G_\mu = i\psi\gamma_\mu\gamma_5\psi; \quad \Gamma = \gamma_\mu\gamma_5;$$

$$\Gamma'_k = \gamma_4\gamma_k\gamma_5\gamma_4 = +\gamma_k\gamma_5; \quad G'_k = +G_k;$$

$$\Gamma'_4 = \gamma_5\gamma_4 = -\gamma_4\gamma_5; \quad G'_4 = -G_4. \tag{193.9}$$

这两类量在转动下的行为都是四维矢量，但在空间反射下却相反. (2)称为极矢量或(真正的)矢量，而(4)称为轴矢量或赝矢量.

(3) $$G_{\mu\nu} = i\psi\sigma_{\mu\nu}\psi; \quad \Gamma = \frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu);$$

$$\Gamma'_{kl}=\Gamma_{kl};\quad G'_{kl}=G_{kl} \tag{193.10}$$
$$\Gamma'_{k4}=-\Gamma_{k4};\quad G'_{k4}=-G_{k4}.$$

由于只有一个张量，因此没有进一步分类的必要.

问题 194　电荷共轭

试由电荷为 e 的粒子的狄拉克方程解出的旋量 ψ 构成描述电荷为 $-e$ 的粒子的电荷共轭旋量 ψ_c.

解　利用缩写 $a_\mu=(e/\hbar c)A_\mu$，其中 A_μ 是本题中的四维电磁势，电荷为 e 的粒子的狄拉克方程是

$$\sum_\mu\gamma_\mu(\partial_\mu-ia_\mu)\psi+\varkappa\psi=0. \tag{194.1}$$

具有相反电荷的粒子的方程必定是

$$\sum_\mu\gamma_\mu(\partial_\mu+ia_\mu)\psi_c+\varkappa\psi_c=0. \tag{194.2}$$

由后一个方程解出的电荷共轭旋量 ψ_c 将与(194.1)的解 ψ 有关.

出现在(194.2)式中的算符 $\partial_\mu+ia_\mu$ 可以由 (194.1) 式的共轭方程得到

$$\sum_\mu(\partial_\mu+ia_\mu)\bar\psi\gamma_\mu-\varkappa\bar\psi=0;\quad \bar\psi=\psi^\dagger\gamma_4. \tag{194.3}$$

将上式再转置一下，则得

$$\sum_\mu\tilde\gamma_\mu(\partial_\mu+ia_\mu)\tilde{\bar\psi}-\varkappa\tilde{\bar\psi}=0,$$

其中

$$\tilde{\bar\psi}=\tilde\gamma_4\psi^*. \tag{194.4}$$

如果在最后的方程上乘以克利福特数 C，则得

$$\sum_\mu C\tilde\gamma_\mu(\partial_\mu+ia_\mu)\tilde\gamma_4\psi^*-\varkappa C\tilde\gamma_4\psi^*=0;$$

如果取 C 满足下列两个关系式：

$$-C\tilde\gamma_\mu\tilde\gamma_4\psi^*=\gamma_\mu\psi_c;\quad C\tilde\gamma_4\psi^*=\psi_c, \tag{194.5}$$

则上面的结果与(194.2)式完全相同. 为了求出 C 与 γ_μ 的关系，可以由上式消去 ψ_c

$$-C\tilde{\gamma}_\mu\tilde{\gamma}_4\psi^*=\gamma_\mu C\tilde{\gamma}_4\psi^*$$

略去 $\tilde{\gamma}_4\psi^*$ 后，留下决定 C 的四个关系式

$$\gamma_\mu C=-C\tilde{\gamma}_\mu. \tag{194.6}$$

由于上方程是齐次的，因此在 ψ_c（见 (194.5) 第二式）中总有一个任意的因子．为了尽可能地固定 ψ_c，可以合理地假设电荷共轭变换不会改变归一化条件

$$\psi_c^\dagger\psi_c=\psi^\dagger\psi=(\psi^\dagger\psi)^*. \tag{194.7}$$

现在由(194.5)有

$$\psi_c^\dagger=\tilde{\psi}\gamma_4^*C^\dagger,$$

因此

$$\psi_c^\dagger\psi_c=\tilde{\psi}\gamma_4^*C^\dagger C\tilde{\gamma}_4\psi^*=(\psi^*)^\dagger(\gamma_4^*C^\dagger C\tilde{\gamma}_4)(\psi^*).$$

与(194.7)式比较，得到

$$\gamma_4^*C^\dagger C\tilde{\gamma}_4=1,$$

或者，由于 $\gamma_4^\dagger=\gamma_4$，$\tilde{\gamma}_4=\gamma_4^*$，得

$$C^\dagger C=1. \tag{194.8}$$

由此可见 C 是一个幺正算符．

对于具体的标准表示有

$$\tilde{\gamma}_1=-\gamma_1;\quad \tilde{\gamma}_2=+\gamma_2;\quad \tilde{\gamma}_3=-\gamma_3;\quad \tilde{\gamma}_4=+\gamma_4. \tag{194.9}$$

因此方程(194.6)表明，C 与 γ_1 和 γ_3 对易，而与 γ_2 和 γ_4 反对易，满足这样条件的 C 可以取为

$$C=\gamma_2\gamma_4. \tag{194.10}$$

在克利福特代数的 16 个基元中唯一能够满足(194.6)式四个条件的，就是 $C=\gamma_2\gamma_4$．由上式还可得到

$$C^{-1}=-C;\quad C^2=-1. \tag{194.11}$$

把(194.10)代入(194.5)，最后得到，在标准表示下电荷共轭波函数是

$$\psi_c=\gamma_2\psi^*. \tag{194.12}$$

问题 195　混合螺旋性态

设 ψ 是沿 z 方向传播的一个平面狄拉克波. 试证明: 不可能构造一个旋量振幅使 ψ 同时又是 σ_x 的本征函数.

解　a) 对于平面波

$$\psi = Ce^{i(kz-\omega t)} \tag{195.1}$$

的旋量振幅 C, 由狄拉克方程可得如下的代数关系

$$\Omega C \equiv \left(ik\gamma_3 - \frac{\omega}{c}\gamma_4 + \varkappa \right) C = 0. \tag{195.2}$$

但是由(195.2)式定义的算符 Ω 与

$$\sigma_x = -i\gamma_2\gamma_3 \tag{195.3}$$

是不对易的, 因为

$$\sigma_x\Omega = +k\gamma_2 + i\frac{\omega}{c}\gamma_2\gamma_3\gamma_4 - i\varkappa\gamma_2\gamma_3$$

而

$$\Omega\sigma_x = -k\gamma_2 + i\frac{\omega}{c}\gamma_2\gamma_3\gamma_4 - i\varkappa\gamma_2\gamma_3.$$

因此 ψ 不可能是 Ω 和 σ_x 的共同本征函数.

b) 在标准表示中, (195.2)式化为

$$\begin{aligned}
&kC_3 + \left(-\frac{\omega}{c} + \varkappa\right) C_1 = 0;\\
&-kC_4 + \left(-\frac{\omega}{c} + \varkappa\right) C_2 = 0;\\
&-kC_1 + \left(\frac{\omega}{c} + \varkappa\right) C_3 = 0;\\
&kC_2 + \left(\frac{\omega}{c} + \varkappa\right) C_4 = 0.
\end{aligned} \tag{195.2'}$$

利用缩写

$$\frac{\omega}{c} - \varkappa = k\eta; \quad \frac{\omega}{c} + \varkappa = \frac{k}{\eta} \tag{195.3'}$$

则(195.2')可改写为

$$C_3 = \eta C_1; \quad C_4 = -\eta C_2. \tag{195.4}$$

另一方面，本征值方程

$$\sigma_x C=\lambda C \tag{195.5}$$

在标准表示中是

$$\sigma_x C=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\C_3\\C_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_2\\C_1\\C_4\\C_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda C_1\\\lambda C_2\\\lambda C_3\\\lambda C_4\end{pmatrix}$$

因此

$$\begin{aligned}&C_2=\lambda C_1; \quad C_1=\lambda C_2\\&C_4=\lambda C_3; \quad C_3=\lambda C_4.\end{aligned} \tag{195.6}$$

满足这两对方程的 λ 只能是 ± 1. 将(195.6)代入(195.4)的第二式，则得

$$C_3=-\eta C_1$$

这和(195.4)的第一式 $C_3=\eta C_1$ 是互相矛盾的. 因此，满足(195.4)式的旋量 C 不可能同时满足(195.6)式，这正是我们要证明的结论.

注　在非相论极限下，$\eta\to 0$，振幅 C_3 和 C_4 等于零，因而(195.6)的第二对方程将不出现. 这样就没有上述矛盾.

问题 196　自旋期待值

试计算在 z 方向传播的具有相反螺旋性的两个平面波的迭加态中 σ_z 的期待值.

解　利用正螺旋性和负螺旋性的旋量振幅[在(190.15, 16)式中取 $\vartheta=0$]

$$C_+=\frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}}\begin{pmatrix}1\\0\\\eta\\0\end{pmatrix} \quad 和 \quad C_-=\frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}}\begin{pmatrix}0\\-1\\0\\\eta\end{pmatrix} \tag{196.1}$$

构成混合态的振幅(带有二个任意的实常数 α 和 β):

$$C=C_+\cos\alpha e^{i\beta}+C_-\sin\alpha e^{-i\beta} \tag{196.2}$$

它满足同样的归一化条件

$$\int d^3xC^\dagger C=1. \tag{196.3}$$

在这个迭加态中, σ_x 的期待值定义为

$$\langle\sigma_x\rangle=\int C^\dagger\sigma_xC\,d^3x. \tag{196.4}$$

由

$$\sqrt{V(1+\eta^2)}\,\sigma_xC_+=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\\eta\end{pmatrix};$$

$$\sqrt{V(1+\eta^2)}\,\sigma_xC_-=\begin{pmatrix}-1\\0\\\eta\\0\end{pmatrix}$$

可得

$$C_+^\dagger\sigma_xC_+=0;\quad C_-^\dagger\sigma_xC_+=-\frac{1}{V}\frac{1-\eta^2}{1+\eta^2};$$

$$C_+^\dagger\sigma_xC_-=-\frac{1}{V}\frac{1-\eta^2}{1+\eta^2};\quad C_-^\dagger\sigma_xC_-=0.$$

于是

$$\langle\sigma_x\rangle=-\cos\alpha\sin\alpha\,(e^{2i\beta}+e^{-2i\beta})\frac{1-\eta^2}{1+\eta^2}$$

或

$$\langle\sigma_x\rangle=-\sin2\alpha\cos2\beta\,\frac{1-\eta^2}{1+\eta^2}. \tag{196.5}$$

由上式可见, σ_x 期待值的绝对值总是小于 1. 在极端相对论性的情况下, η 趋于 1, $\langle\sigma_x\rangle$ 变得很小, 因此自旋的取向几乎完全与传播方向平行或反平行. 相反, 在非相对论极限下, η 很小, 当 $\beta=0$, $\alpha=\mp\pi/4$ 时给出 $\langle\sigma_x\rangle=\pm1$, 这时自旋的取向垂直于传播方向.

问题 197　狄拉克波旋量的代数性质

如果势 $V(z)$ 只是 z 的函数，则自旋平行或反平行于 z 方向的态的波旋量将与 x、y 无关(一维问题)．试尽可能地利用克利福特代数(而不用矩阵表示)证明，旋量函数中留下的四个 z 的函数满足一组耦合的微分方程．最后将它们用标准表示下的四分量波函数表示出来．

解　波旋量可以写成

$$\psi(z,\ t)=e^{-iEt/\hbar}u(z), \tag{197.1}$$

其中旋量 $u(z)$ 满足一维的狄拉克方程

$$\gamma_3\frac{du}{dz}+\gamma_4Q(z)u+\varkappa u=0;\quad Q(z)=\frac{V(z)-E}{\hbar c}. \tag{197.2}$$

由于这个方程完全建立在一个以克利福特数 1，γ_3，γ_4，$\gamma_3\gamma_4$ 为基的子空间上，它的解应写成如下的旋量形式：

$$v(z)=A(z)+B(z)\gamma_3+C(z)\gamma_4+D(z)\gamma_3\gamma_4. \tag{197.3}$$

当然，如果 v 是狄拉克方程(197.2)的一个解，则任何旋量

$$u=v\Gamma \tag{197.4}$$

也是方程的解，其中 Γ 是任意的恒定的克利福特数(包括由 γ_1 和 γ_2 构成的 Γ)．另一方面，v 与自旋算符

$$\sigma_z=-i\gamma_1\gamma_2 \tag{197.5}$$

对易，但它不是 σ_z 的本征旋量．然而，推广表达式(197.4)，可以使狄拉克方程的解成为 σ_z 的一个本征旋量．由于

$$\sigma_zu=\sigma_zv\Gamma=v\sigma_z\Gamma,$$

因此，当 Γ 是 σ_z 的任一本征旋量时，

$$\sigma_z\Gamma=\pm\Gamma, \tag{197.6}$$

则得到

$$\sigma_zu=\pm u. \tag{197.7}$$

两个本征值 +1 和 −1 称为螺旋性(参见问题190). 不难看出,

$$\Gamma_+ = 1 - i\gamma_1\gamma_2 = 1 + \sigma_z \tag{197.8a}$$

和

$$\Gamma_- = 1 + i\gamma_1\gamma_2 = 1 - \sigma_z \tag{197.8b}$$

就是这样的本征旋量, σ_z 的本征值分别为 +1 和 −1:

$$\sigma_z\Gamma_\pm = \sigma_z(1 \pm \sigma_z) = \sigma_z + 1 = \pm(1 \pm \sigma_z) = \pm\Gamma_\pm.$$

由此可见,

$$u(z) = v(z)(1 \mp i\gamma_1\gamma_2), \tag{197.9}$$

其中 $v(z)$ 仍有待确定, 为此, 将上式代入狄拉克方程(197.2). 简单的计算给出

$$(B' + QC + \varkappa A) + \gamma_3(A' - QD + \varkappa B) + \gamma_4(D' + QA + \varkappa C) + \gamma_3\gamma_4(C' - QB + \varkappa D) = 0, \tag{197.10}$$

上式中的撇号表示对 z 的微商. 这个表达式为零的充要条件是四个括号中每一个都等于零. 因此四个函数 A, B, C, D 满足如下的一组耦合微分方程.

$$B' + QC + \varkappa A = 0; \quad A' - QD + \varkappa B = 0;$$
$$D' + QA + \varkappa C = 0; \quad C' - QB + \varkappa D = 0, \tag{197.11}$$

如果将它们组合成两对, 则方程进一步简化为

$$(B - D)' + (\varkappa - Q)(A - C) = 0;$$
$$(A - C)' + (\varkappa + Q)(B - D) = 0 \tag{197.12a}$$

和

$$(B + D)' + (\varkappa + Q)(A + C) = 0;$$
$$(A + C)' + (\varkappa - Q)(B + D) = 0, \tag{197.12b}$$

于是第一对方程(197.12a)只是两个函数

$$w_1 = \frac{1}{2}(B - D); \quad w_3 = \frac{1}{2}(A - C) \tag{197.13a}$$

的耦合微分方程, 而另一对方程(197.12b)只是

$$w_2=\frac{1}{2}(A+C);\quad w_4=\frac{1}{2}(B+D) \tag{197.13b}$$

的耦合微分方程. 由(197.13a, b), 可以反过来用 w_2, w_3 表示 A, C, 而用 w_1, w_4 表示 B, D, 然后代入(197.3)式, 最后得到

$$v(z)=(w_2+w_4\gamma_3)(1+\gamma_4)+(w_3+w_1\gamma_3)(1-\gamma_4). \tag{197.14}$$

如果 (197.12a, b) 成立, 则 (197.14) 式两项中的每一项分别地满足狄拉克方程(197.2). 在每一项的右面乘以 Γ_+ 或 Γ_-, (197.8a, b) 式, 给出的结果也是 σ_z 的一个本征旋量.

现在来看一下四个函数 w_μ 与标准表示下的四分量波函数 u_μ 之间的关系. 在标准表示下, 狄拉克方程(197.2)可以写成如下的分量方程:

$$\left.\begin{aligned} -iu_3'+(Q+\varkappa)u_1&=0,\\ iu_4'+(Q+\varkappa)u_2&=0,\\ iu_1'+(\varkappa-Q)u_3&=0,\\ -iu_2'+(\varkappa-Q)u_4&=0. \end{aligned}\right\} \tag{197.15}$$

将上式与(197.12a, b) 比较, 得到

$$u_1=w_1;\quad u_3=iw_3;\quad u_2=iw_2;\quad u_4=w_4 \tag{197.16}$$

或

$$A=-i(u_2+u_3);\quad B=u_4+u_1;$$
$$C=-i(u_2-u_3);\quad D=u_4-u_1. \tag{197.17}$$

当 $u_2=u_4=0$ 时, 螺旋性为 $+1$, 当 $u_1=u_3=0$ 时, 螺旋性为 -1.

问题 198 流的代数表示式

试确定前题的本征旋量

$$u(z)=(w_3+w_1\gamma_3)(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2) \tag{198.1}$$

所描述的态中电流的分量.

解 四维电流的分量定义是

$$s_\mu=iec\bar{u}\gamma_\mu u;\quad \bar{u}=u^\dagger\gamma_4, \tag{198.2}$$

按(198.1),有

$$u^{\dagger}=(1-i\gamma_1\gamma_2)(1-\gamma_4)(w_3^*+w_1^*\gamma_3), \tag{198.3}$$

因为克利福特数 $i\gamma_1\gamma_2$, γ_4, γ_3 都是厄密算符. 因此得到

$$s_\mu=iec(1-i\gamma_1\gamma_2)(1-\gamma_4)(w_3^*+w_1^*\gamma_3)\gamma_4\gamma_\mu(w_3+w_1\gamma_3)$$
$$\times(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2). \tag{198.4}$$

对于分量 s_1 和 s_2, 将上式中间的 γ_μ 向后移过两个括号, 并将 γ_4 向前移过一个括号后, 得到:

$$s_{1,2}=iec(1-i\gamma_1\gamma_2)(\gamma_4-1)(w_3^*-w_1^*\gamma_3)(w_3-w_1\gamma_3)$$
$$\times(1+\gamma_4)\gamma_{1,2}(1-i\gamma_1\gamma_2)$$

由于算符 $1-i\gamma_1\gamma_3$ 与 γ_3 及 γ_4 均对易, 因此

$$s_{1,2}=iec(\gamma_4-1)\{(|w_3|^2+|w_1|^2)$$
$$-(w_1^*w_3+w_3^*w_1)\gamma_3\}(1+\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2)\gamma_{1,2}(1-i\gamma_1\gamma_2).$$

最后三个因子的乘积无论对于 $\mu=1$ 或 $\mu=2$ 均等于零, 即

$$(1-i\gamma_1\gamma_2)(\gamma_1-i\gamma_2)=\gamma_1+i\gamma_2-i\gamma_2-\gamma_1=0$$
$$(1-i\gamma_1\gamma_2)(\gamma_2+i\gamma_1)=\gamma_2-i\gamma_1+i\gamma_1-\gamma_2=0.$$

因此, 正如所预期的, 不存在垂直于 z 方向的流分量.

对于 s_3 可以写出类似的表达式:

$$s_3=iec(\gamma_4-1)(w_3^*-w_1^*\gamma_3)(w_3\gamma_3+w_1)(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2)^2.$$

由于

$$(1-i\gamma_1\gamma_2)^2=2(1-i\gamma_1\gamma_2) \tag{198.5}$$

因此

$$s_3=2iec(\gamma_4-1)\{(w_3^*w_1-w_1^*w_3)$$
$$+(|w_3|^2-|w_1|^2)\gamma_3\}(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2).$$

将 (γ_4-1) 乘入花括号内, 则得

$$s_3=2iec\{(w_1^*w_3-w_3^*w_1)(1-\gamma_4)$$
$$+(|w_1|^2-|w_3|^2)\gamma_3(1+\gamma_4)\}(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2).$$

由于

$$(1+\gamma_4)(1-\gamma_4)=0;\quad (1-\gamma_4)^2=2(1-\gamma_4), \tag{198.6}$$

所以花括号中第二项没有贡献，从而得出

$$s_3 = 4iec(w_1^* w_3 - w_3^* w_1)(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2). \qquad (198.7)$$

用类似的办法最后得到

$$\begin{aligned} s_4 &= iec(1-i\gamma_1\gamma_2)(1-\gamma_4)(w_3^*+w_1^*\gamma_3)(w_3+w_1\gamma_3) \\ &\quad \times (1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2) \\ &= 2iec(1-\gamma_4)\{(|w_1|^2+|w_3|^2) \\ &\quad + (w_1^* w_3 + w_3^* w_1)\gamma_3\}(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2) \\ &= 4iec(|w_1|^2+|w_3|^2)(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2). \qquad (198.8) \end{aligned}$$

s_3, s_4 的表达式中仍有克利福特数，但出现的形式一样. 将它们与下列归一化表达式比较：

$$\begin{aligned} \bar{u}u &= (1-i\gamma_1\gamma_2)(1-\gamma_4)(w_3^*+w_1^*\gamma_3)\gamma_4(w_3 \\ &\quad + w_1\gamma_3)(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2). \end{aligned}$$

利用同样的步骤可以将上式化为

$$\bar{u}u = 4(|w_1|^2-|w_3|^2)(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2). \qquad (198.9)$$

综上所得，除公共因子

$$\Gamma = 4(1-\gamma_4)(1-i\gamma_1\gamma_2)$$

外，正好得到 z 方向的流密度的简单的 c 数表达式

$$s_3 = iec(w_1^* w_3 - w_3^* w_1)\Gamma, \qquad (198.10)$$

由 $s_4 = ic\rho$ 得到电荷密度 ρ 的表达式是

$$\rho = e(|w_1|^2+|w_3|^2)\Gamma, \qquad (198.11)$$

而归一化表示式是

$$\bar{u}u = (|w_1|^2-|w_3|^2)\Gamma. \qquad (198.12)$$

利用上题中引入的标准表示下的旋量分量，$u_1 = w_1$ 和 $u_3 = iw_3$，上述表达式可写为

$$\begin{aligned} s_3 &= ec(u_1^* u_3 + u_3^* u_1)\Gamma; \quad \rho = e(|u_1|^2+|u_3|^2)\Gamma; \\ \bar{u}u &= (|u_1|^2-|u_3|^2)\Gamma. \qquad (198.13) \end{aligned}$$

必须指出，在标准表示中算符 Γ 变得很简单. 这时

$$1-\gamma_4=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&2&0\\0&0&0&2\end{pmatrix};$$

$$1-i\gamma_1\gamma_2=1+\sigma_3=\begin{pmatrix}2&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&2&0\\0&0&0&0\end{pmatrix};$$

因此

$$\Gamma=16\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&0\end{pmatrix}, \tag{198.14}$$

这是只有一个元素的对角矩阵.

问题 199　传导流和极化流

a) 试证明电流密度(粒子电荷为 e)

$$s_\nu=iec\bar{\psi}\gamma_\nu\psi;\quad s_k=j_k;\ s_4=ic\rho \tag{199.1}$$

满足连续性方程

$$\sum_\mu\frac{\partial s_\mu}{\partial x_\mu}=0\quad\text{或}\quad \operatorname{div}\boldsymbol{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0. \tag{199.2}$$

b) 试将矢量 s_ν 分解为两部分

$$s_\nu=s_\nu^G+s_\nu^P \tag{199.3}$$

使得其中的一部分 s_ν^G (即传导流)的空间分量与 j_k 的非相对论性表达式相同. 余下的部分, s_k^P 就称为极化流.

解　a) 为了证明(199.2)式, 要用到狄拉克方程

$$\sum_\mu\gamma_\mu(\partial_\mu-ia_\mu)\psi+\varkappa\psi=0;\quad \partial_\mu=\frac{\partial}{\partial x_\mu};\quad a_\mu=\frac{e}{\hbar c}A \tag{199.4a}$$

以及对 $\bar{\psi}=\psi^{\dagger}\gamma_4$ 的类似方程. 算符

$$D_k=\partial_k-ia_k,\quad D_4=\partial_4-ia_4$$

的复共轭是

$$D_k^*=\partial_k+ia_k,\quad D_4^*=-(\partial_4+ia_4),$$

因为 x_k 和 a_k 是实的，而 x_4 和 a_4 是虚的. 因此(199.1a)的复共轭是

$$\sum_{\mu}D_{\mu}^*\psi^{\dagger}\gamma_{\mu}+\varkappa\psi^{\dagger}=0,$$

右乘以 γ_4，则得($\bar{\psi}=\psi^{\dagger}\gamma_4$)

$$-\sum_{k}D_k^*\bar{\psi}\gamma_k+D_4^*\bar{\psi}\gamma_4+\varkappa\bar{\psi}=0$$

或

$$\sum_{\mu}(\partial_{\mu}+ia_{\mu})\bar{\psi}\gamma_{\mu}-\varkappa\bar{\psi}=0. \tag{199.4b}$$

(199.4a)式左乘以 $\bar{\psi}$，(199.4b) 式右乘以 ψ，然后相减，消去质量项，得到

$$\sum_{\mu}\{\bar{\psi}\gamma_{\mu}(\partial_{\mu}-ia_{\mu})\psi+(\partial_{\mu}+ia_{\mu})\bar{\psi}\gamma_{\mu}\psi\}=0.$$

其中 a_{μ} 项相互抵消，最后得到与(199.2)式一致的结果：

$$\sum_{\mu}\partial_{\mu}(\bar{\psi}\gamma_{\mu}\psi)=0.$$

b) 按 126 题，电流空间部分的非相对论表达式

$$j_k=\frac{ie\hbar}{2m}(\psi\partial_k\psi^*-\psi^*\partial_k\psi+2ia_k\psi^*\psi) \tag{199.5}$$

主要是波函数及其空间微商的双线性组合. 为了使(199.1)的 s_{ν} 也具有类似的形式，可以利用(199.4a, b) 将 ψ 或 $\bar{\psi}$ 换成它们的一阶微商：

$$s_{\nu}=\frac{iec}{\varkappa}\sum_{\mu}(\partial_{\mu}+ia_{\mu})\bar{\psi}\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}\psi=-\frac{iec}{\varkappa}\bar{\psi}\gamma_{\nu}\sum_{\mu}\gamma_{\mu}(\partial_{\mu}-ia_{\mu})\psi.$$

将这二个表达式相加再除以 2，并令 $ec/\varkappa=e\hbar/m$，则得对称化的表达式

$$s_{\nu}=\frac{ie\hbar}{2m}\sum_{\mu}\frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x_{\mu}}\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}\psi$$
$$-\bar{\psi}\gamma_{\nu}\gamma_{\mu}\frac{\partial\psi}{\partial x_{\mu}}+ia_{\mu}\bar{\psi}(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}+\gamma_{\nu}\gamma_{\mu})\psi\}. \tag{199.6}$$

利用对易关系

$$\gamma_\mu\gamma_\nu+\gamma_\nu\gamma_\mu=2\delta_{\mu\nu}$$

(199.6)式化为

$$s_\nu=\frac{ie\hbar}{2m}\left\{\sum_\mu\left(\frac{\partial\bar\psi}{\partial x_\mu}\gamma_\mu\gamma_\nu\psi+\bar\psi\gamma_\mu\gamma_\nu\frac{\partial\psi}{\partial x_\mu}\right)\right.$$

$$\left.-2\psi\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu}+2ia_\nu\bar\psi\psi\right\}$$

或,将求和项中的对角项($\mu=\nu$)与非对角项($\mu\neq\nu$)分开来写,则有

$$s_\nu=\frac{ie\hbar}{2m}\left\{\frac{\partial\bar\psi}{\partial x_\nu}\psi-\bar\psi\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu}+2ia_\nu\bar\psi\psi\right\}$$

$$+\frac{ie\hbar}{2m}\sum_\mu{}'\frac{\partial}{\partial x_\mu}(\bar\psi\gamma_\mu\gamma_\nu\psi). \qquad (199.7)$$

其中第一项恰好和(199.5)式相当,因而就是前面定义的传导流s_ν^c.这样,第二项就是所谓极化流

$$s_\nu^p=\frac{ie\hbar}{2m}\sum_\mu{}'\frac{\partial}{\partial x_\mu}(\bar\psi\gamma_\mu\gamma_\nu\psi). \qquad (199.8)$$

注　这种分解首先由 W. Gorden(Z. Physik, **50**, 630(1928))作出.s_ν^p的空间部分可以写成

$$\mathbf{s}^p=\frac{e}{m}\operatorname{curl}(\bar\psi S\psi)-\frac{e\hbar i}{2mc}\frac{\partial}{\partial t}(\bar\psi\boldsymbol{\alpha}\psi)$$

其中$S_k=\frac{\hbar}{2}\sigma_k$是自旋矢量的分量(写成$4\times4$的可约矩阵),而$\alpha_k$是189题末尾定义的矩阵.对于平面波,极化流为零.

问题 200　将狄拉克方程分成一对二分量方程

将狄拉克方程写成哈密顿量的形式,并将这样得到的四分量方程在标准表示下分成一对二分量方程.在这些方程中将出现泡利矩阵.证明对于静质量为零的粒子(例如中微子)可以用两个二分量理论描述.

解　将狄拉克方程

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{\mu}\gamma_\mu D_\mu\psi+\varkappa\psi=0;\quad D_\mu=\partial_\mu-\frac{ie}{\hbar c}A_\mu;\\&A_4=i\Phi;\ e\Phi=V;\quad \partial_4=-\frac{i}{c}\partial_t\end{aligned}\right\}\tag{200.1}$$

中的空间微商和时间微商分开来写，则有

$$\sum_{n=1}^{3}\gamma_n D_n\psi+\gamma_4\left(-\frac{i}{c}\partial_t+\frac{V}{\hbar c}\right)\psi+\varkappa\psi=0.$$

左乘以 $c\hbar\gamma_4$，则得

$$\hbar c\sum_{n}\gamma_4\gamma_n D_n\psi-i\hbar\partial_t\psi+V\psi+mc^2\gamma_4\psi=0$$

或

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi,$$

其中哈密顿算符是

$$H=\hbar c\sum_{n=1}^{3}\gamma_4\gamma_n\left(\partial_n-\frac{ie}{\hbar c}A_n\right)+V+mc^2\gamma_4.\tag{200.2}$$

在标准表示中

$$\gamma_n=\begin{pmatrix}\mathbf{0}&-i\boldsymbol{s}_n\\ i\boldsymbol{s}_n&\mathbf{0}\end{pmatrix};\quad \gamma_4=\begin{pmatrix}\mathbf{1}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&-\mathbf{1}\end{pmatrix}\tag{200.3}$$

其中 $\boldsymbol{s}_n$ 是泡利矩阵，$\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{0}$ 分别代表 2×2 的单位矩阵和零矩阵. 因此

$$\alpha_n=i\gamma_4\gamma_n=\begin{pmatrix}\mathbf{0}&\boldsymbol{s}_n\\ \boldsymbol{s}_n&\mathbf{0}\end{pmatrix},\tag{200.4}$$

于是哈密顿算符(200.2)可以写成

$$H=\begin{pmatrix}V+mc^2&-\hbar ci\sum_n s_n D_n\\ -\hbar ci\sum_n s_n D_n&V-mc^2\end{pmatrix}.\tag{200.5}$$

如果引入两分量旋量 ψ_a 和 ψ_b，使

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}$$

是四分量狄拉克旋量，则可将微分方程拆成所需要的一对二分量方程，即

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_a}{\partial t} &= -i\hbar c(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{D})\psi_b+(V+mc^2)\psi_a,\\ -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_b}{\partial t} &= -i\hbar c(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{D})\psi_a+(V-mc^2)\psi_b. \end{aligned}\right\} \tag{200.6}$$

对于正能量 E 的定态，上式化为

$$\left.\begin{aligned} (\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{D})\psi_b-i\frac{E-V-mc^2}{\hbar c}\psi_a=0;\\ (\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{D})\psi_a-i\frac{E-V+mc^2}{\hbar c}\psi_b=0. \end{aligned}\right\} \tag{200.7}$$

中微子理论：如果 $m=0$，则上述两个方程完全一样，因此

$$\psi_b=\lambda\psi_a \quad 并且 \quad \lambda=\pm 1 \tag{200.8}$$

是两个可能的解，而 ψ_a 将由

$$\left\{(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{D})-\lambda i\frac{E-V}{\hbar c}\right\}\psi_a=0 \tag{200.9}$$

解出．由于(200.7)的两组二分量方程不再耦合在一起，对于静质量为零的粒子出现了两个独立的二分量理论．容易看出，在不存在力的情况下，参数 λ 和螺旋性量子数完全相同．为此，我们研究一个沿 z 方向的平面波

$$\psi_a=Ce^{ikz},$$

其中 C 是一个二分量的常数旋量．(200.9)的第一项化为

$$s_3\partial_3\psi_a=ik(s_3\psi_a)e^{ikz},$$

第二项化为

$$-\lambda i\frac{E}{\hbar c}=-ik\lambda,$$

于是有

$$s_3C=\lambda C. \tag{200.10}$$

因此 λ 是在传播方向上的自旋分量算符的本征值（单位是 $\hbar/2$）—即“螺旋性”．由于泡利矩阵

$$s_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},$$

对于 $\lambda=1$, (200.10) 的解是

$$C=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad 并且 \quad \psi=\begin{pmatrix}C\\C\end{pmatrix}e^{ikz} \tag{200.11a}$$

而对于 $\lambda=-1$, 解是

$$C=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad 并且 \quad \psi=\begin{pmatrix}C\\-C\end{pmatrix}e^{ikz}. \tag{200.11b}$$

注　实验表明中微子的螺旋性总是 $h=-1$, 因此实际上只有第二个理论正确地描述了自然现象.

现在, 算符

$$\gamma_5=\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$$

在标准表示中变成

$$\gamma_5=\begin{pmatrix}0 & -1\\-1 & 0\end{pmatrix},$$

于是

$$1+\gamma_5=\begin{pmatrix}1 & -1\\-1 & 1\end{pmatrix}; \quad 1-\gamma_5=\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}.$$

如果将这些算符作用在(200.9)的 $\lambda=+1$ 的解上, 即作用在

$$\psi_+=\begin{pmatrix}\psi_a\\\psi_a\end{pmatrix}$$

上, 则得出

$$(1+\gamma_5)\psi_+=0;\ (1-\gamma_5)\psi_+=2\psi_+. \tag{200.12a}$$

如果作用在(200.9)的 $\lambda=-1$ 的解上, 即作用在

$$\psi_-=\begin{pmatrix}\psi_a\\-\psi_a\end{pmatrix},$$

上, 则有

$$(1+\gamma_5)\psi_-=2\psi_-; \quad (1-\gamma_5)\psi_-=0. \tag{200.12b}$$

不能决定的是, 在自然界中只出现 ψ_-, 是由于某种未知的原理, 还是由于产生中微子的相互作用算符中包含一个 $1+\gamma_5$ 的因子, 从而使得 $\lambda=+1$ 的中微子不可能产生. 不管怎样, 必须指出, $1+\gamma_5$ 是一个没有确定宇称的算符.

问题 201　有心力场的狄拉克理论

利用上题中将狄拉克方程在标准表示中分成一对二分量方程

的办法，构成有心势场 $V(r)$ 的本征旋量，使它同时是总角动量算符 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征旋量．计算可限于 $m_j=+1/2$.

解 按(200.7)，有微分方程

$$\left.\begin{aligned}\sum_{n=1}^{3}s_n\partial_n\psi_b-i\frac{E-V(r)-mc^2}{\hbar c}\psi_a=0,\\ \sum_{n=1}^{3}s_n\partial_n\psi_a-i\frac{E-V(r)+mc^2}{\hbar c}\psi_b=0,\end{aligned}\right\}\tag{201.1}$$

其中 $s_n(n=1,\ 2,\ 3)$ 有三个泡利矩阵，并且

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}\tag{201.2}$$

是由二分量旋量 ψ_a 和 ψ_b 组成的狄拉克旋量.

从 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 导出的角动量算符有四分量的标准表示，由于用泡利矩阵表示的自旋矩阵的四分量的推广式

$$\sigma_n=\begin{pmatrix}s_n & 0\\ 0 & s_n\end{pmatrix}$$

是对角的，所以算符 $\boldsymbol{J}$ 不会使前两个分量（即 ψ_a）与后两个分量（即 ψ_b）混合．因此，如果 ψ_a 和 ψ_b 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的二分量本征旋量，则(201.2)式的 ψ 也是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征旋量.

在问题 133 中，我们已经构成了 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的两个二分量的本征旋量 $u_{j,l}$，相应于量子数 $j=l\pm\frac{1}{2}$ 和 $m_j=+\frac{1}{2}$，即

$$\begin{aligned}u^1=u_{j,\,j-\frac{1}{2}}&=\frac{f_l(r)}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+1} & Y_{l,0}\\ -\sqrt{l} & Y_{l,1}\end{pmatrix}\\ &=\frac{f_{j-\frac{1}{2}}(r)}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},0}\\ -\sqrt{j-\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{201.3a}$$

和

$$u^{\mathrm{II}}=u_{j,j+\frac{1}{2}}=\frac{g_j(r)}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l} & Y_{l,0}\\ \sqrt{l+1} & Y_{l,1}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{g_{j+\frac{1}{2}}(r)}{\sqrt{2(j+1)}}\begin{pmatrix}\sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},0}\\ \sqrt{j+\frac{3}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}. \tag{201.3b}$$

下面将试用这二个旋量组合成我们要求的解

$$\psi=\begin{pmatrix}u^{\mathrm{I}}\\ u^{\mathrm{II}}\end{pmatrix} \tag{201.4a}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix}u^{\mathrm{II}}\\ u^{\mathrm{I}}\end{pmatrix}, \tag{201.4b}$$

其中 $f(r)$ 和 $g(r)$ 的归一化仍未确定，并且对于 (201.4a) 和 (201.4b)，归一化可以不同.

根据这个计划，按(201.1)式，需要下列表达式

$$Su^{\mathrm{I,II}}=\sum_{n=1}^{3}s_n\partial_n u^{\mathrm{I,II}}=\begin{pmatrix}\partial_z & \partial_x-i\partial_y\\ \partial_x+i\partial_y & -\partial_z\end{pmatrix}u^{\mathrm{I,II}}. \tag{201.5}$$

利用熟知的公式

$$\pm(\partial_x\pm i\partial_y)(F(r)Y_{l,m})$$

$$=-\sqrt{\frac{(l\pm m+2)(l\pm m+1)}{(2l+3)(2l+1)}}\left(F'-\frac{l}{r}F\right)Y_{l+1,m\pm1}$$

$$-\sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\left(F'+\frac{l+1}{r}F\right)Y_{l-1,m\pm1} \tag{201.6a}$$

和

$$\partial_z(F(r)Y_{l,m})=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}}\left(F'-\frac{l}{r}F\right)Y_{l+1,m}$$

$$+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\left(F'+\frac{l+1}{r}F\right)Y_{l-1,m}, \tag{201.6b}$$

经过整理后，表达式

$$Su^{\mathrm{I}}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+1}\,\partial_z(f_lY_{l,0})-\sqrt{l}\,(\partial_x-i\partial_y)(f_lY_{l,1})\\ \sqrt{l+1}\,(\partial_x+i\partial_y)(f_lY_{l,0})+\sqrt{l}\,\partial_z(f_lY_{l,1})\end{pmatrix}$$

和

$$Su^{\mathrm{II}}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l}\,\partial_z(g_lY_{l,0})+\sqrt{l+1}\,(\partial_x-i\partial_y)(g_lY_{l,1})\\ \sqrt{l}\,(\partial_x+i\partial_y)(g_lY_{l,0})-\sqrt{l+1}\,\partial_z(g_lY_{l,1})\end{pmatrix}$$

化为

$$Su^{\mathrm{I}}=\frac{1}{\sqrt{2l+3}}\left(f_l'-\frac{l}{r}f_l\right)\begin{pmatrix}\sqrt{l+1}\,Y_{l+1,0}\\ \sqrt{l+2}\,Y_{l+1,1}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2(j+1)}}\left(f'_{j-\frac{1}{2}}-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f_{j-\frac{1}{2}}\right)\begin{pmatrix}\sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},0}\\ \sqrt{j+\frac{3}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}$$

$$\left(\text{对于 } j=l+\frac{1}{2}\right) \tag{201.7a}$$

和

$$Su^{\mathrm{II}}=\frac{1}{\sqrt{2l-1}}\left(g_l'+\frac{l+1}{r}g_l\right)\begin{pmatrix}\sqrt{l}\,Y_{l-1,0}\\ -\sqrt{l-1}\,Y_{l-1,1}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j}}\left(g'_{j+\frac{1}{2}}+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g_{j+\frac{1}{2}}\right)\begin{pmatrix}\sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},0}\\ -\sqrt{j-\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}$$

$$\left(\text{对于 } j=l-\frac{1}{2}\right). \tag{201.7b}$$

首先试将(201.4a)类型的解代入(201.1)式，得到

$$Su^{\mathrm{II}}-i\frac{E-V-mc^2}{\hbar c}u^{\mathrm{I}}=0;$$

$$Su^{\mathrm{I}}-i\frac{E-V+mc^2}{\hbar c}u^{\mathrm{II}}=0. \tag{201.8}$$

用(201.3a, b)的 u^{I}、u^{II} 和(201.7a, b)的 Su^{II}, Su^{I} 代入上式，则得(略去 f 和 g 的下标)：

$$Su^{\mathrm{II}}-i\frac{E-V-mc^2}{\hbar c}u^{\mathrm{I}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j}}\left(g'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g-i\frac{E-V-mc^2}{\hbar c}f\right)$$

$$\times\begin{pmatrix}\sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},0}\\ -\sqrt{j-\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}$$

和

$$Su^{\mathrm{I}}-i\frac{E-V+mc^2}{\hbar c}u^{\mathrm{II}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2(j+1)}}\left(f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f-i\frac{E-V+mc^2}{\hbar c}g\right)$$

$$\times\begin{pmatrix}\sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},0}\\ \sqrt{j+\frac{3}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}.$$

当径向函数 $f(r)$ 和 $g(r)$ 满足耦合微分方程

$$g'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g-i\frac{E-V(r)-mc^2}{\hbar c}f=0$$

$$f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f-i\frac{E-V(r)+mc^2}{\hbar c}g=0 \qquad (201.9a)$$

时，上面二个表达式的右边等于 0，因而(201.4a)满足(201.1)式.

另一方面，按同样的方式，将 (201.4b) 类型的解代入(201.1)式，得到的结果与将(201.8)式中的 u^{I} 和 u^{II} 互换后一样. 因此，最后得到的不是(201.9a)，而是将其中 m 换成 $-m$ 后得出的微分方程组：

$$\left.\begin{aligned} g'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g-i\,\frac{E-V(r)+mc^2}{\hbar c}f=0,\\ f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f-i\,\frac{E-V(r)-mc^2}{\hbar c}g=0. \end{aligned}\right\} \tag{201.9b}$$

微分方程(201.9a)和(201.9b)在给定的 $V(r)$ 下，仍然必须分别求解，这样才能得到完整的解. 由于这些微分方程是耦合的，所以它们决定 f 和 g 这两个函数的相对归一化.

必须指出，与非相对论性自旋理论不同，不同 l 值的贡献在四分量狄拉克旋量中是混在一起的，因此 l 不再是一个好量子数，不过 j 和 m_j 当然仍是好量子数.

问题 202　狄拉克理论中的开普勒问题

试将上面关于有心力问题的解应用于势

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{202.1}$$

并确定本征值.

解　对于一般的有心力问题，在上题中已经求出两组解，这些解的径向部分满足微分方程 (201.9a) 或 (201.9b). 我们先讨论 (201.9a). 令

$$\beta=\frac{Ze^2}{\hbar c}=\frac{Z}{137}, \tag{202.2}$$

必须记住，上式中 β 通常是一个很小的数. 引用缩写

$$\frac{\mu}{a}=\frac{mc^2-E}{\hbar c};\qquad \frac{1}{\mu a}=\frac{mc^2+E}{\hbar c}$$

或

$$\mu=\sqrt{\frac{mc^2-E}{mc^2+E}};\qquad a=\frac{\hbar c}{\sqrt{(mc^2-E)(mc^2+E)}}, \tag{202.3}$$

则对于势(202.1)，微分方程(201.9a)可以写成：

$$\left.\begin{aligned} g'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g+i\left(\frac{\mu}{a}-\frac{\beta}{r}\right)f=0; \\ f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f-i\left(\frac{1}{\mu a}+\frac{\beta}{r}\right)g=0. \end{aligned}\right\} \tag{202.4}$$

下面就来解这些方程.

我们先讨论 (202.4) 式在 r 很大和很小时的渐近行为. 当 $r\to\infty$ 时，(202.4)变成

$$g'+\frac{i\mu}{a}f=0; \qquad f'-\frac{i}{\mu a}g=0.$$

它们的可归一化解是

$$g=Ce^{-r/a}; \quad f=-C\frac{i}{\mu}e^{-r/a}.$$

另一组 $e^{+r/a}$ 类型的解不需讨论. 另一方面，当 $r\to 0$ 时，我们预期下列形式的正则解：

$$g=Ar^{s-1}; \quad f=Br^{s-1}.$$

将它们代入(202.4)，则得

$$(s-1)A+\left(j+\frac{3}{2}\right)A-i\beta B=0,$$

$$(s-1)B-\left(j-\frac{1}{2}\right)B-i\beta A=0.$$

令这组线性方程的行列式等于零，得出

$$s=\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\beta^2}. \tag{202.5}$$

总合上述结果，可以合理地令

$$\left.\begin{aligned} g=Cr^{s-1}e^{-r/a}G(r); \\ f=-\frac{i}{\mu}Cr^{s-1}e^{-r/a}F(r); \end{aligned}\right\} \tag{202.6}$$

将它们代入(202.4)，得到

$$\left.\begin{aligned} G'+\left(\frac{s+\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r}-\frac{1}{a}\right)G+\left(\frac{1}{a}-\frac{\beta}{\mu r}\right)F=0,\\ F'+\left(\frac{s-\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r}-\frac{1}{a}\right)F+\left(\frac{1}{a}+\frac{\beta\mu}{r}\right)G=0. \end{aligned}\right\} \tag{202.7}$$

将上面二式相加和相减，并令

$$G+F=v(r);\quad G-F=w(r), \tag{202.8}$$

则得

$$\left.\begin{aligned} v'+\frac{s+p}{r}v=-(k+q)\frac{w}{r},\\ w'+\left(\frac{s-p}{r}-\frac{2}{a}\right)w=-(k-q)\frac{v}{r}. \end{aligned}\right\} \tag{202.9}$$

上式中

$$p=\frac{\beta}{2}\left(\mu-\frac{1}{\mu}\right);\quad q=\frac{\beta}{2}\left(\mu+\frac{1}{\mu}\right);\quad k=j+\frac{1}{2}. \tag{202.10}$$

由(202.9)的第一式得

$$\begin{aligned} w&=-\frac{1}{k+q}\{rv'+(s+p)v\};\\ w'&=-\frac{1}{k+q}\{rv''+(s+p+1)v'\}. \end{aligned} \tag{202.11}$$

将它们代入 (202.9) 的第二式中，得出一个只含 v 的二阶微分方程：

$$rv''+\left[(2s+1)-\frac{2}{a}r\right]v'-\frac{2}{a}(s+p)v=0. \tag{202.12}$$

这是一个库末方程；它的解(在原点为正则，并具有任意归一化)是合流超几何级数

$$v={}_1F_1\left(s+p,\ 2s+1;\ 2\frac{r}{a}\right). \tag{202.13}$$

利用普遍公式

$$\left(z\frac{d}{dz}+a\right){}_1F_1(a,\ c;z)=a\,{}_1F_1(a+1,\ c;z)$$

由(202.11)得到

$$w=-\frac{s+p}{k+q}\,{}_1F_1\left(s+p+1,\ 2s+1;\ 2\frac{r}{a}\right). \quad (202.14)$$

将(202.13)和(202.14)代入(202.8)，得出 G 和 F，然后代入(202.6)，最后得到径向函数

$$\left.\begin{aligned} g&=\frac{1}{2}Cr^{s-1}e^{-r/a}\left\{{}_1F_1\left(s+p,\ 2s+1;2\frac{r}{a}\right)\right.\\ &\quad\left.-\frac{s+p}{k+q}\,{}_1F_1\left(s+p+1,\ 2s+1;\ 2\frac{r}{a}\right)\right\};\\ f&=-\frac{i}{2\mu}Cr^{s-1}e^{-r/a}\left\{{}_1F_1\left(s+p,\ 2s+1;\ 2\frac{r}{a}\right)\right.\\ &\quad\left.+\frac{s+p}{k+q}\,{}_1F_1\left(s+p+1,\ 2s+1;\ 2\frac{r}{a}\right)\right\}. \end{aligned}\right\} \quad (202.15)$$

这两个超几何级数在 $r\to\infty$ 时具有 $e^{+2r/a}$ 的渐近行为，因此，为了保证可归一性，它们的第一个参数必须是零或负整数：

$$s+p=-n_r;\quad n_r=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \quad (202.16)$$

当 $s+p=0$ 时，第二个合流超几何级数中的 $s+p+1=+1$，仍然大于零；不过这时前面的因子 $s+p$ 使(202.15)式中这一部分恒等于零. 因而并不破坏可归一性，因此(202.16)式是一个完备的本征值条件. 将(202.10)的 p 代入(202.16)，然后再将(202.3)的 μ 代入，则得能量满足的关系式

$$\frac{1}{2}\beta\left\{\sqrt{\frac{mc^2-E}{mc^2+E}}-\sqrt{\frac{mc^2+E}{mc^2-E}}\right\}=-(n_r+s).$$

解上式求出 E，得

$$E=\frac{mc^2}{\sqrt{1+\dfrac{\beta^2}{(n_r+s)^2}}}, \quad (202.17)$$

这就是我们要求的能级公式.

至此，我们还没有考虑第二组径向方程(201.9b)，它可以由(202.4)式把 μ 换成 $-\frac{1}{\mu}$ 而得出，这一代换给出 $p\to -p$, $q\to -q$ (见(202.10)式)，于是本征值条件(202.16)将改为 $s-p=-n_r$，然而这对能级公式没有任何影响．因此对于每一个能量项有两个解(简并)．

如果 $\beta>1$($Z>137$)，则(202.5)式中的 s 对于基态 ($j=1/2$) 变成虚数，因而不能简单地满足 $r=0$ 处的边界条件．当 Z 很大时，势阱变得如此之深，使得最低的束缚态的能量 $E<-mc^2$．按照(202.3)式，这时 a 变成虚数，并且(202.6)式的解 f 和 g 在大 r 值时，不再是指数下降的．这是电子波透入负能区域的结果(克莱因佯谬)．在下面的 207 题中，对于势阶(情况 c)将较详细地解释这种现象．

问题 203　氢原子的精细结构

对于氢原子，上题中的参数 β 等于索末菲精细结构常数：

$$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{1}{137}.$$

由于此参数很小，(202.5)和(202.17)式可以展成级数．试利用这种展开，在非相对论量子力学加上一级相对论修正的近似下，确定氢原子的能级和波函数．

解　由(202.5)式，将 s 展成 α^2 的级数

$$s=\left(j+\frac{1}{2}\right)-\frac{\alpha^2}{2j+1}+O(\alpha^4). \tag{203.1}$$

把这代入能量公式(202.17)，得

$$E=mc^2\left\{1+\left[\alpha^2\Big/\left(n-\frac{\alpha^2}{2j+1}\right)^2\right]\right\}^{-1/2}$$

其中，为方便起见，引入了主量子数

$$n=n_r+j+\frac{1}{2}. \tag{203.2}$$

将 E 的上述表达式再展开，则得

$$E=mc^2\left\{1-\frac{\alpha^2}{2n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right]+O(\alpha^6)\right\}. \tag{203.3}$$

由于

$$mc^2\alpha^2=\frac{me^4}{\hbar^2},$$

最后得到在一级相对论近似下的氢原子能级公式

$$E=mc^2-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right], \tag{203.4}$$

其中第一项是静能，α^2 项除外的第二项是非相对论的巴耳末项（参见问题 67），而 α^2 项给出一个数量级为 $\alpha^2=0.532\times10^{-4}$ 的一级相对论修正，对于结合能的修正大约为二万分之一．由于这一修正既与 n 也与 j 有关，因此每一个非相对论能级将分裂为几个精细结构的分能级．

现在将(202.3)式的长度参数 a 展成

$$a=\frac{\hbar^2}{me^2}n\left[1-\frac{\alpha^2}{2n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-1\right)\right]+O(\alpha^4). \tag{203.5}$$

当略去方程号中的 α^2 项(相对论修正)时，上式就是熟知的氢原子第 n 个轨道的玻尔半径．由于次超几何级数的自变量是 $\frac{2r}{a}$，并且 $e^{-r/a}$ 作为一个因子出现在径向波函数(202.15)中，因此与非相对论理论十分相似，原子的大小决定于 a.

为了由相对论波函数(202.15)过渡到非相对论的薛定谔波函数，需要用(202.3)和(202.10)的 μ 和 q 的展开式：

$$\mu=\frac{\alpha}{2n}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{2j+1}-\frac{1}{4}\right)\right]; \tag{203.6}$$

$$q=n\left[1-\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{2j+1}-\frac{1}{2}\right)\right]. \tag{203.7}$$

(202.15)中第二个次超几何级数前面的因子在非相对论近似下变成

$$\frac{s+p}{k+q}=-\frac{n_r}{j+\frac{1}{2}+n}=-\frac{n_r}{n_r+(2j+1)}, \qquad (203.8)$$

即数量级为1($n_r=0$ 情况除外,这时它等于零). 按(203.6)式, 因子 μ 是 α 的数量级, 因此 f 约比 g 大两个数量级. 在非相对论近似和任意归一化下,可以完全略去 g 而得到:

$$\left.\begin{aligned} &g=0,\\ &f=r^{j-\frac{1}{2}}\,e^{-r/a}\left\{{}_1F_1\left(-n_r,\ 2j+2;\ 2\frac{r}{a}\right)\right.\\ &\qquad\left.-\frac{n_r}{n_r+2j+1}\,{}_1F_1\left(-n_r+1,\ 2j+2;\ 2\frac{r}{a}\right)\right\}. \end{aligned}\right\} \qquad (203.9)$$

如果令 $j=l+1/2$, 则函数 f 的确可化为薛定谔波函数(参见(67.12)式)

$$f_{\text{波}}=r^l e^{-\gamma r}\,{}_1F_1(l+1-n,\ 2l+2;\ 2\gamma r) \qquad (203.9\text{S})$$

其中 $\gamma=\frac{1}{a}$. 现在来证明这一结论. 当 $j=l+1/2$ 时, (203.2)的主量子数是 $n=n_r+l+1$, 因此 $n_r=n-l-1$, 并且

$$\begin{aligned} f=r^l e^{-\gamma r}\Big\{&{}_1F_1(l+1-n,\ 2l+3;\ 2\gamma r)\\ &-\frac{n-l-1}{n+l-1}\,{}_1F_1(l+2-n,\ 2l+3;\ 2\gamma r)\Big\}. \end{aligned}$$

利用普遍关系式

$$\begin{aligned} a\ {}_1F_1(a+1,\ c+1;\ z)=&(a-c)\,{}_1F_1(a,\ c+1,\ z)\\ &+c\ {}_1F_1(a,\ c,\ z) \end{aligned}$$

取 $a=l+1-n$, $c=2l+2$, $z=2\gamma r$, 可以将花括号中的

$${}_1F_1(a,\ c+1;\ z)+\frac{a}{c-a}\,{}_1F_1(a+1,\ c+1,\ z).$$

变换为

$$\frac{c}{c-a}{}_1F_1(a,\ c;z)=\frac{2l+2}{n+l+1}\ {}_1F_1(l+1-n,\ 2l+2;2\gamma r)$$

这正是(203.9S)式所要求的.

第二个解要分开讨论. 这时, 由于μ换成$-1/\mu$, 因此f是小的解而g是大的解. 除一归一化因子外,在非相对论近似下

$$g=r^{j-\frac{1}{2}}e^{-\gamma r}\{{}_1F_1(-n_r,\ 2j+2;2\gamma r)$$
$$-{}_1F_1(1-n_r,\ 2j+2;2\gamma r)\},\quad f=0. \qquad (203.10)$$

在上式中我们必须令$j=l-\frac{1}{2}$:

$$g=r^{l-1}e^{-\gamma r}\{{}_1F_1(-n_r,\ 2l+1;2\gamma r)$$
$$-{}_1F_1(1-n_r,\ 2l+1;2\gamma r)\}.$$

为了证明它仍然是函数(203.9S),要利用普遍公式

$$a\{{}_1F_1(a+1,\ c-1;z)-{}_1F_1(a,\ c-1;z)\}$$
$$=z\frac{d}{dz}\ {}_1F_1(a,\ c-1;z)$$

和

$$(c-1)\frac{d}{dz}\ {}_1F_1(a,\ c-1;z)=a_1F_1(a+1,\ c;z).$$

的确,经过变换后,g变成(除一个因子$2\gamma/2l+1$外)

$$g=r^le^{-\gamma r}{}_1F_1(1-n_r,\ 2l+2;2\gamma r).$$

按照(203.2)式, $1-n_r=j+\frac{3}{2}-n$, 当$j=l-\frac{1}{2}$时, 仍然化为$l+1-n$, 于是上面的g与(203.9S)相同.

至此,我们只是把l当作一个方便的参数,而没有涉及它的物理意义. 现在就来讨论后者. 为此, 我们对于两种类型的解计算$\boldsymbol{L}^2$的期待值. 利用简单关系式

$$\boldsymbol{L}^2Y_{l,m}=\hbar^2l(l+1)Y_{l,m},$$

就得到对两类解的期待值

$$\langle \boldsymbol{L}^2 \rangle = \hbar^2 \frac{\left\{\int_0^\infty dr r^2 \left\{\left(j-\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{1}{2}\right)|f|^2 + \left(j+\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{3}{2}\right)|g|^2\right\}\right\}}{\int_0^\infty dr r^2 \{|f|^2+|g|^2\}}. \quad (203.11)$$

对于第一类解，可以略去 $|g|^2$，它在数量级上比 $|f|^2$ 小 α^2 倍，从而得出

$$\langle \boldsymbol{L}^2 \rangle = \left(j-\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{1}{2}\right)\hbar^2, \quad (203.12a)$$

这对应于 $l=j-\frac{1}{2}$. 对于第二类解，情况正好相反，与 $|g|^2$ 相比，$|f|^2$ 可以略去，于是得到

$$\langle \boldsymbol{L}^2 \rangle = \left(j+\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{3}{2}\right)\hbar^2, \quad (203.12b)$$

这对应于 $l=j+\frac{1}{2}$. 这些正是前面把 l 作为参数时所取的值. 换句话说，在非相对论近似下，当 f 和 g 不再混合在同一个波旋量中时，l 又变成一个好量子数.

补充. 本征旋量是由

$$u^{\mathrm{I}} = \frac{1}{\sqrt{2j}} f(r) \begin{pmatrix} \sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},0} \\ -\sqrt{j-\frac{1}{2}} & Y_{j-\frac{1}{2},1} \end{pmatrix}$$

和

$$u^{\mathrm{II}} = \frac{1}{\sqrt{2(j+1)}} g(r) \begin{pmatrix} \sqrt{j+\frac{1}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},0} \\ \sqrt{j+\frac{3}{2}} & Y_{j+\frac{1}{2},1} \end{pmatrix}$$

按形式

$$\psi_a = \begin{pmatrix} u^{\mathrm{I}} \\ u^{\mathrm{II}} \end{pmatrix} \quad 或 \quad \psi_b = \begin{pmatrix} u^{\mathrm{II}} \\ u^{\mathrm{I}} \end{pmatrix}$$

组成的. 上面已经看到，对第一类解 ψ_a，$g \ll f$，对另一类解 ψ_b，$f \ll g$，于是它们近似地简化为

$$\psi_a=\begin{pmatrix} u^1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad 和 \quad \psi_b=\begin{pmatrix} u^{11} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

这就成为非相对论性的二分量自旋理论，在这个理论中对于 ψ_a, $j=l+\frac{1}{2}$; 而对于 ψ_b, $j=l-\frac{1}{2}$; 这时在同一个 j 的不同 l 值之间没有任何混合.

更进一步我们知道，ψ_a 中的"大"函数是

$$f=r^{j-\frac{1}{2}}e^{-\gamma r}{}_1F_1\left(j+\frac{1}{2}-n,\ 2j+1;\ 2\gamma r;\right); \quad j=l+\frac{1}{2}$$

而 ψ_b 中的"大"函数则是

$$g=r^{j+\frac{1}{2}}e^{-\gamma r}{}_1F_1\left(j+\frac{3}{2}-n,\ 2j+3;2\gamma r\right); \quad j=l-\frac{1}{2}.$$

存在可归一化解的充要条件，是合流超几何级数的第一个参数为零或负整数，由此得到最低的几个可能态列在下表中. 它们的径向波函数(或者 f, 或者 g) 就是问题 67 中讨论过的非相对论波函数; 它的二分量特征与非相对论自旋理论(参见问题133)一致.

j	解		光谱符号表示的	
	ψ_a	ψ_b	ψ_a	ψ_b
$\frac{1}{2}$	$n\geqslant 1$	$n\geqslant 2$	$nS_{\frac{1}{2}}$	$nP_{\frac{1}{2}}$
$\frac{3}{2}$	$n\geqslant 2$	$n\geqslant 3$	$nP_{\frac{3}{2}}$	$nD_{\frac{3}{2}}$
$\frac{5}{2}$	$n\geqslant 3$	$n\geqslant 4$	$nD_{\frac{5}{2}}$	$nF_{\frac{5}{2}}$

按(203.4)，除剩余能量外，能级公式是

$$E_{n,j}=-E_n^0-\Delta E_{n,j},$$

其中

$$E_n^0=\frac{1}{2n^2}$$

是非相对论巴耳末结合能(以 $mc^4/\hbar^2=27.2\text{eV}$ 为单位).

而

$$\Delta E_{n,j}=\frac{\alpha^2}{2n^4}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)$$

是一级相对论修正. 在下表中列出 $n=3$ 的能量值及其修正. 由表可见，能级愈低，分裂愈大. 这就解释了为什么红的 H_α 线($n=3\to n=2$) 是一个裂距约为

$$(2.08-0.42)\times10^{-6}\times27.2\text{eV}$$

或 0.365cm^{-1} 的二重态.

n	E_n^0	$(2/\alpha^2)\Delta E_{n,j}$			$10^3\times\Delta E_{n,j}$		
		$j=\frac{1}{2}$	$j=\frac{3}{2}$	$j=\frac{5}{2}$	$j=\frac{1}{2}$	$j=\frac{3}{2}$	$j=\frac{5}{2}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	—	—	6.68	—	—
2	$\frac{1}{8}$	$\frac{5}{64}$	$\frac{1}{64}$	--	2.08	0.42	—
3	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{108}$	$\frac{1}{324}$	0.74	0.25	0.08

问题 204　正动能的径向开普勒解

如果库仑场中的电子动能为正, $E-mc^2>0$, 试确定径向波函数及其在离吸引中心无限远处的渐近行为.

解　由于 $mc^2-E<0$, 将问题 202 中的 (202.3) 换成下列定义

$$\eta k=\frac{E-mc^2}{\hbar c};\quad \frac{k}{\eta}=\frac{E+mc^2}{\hbar c},\tag{204.1a}$$

其中 k 是无限远处的波数. 由上二式可得

$$\eta=\sqrt{\frac{E-mc^2}{E+mc^2}};\quad k=\frac{\sqrt{(E-mc^2)(E+mc^2)}}{\hbar c}.\tag{204.1b}$$

于是(202.4)式变为

$$\left.\begin{aligned} g'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g+i\left(-\eta k-\frac{\beta}{r}\right)f=0,\\ f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f-i\left(\frac{k}{\eta}+\frac{\beta}{r}\right)g=0. \end{aligned}\right\}\tag{204.2}$$

解这些方程的方法与问题 202 完全类似, 令

$$g=\frac{1}{2}(w+v)r^{s-1}e^{ikr};\quad f=\frac{1}{2\eta}(w-v)r^{s-1}e^{ikr},\tag{204.3}$$

其中

$$s=\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\beta^2}. \tag{204.4}$$

利用缩写

$$P=\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\eta}-\eta\right);\qquad Q=\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\eta}+\eta\right) \tag{204.5}$$

及变量

$$z=-2ikr, \tag{204.6}$$

直接计算后得出：

$$z\frac{d^2w}{dz^2}+[(2s+1)-z]\frac{dw}{dz}-(s-iQ)w=0 \tag{204.7}$$

和

$$v=-\frac{1}{j+\frac{1}{2}+iP}\left[z\frac{dw}{dz}+(s-iQ)w\right]. \tag{204.8}$$

微分方程(204.7)在原点为正则的解(任意归一化)是

$$w=C_1F_1(s-iQ,\ 2s+1;\ z). \tag{204.9}$$

由(204.8)，利用公式

$$\left\{z\frac{d}{dz}+a\right\}{}_1F_1(a,\ c;\ z)=a_1F_1(a+1,\ c;\ z),$$

则得

$$v=-C\frac{s-iQ}{j+\frac{1}{2}+iP}{}_1F_1(1+s-iQ,\ 2s+1;\ z). \tag{204.10}$$

(204.9)和(204.10)给出了径向问题的完备解(任意归一化).

对于 r 的正实值，按(204.6)，z 是负的虚数，因此我们可以放心地应用渐近公式

$${}_1F_1(a,\ c;\ z)\to e^{-i\pi a}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}z^{-a}+\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}e^{z}z^{a-c}, \tag{204.11}$$

因此得到

$$w \to \frac{CI'(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{(2kr)^s}\left\{\frac{e^{-\frac{i\pi s}{2}+iQ\log 2kr}}{\Gamma(1+s+iQ)}\right.$$

$$\left.+\frac{ie^{-\frac{i\pi s}{2}-iQ\log 2kr}}{\Gamma(s-iQ)}\cdot\frac{e^{-2ikr}}{2kr}\right\}$$

和

$$v \to -\frac{CI'(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{(2kr)^s}\cdot\frac{s-iQ}{j+\frac{1}{2}+iP}\left\{\frac{e^{-\frac{i\pi s}{2}+iQ\log 2kr}}{i\Gamma(s+iQ)}\right.$$

$$\left.\times\frac{1}{2kr}+\frac{e^{i\frac{\pi s}{2}-iQ\log 2kr}}{\Gamma(1+s-iQ)}e^{-2ikr}\right\}.$$

w 括号中的第二项和 v 括号中的第一项分别比另一项小 $1/kr$ 的数量级，因而可以忽略．将这些表示式代入(204.3)，得到

$$rg \to C_1 e^{i(kr+Q\log 2kr)}+C_2 e^{-i(kr+Q\log 2kr)},$$

$$\eta rf \to C_1 e^{i(kr+Q\log 2kr)}-C_2 e^{-i(kr+Q\log 2kr)} \qquad (204.12)$$

其中复振幅常数

$$\left.\begin{aligned} C_1 &= -\frac{CI'(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{2(2k)^s}\cdot\frac{e^{-\frac{i\pi s}{2}}}{\Gamma(1+s-iQ)} \\ C_2 &= -\frac{CI'(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{2(2k)^s}\cdot\frac{s-iQ}{j+\frac{1}{2}+iP}\cdot\frac{e^{\frac{i\pi s}{2}}}{\Gamma(1+s-iQ)} \end{aligned}\right\}. \qquad (204.13)$$

由于入射和出射的分波振幅应当相等，常数 C_1 和 C_2 自然只能相差一个相因子．的确，导致 C_1 和 C_2 不同的两个因子

$$\frac{s-iQ}{j+\frac{1}{2}+iP}=e^{2i\delta} \quad 和 \quad \frac{\Gamma(1+s+iQ)}{\Gamma(1+s-iQ)}=e^{2i\zeta} \qquad (204.14)$$

都是相因子．上面的第二个等式是显然的；而第一个等式左边的模平方等于 1

$$\left|\frac{s-iQ}{j+\frac{1}{2}+iP}\right|^2=\frac{s^2+Q^2}{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-P^2}=1$$

因为 $\quad Q^2-P^2=\beta^2$ 和 $\quad s^2=\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\beta^2$,

因此最后得到

$$g=|C_1|e^{i\delta}2i\frac{\sin\xi}{r};\quad f=|C_1|e^{i\delta}2\frac{\cos\xi}{r}\qquad(204.15)$$

其中

$$\xi=kr+Q\log 2kr-\frac{\pi s}{2}-\zeta-\delta\qquad(204.16)$$

注 这结果可以与非相对论理论的结果比较一下，在这里 $\eta\ll 1$，所以 $f\gg g$，(204.15)式给出

$$f\propto\frac{1}{r}\sin\left(kr+Q\log 2kr-\frac{\pi}{2}(s+1)-\zeta-\delta\right).\qquad(204.17)$$

按(204.5)和(204.1b)，Q 可以用 E 来表示，或由熟知的关系式

$$E=mc^2\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}},$$

Q 可以用无限远处的速度 v 表示为

$$Q=\frac{Ze^2}{\hbar v},$$

即 Q 与问题 110 中的 $\varkappa$ 相同。由(204.1b)可以进一步得到 $\hbar k$ 是电子在无限远处的动量。因此(204.17)式的宗量的前两项与经典表达式一致。在同样的近似下，由

$$s\to j+\frac{1}{2}=l+1\quad 和\quad P\to Q=\varkappa;$$

宗量(相角)的常数部分化为

$$\frac{\pi}{2}(s+1)+\zeta+\delta\to\frac{\pi}{2}(l+2)+\arg\Gamma(l+2+i\varkappa)-\arg\Gamma(l+1+i\varkappa)$$

$$=\pi+\frac{\pi}{2}l+\arg\Gamma(l+1+i\varkappa).$$

将它代入(204.17)，略去只使波函数改变一个符号的相角 π，则最后得到

$$f\propto\frac{1}{r}\sin\left\{kr+\varkappa\log 2kr-\frac{\pi l}{2}-\arg\Gamma(l+1+i\varkappa)\right\}.$$

这与问题 111 的结果完全一致，但是现在是吸引库仑势。

问题 205　平面狄拉克波的角动量展开

试利用问题 190 的角动量本征旋量构成在 z 方向上螺旋性 $h=+1$ 的平面波：

$$\psi=C\begin{pmatrix}1\\0\\\eta\\0\end{pmatrix}e^{ikz}=C\begin{pmatrix}1\\0\\\eta\\0\end{pmatrix}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l Y_{l,0}\frac{j_l(kr)}{kr} \tag{205.1}$$

解　我们先来求 $V(r)=0$ 时，方程(201.9a, b)的解. 引用缩写 η（在问题 190 中用过的）

$$\frac{E-mc^2}{\hbar c}=k\eta;\quad \frac{E+mc^2}{\hbar c}=\frac{k}{\eta}, \tag{205.2}$$

则(201.9a)化为

$$g'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g-ik\eta f=0; \tag{205.3a}$$

$$f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f-i\frac{k}{\eta}g=0. \tag{205.3b}$$

由(205.3b)得

$$i\frac{k}{\eta}g=f'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f, \tag{205.4}$$

微分后得　$$i\frac{k}{\eta}g'=f''-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f'+\frac{j-\frac{1}{2}}{r^2}f.$$

将后两个表达式代入(205.3a)，得到关于 f 的二阶微分方程：

$$f''+\frac{2}{r}f'+\left[k^2-\frac{\left(j-\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r^2}\right]f=0, \tag{205.5}$$

此方程在原点为正则的任意归一化解是

$$f=\frac{1}{kr}j_{j-\frac{1}{2}}(kr), \tag{205.6}$$

然后将(205.6)代入(205.4)，则得

$$i\frac{k}{\eta}g=\frac{1}{kr}\left\{j'_{j-\frac{1}{2}}-\frac{j+\frac{1}{2}}{kr}j_{j-\frac{1}{2}}\right\},$$

其中撇号表示对宗量 kr 的微商. 利用普遍公式

$$j_l'(z)-\frac{l+1}{z}j_l(z)=-j_{l+1}(z),$$

则得

$$g=\frac{i\eta}{kr}j_{j+\frac{1}{2}}(kr). \tag{205.7}$$

因此，g 的归一化相对于 f 的是固定的. 将(205.6)和(205.7)代入(201.3a, b)，则对于给定 j 和 $m_j=+\frac{1}{2}$ 的四分量旋量(201.4a)可写成

$$\psi_j^{\mathrm{I}}=\frac{1}{kr}\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{j+\frac{1}{2}}{2j}}j_{j-\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j-\frac{1}{2},0}\\ -\sqrt{\frac{j-\frac{1}{2}}{2j}}j_{j-\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j-\frac{1}{2},1}\\ i\eta\sqrt{\frac{j+\frac{1}{2}}{2(j+1)}}j_{j+\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j+\frac{1}{2},0}\\ i\eta\sqrt{\frac{j+\frac{3}{2}}{2(j+1)}}j_{j+\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j+\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}. \tag{205.8}$$

问题201的第二个解可以由(205.3a, b)中的 η 换成 $1/\eta$ 而求得，因此解 f 仍然是(205.6)式，但(205.7)中的 η 要换成 $1/\eta$. 然后，按(201.4b)式得到任意归一化的第二个解：

$$\psi_j^{\mathrm{II}}=\frac{1}{kr}\begin{pmatrix}\dfrac{i}{\eta}\sqrt{\dfrac{j+\frac{1}{2}}{2(j+1)}}\,j_{j+\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j+\frac{1}{2},0}\\ \dfrac{i}{\eta}\sqrt{\dfrac{j+\frac{3}{2}}{2(j+1)}}\,j_{j+\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j+\frac{1}{2},1}\\ \sqrt{\dfrac{j+\frac{1}{2}}{2j}}\,j_{j-\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j-\frac{1}{2},0}\\ -\sqrt{\dfrac{j-\frac{1}{2}}{2j}}\,j_{j-\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j-\frac{1}{2},1}\end{pmatrix}. \tag{205.9}$$

为了构成形如(205.1)式的解，我们必须把这些解叠加起来，写成

$$\psi=\sum_j{}'(A_j\psi_j^{\mathrm{I}}+B_j\psi_j^{\mathrm{II}}). \tag{205.10}$$

当然，在这表达式中，对于不同的求和，可以用不同的方式改换哑指标 j. 下面我们将再次利用轨道角动量量子数 l 作这种改换，对所有的

$$j_{j-\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j-\frac{1}{2},m}\quad(m=0\text{ 或 }1)$$

的项求和时，取 $j=l+\frac{1}{2}$；而对所有

$$j_{j+\frac{1}{2}}(kr)\,Y_{j+\frac{1}{2},m}$$

的项求和时，取 $j=l-\frac{1}{2}$. 这样，将 (205.8) 和 (205.9) 代入 (205.10)，得到

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{j_l(kr)}{\sqrt{2l+1}\,kr}\begin{pmatrix}\left(A_{l+\frac{1}{2}}\sqrt{l+1}+B_{l-\frac{1}{2}}\dfrac{i}{\eta}\sqrt{l}\right)Y_{l,0}\\ \left(-A_{l+\frac{1}{2}}\sqrt{l}+B_{l-\frac{1}{2}}\dfrac{i}{\eta}\sqrt{l+1}\right)Y_{l,1}\\ (i\eta\,A_{l-\frac{1}{2}}\sqrt{l}+B_{l+\frac{1}{2}}\sqrt{l+1})Y_{l,0}\\ (i\eta\,A_{l-\frac{1}{2}}\sqrt{l+1}-B_{l+\frac{1}{2}}\sqrt{l})Y_{l,1}\end{pmatrix}. \tag{205.11}$$

这里对所有 $l\geqq 0$ 求和是正确的. 在 $j=l+\frac{1}{2}$ 项中,由于 $j\geqq\frac{1}{2}$,这是显然的. 另一方面,对于 $j=l-\frac{1}{2}$,求和应由 $l=1$ 开始. 但是,由于 $Y_{0,1}=0$,所以(205.11)中第二和第四行为零. 在第一行第三行中还有 $j=l-\frac{1}{2}$的项($l=0$),不过,由于因子 $\sqrt{l}$,这些项也等于 0.

为了使求和式(205.11)与(205.1)相同,只需令

$$\left.\begin{aligned} A_{l+\frac{1}{2}} &= \sqrt{4\pi}\,Ci^l\sqrt{l+1},\\ B_{l+\frac{1}{2}} &= \eta_l\sqrt{4\pi}\,Ci^l\sqrt{l+1}\end{aligned}\right\}. \tag{205.12}$$

这是容易直接验证的.

问题 206　在有心力势上的散射

一个正螺旋性的平面狄拉克波被有心力势散射. 如果相位采用径向波方程解的相位,试确定散射波的渐近行为.

解　在问题 201 中已经证明存在两组径向方程

第一组:

$$\left.\begin{aligned} g_j'+\frac{j+\frac{3}{2}}{r}g_j-ik\eta f_j+iU(r)f_j=0,\\ f_j'-\frac{j-\frac{1}{2}}{r}f_j-i\frac{k}{\eta}g_j+iU(r)g_j=0\end{aligned}\right\} \tag{206.1a}$$

其中 $U(r)=V(r)/\hbar c$. 容易看出,对于比 $1/r$ 下降更快的势 $U(r)$,渐近解可以写成

$$g_j(r)\to\frac{i\eta}{r}\sin\sigma_j,\quad f_j(r)\to\frac{1}{r}\cos\sigma_j, \tag{206.2a}$$

式中

$$\sigma_j = kr - \left(j+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2} + \alpha_j. \tag{206.3a}$$

这两个函数的相角相差 $\pi/2$, 并且它们的振幅(在任意归一化下)之比使得在非相对论极限下 $(\eta\to 0)$ f_j 是大的波函数而 g_j 是小的波函数. 如果选择 f_j 是实的, 则 g_j 就是纯虚的. 在边界条件 $g_j(0)=0$, $f_j(0)=0$ 下, 解出微分方程组 (206.1a), 就可定出相角 α_j. 在经典近似下, $j=l+\frac{1}{2}$, 于是在大 r 处, 得到

$$f_j(r)\to \frac{1}{r}\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \alpha_{l+\frac{1}{2}}\right); \quad g_j(r)\to 0.$$

第二组:

$$\left.\begin{aligned} g_j' + \frac{j+\frac{3}{2}}{r}g_j - i\frac{k}{\eta}f_j + iU(r)f_j = 0, \\ f_j' - \frac{j-\frac{1}{2}}{r}f_j - ik\eta g_j + iU(r)g_j = 0 \end{aligned}\right\} \tag{206.1b}$$

它的渐近解是

$$g_j \to \frac{i}{\eta r}\sin\tau_j; \quad f_j \to \frac{1}{r}\cos\tau_j, \tag{206.2b}$$

其中

$$\tau_j = kr - \left(j+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2} + \beta j, \tag{206.3b}$$

相位常数 β_j 与情况 I 的 α_j 不同. 由于(206.1b)与(206.1a)的差别是将 η 换成 $\frac{1}{\eta}$, 所以在经典极限下, g_j 变成大波函数, f_j 变成小波函数. 由此可见, 在这种近似下, $j=l-\frac{1}{2}$:

$$g_j(r)\to \frac{1}{r}\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \beta_{l-\frac{1}{2}}\right); \quad f_j(r)\to 0.$$

在问题 201 中, 我们还看到, 对于每一个属于自旋在正 z 方向的 j 值, 存在两个解 ψ_j^I 和 ψ_j^{II}. 它们由前面的两组解构成, 其渐近行为是

$$\psi_j^{\mathrm{I}} \to \frac{1}{kr}\begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{j+\frac{1}{2}}{2j}}\cos\sigma_j Y_{j-\frac{1}{2},0} \\ -\sqrt{\dfrac{j-\frac{1}{2}}{2j}}\cos\sigma_j Y_{j-\frac{1}{2},1} \\ i\eta\sqrt{\dfrac{j+\frac{1}{2}}{2(j+1)}}\sin\sigma_j Y_{j+\frac{1}{2},0} \\ i\eta\sqrt{\dfrac{j+\frac{3}{2}}{2(j+1)}}\sin\sigma_j Y_{j+\frac{1}{2},1} \end{pmatrix} \tag{206.4}$$

$$\psi_j^{\mathrm{II}} \to \frac{1}{kr}\begin{pmatrix} \dfrac{i}{\eta}\sqrt{\dfrac{j+\frac{1}{2}}{2(j+1)}}\sin\tau_j Y_{j+\frac{1}{2},0} \\ \dfrac{i}{\eta}\sqrt{\dfrac{j+\frac{3}{2}}{2(j+1)}}\sin\tau_j Y_{j+\frac{1}{2},1} \\ \sqrt{\dfrac{j+\frac{1}{2}}{2j}}\cos\tau_j Y_{j-\frac{1}{2},0} \\ -\sqrt{\dfrac{j-\frac{1}{2}}{2j}}\cos\tau_j Y_{j-\frac{1}{2},1} \end{pmatrix}$$

最一般的解是

$$\psi=\sum_j(A_j\psi_j^{\mathrm{I}}+B_j\psi_j^{\mathrm{II}}). \tag{206.5}$$

将(206.4)代入(206.5),并将含有 $Y_{j-\frac{1}{2}}$ 项的求和指标 j 换成 $l+\frac{1}{2}$,而将含有 $Y_{j+\frac{1}{2}}$ 项的求和指标 j 换成 $l-\frac{1}{2}$,这样一来,(206.5)就可以写成对于 l 阶球谐函数的求和:

$$\psi \sim \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

$$\begin{pmatrix} \left[\sqrt{l+1}\,A_{l+\frac{1}{2}}\cos\sigma_{l+\frac{1}{2}} + \frac{i}{\eta}\sqrt{l}\,B_{l-\frac{1}{2}}\sin\tau_{l-\frac{1}{2}}\right]Y_{l,0} \\ \left[-\sqrt{l}\,A_{l+\frac{1}{2}}\cos\sigma_{l+\frac{1}{2}} + \frac{i}{\eta}\sqrt{l+1}\,B_{l-\frac{1}{2}}\sin\tau_{l-\frac{1}{2}}\right]Y_{l,1} \\ \left[i\eta\sqrt{l}\,A_{l-\frac{1}{2}}\sin\sigma_{l-\frac{1}{2}} + \sqrt{l+1}\,B_{l-\frac{1}{2}}\cos\tau_{l+\frac{1}{2}}\right]Y_{l,0} \\ \left[i\eta\sqrt{l+1}\,A_{l-\frac{1}{2}}\sin\sigma_{l-\frac{1}{2}} - \sqrt{l}\,B_{l+\frac{1}{2}}\cos\tau_{l+\frac{1}{2}}\right]Y_{l,1} \end{pmatrix}. \tag{206.6}$$

上式与平面波展开式 (205.11, 12) 的结构相同，如果对于所有的 j, α_j 和 β_j 都等于零，则(206.6)式就与 (205.11) 的渐近表示式完全相同. 我们将平面波写成

$$\psi^0 = \sum_j (A_j^0\psi_j^{0\mathrm{I}} + B_j^0\psi_j^{0\mathrm{II}}) \tag{206.7}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} &A^0_{l+\frac{1}{2}} = \sqrt{4\pi}\,Ci^l\sqrt{l+1}; \qquad B^0_{l+\frac{1}{2}} = \eta\,A^0_{l+\frac{1}{2}}; \\ &\sigma^0_{l-\frac{1}{2}} = \tau^0_{l-\frac{1}{2}} = kr - l\frac{\pi}{2}. \end{aligned}\right\} \tag{206.8}$$

这样，散射问题的边界条件得以满足的充要条件是在 $r\to\infty$ 时波函数与平面波的差

$$\psi_s = \psi - \psi^0 \tag{206.9}$$

不包含形如 e^{-ikr}/kr 的入射球面波，只包含 e^{ikr}/kr 的出射球面波，因而可以将后者看作是散射波. 按(206.6)式，上述条件给出四个系数关系式：

$$\begin{aligned} &\sqrt{l+1}\,A_{l+\frac{1}{2}}e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\alpha_{l+\frac{1}{2}}\right)} + \frac{1}{\eta}\sqrt{l}\,B_{l-\frac{1}{2}}e^{-i\beta_{l+\frac{1}{2}}} \\ &\quad = \sqrt{l+1}\,A^0_{l+\frac{1}{2}}e^{i\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{\eta}\sqrt{l}\,B^0_{l-\frac{1}{2}}, \\ &-\sqrt{l}\,A_{l+\frac{1}{2}}e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\alpha_{l+\frac{1}{2}}\right)} + \frac{1}{\eta}\sqrt{l+1}\,B_{l-\frac{1}{2}}e^{-i\beta_{l+\frac{1}{2}}} \\ &\quad = -\sqrt{l}\,A^0_{l+\frac{1}{2}}e^{i\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{\eta}\sqrt{l+1}\,B^0_{l-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

$$-\eta\sqrt{l}\,A_{l-\frac{1}{2}}\,e^{-i\alpha_{l-\frac{1}{2}}}+\sqrt{l+1}\,B_{l+\frac{1}{2}}\,e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\beta_{l+\frac{1}{2}}\right)}$$

$$=-\eta\sqrt{l}\,A^0_{l-\frac{1}{2}}+\sqrt{l+1}\,B^0_{l+\frac{1}{2}}\,e^{i\frac{\pi}{2}},$$

$$-\eta\sqrt{l+1}\,A_{l-\frac{1}{2}}\,e^{-i\alpha_{l+\frac{1}{2}}}-\sqrt{l}\,B_{l+\frac{1}{2}}\,e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\beta_{l+\frac{1}{2}}\right)}$$

$$=-\eta\sqrt{l+1}\,A^0_{l-\frac{1}{2}}-\sqrt{l}\,B^0_{l+\frac{1}{2}}\,e^{i\frac{\pi}{2}}. \tag{206.10}$$

这些方程得以满足的充要条件是

$$A_j=A^0_j e^{i\alpha_j};\quad B_j=B^0_j e^{i\beta_j}. \tag{206.11}$$

直接的计算可以证明散射波的渐近行为是

$$\psi_s\to\sqrt{4\pi}\,C\,\frac{e^{ikr}}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}{}'\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

$$\times\begin{pmatrix}[(l+1)(e^{2i\alpha_{l+\frac{1}{2}}}-1)+l(e^{2i\beta_{l-\frac{1}{2}}}-1)]Y_{l,0}\\ \sqrt{l(l+1)}\,(e^{2i\beta_{l-\frac{1}{2}}}-e^{2i\alpha_{l-\frac{1}{2}}})Y_{l,1}\\ \eta[l(e^{2i\alpha_{l-\frac{1}{2}}}-1)+(l+1)(e^{2i\beta_{l+\frac{1}{2}}}-1)]Y_{l,0}\\ \eta\sqrt{l(l+1)}\,(e^{2i\alpha_{l+\frac{1}{2}}}-e^{2i\beta_{l+\frac{1}{2}}})Y_{l,1}\end{pmatrix} \tag{206.12}$$

问题 207　连续势阶

一个螺旋性 $h=+1$ 的平面波从负 z 方向垂直射到如下的势阶上：

$$V(z)=\frac{1}{2}V_0\left(1+\tanh\frac{z}{l}\right) \tag{207.1}$$

这个势从 $z=-\infty$ 的 $V=0$ 增加到 $z=+\infty$ 的 $V=+V_0$，在 $z=0$ 附近，有一个厚度大约为 l 的过渡层。试研究下面三种不同高度的势阶的透射系数.

$$\left.\begin{aligned}&\text{情况 a:}\quad V_0<E-mc^2,\\ &\text{情况 b:}\quad E-mc^2<V_0<E+mc^2,\\ &\text{情况 c:}\quad E+mc^2<V_0.\end{aligned}\right\} \tag{207.2}$$

图 72 中示出这三种情况.

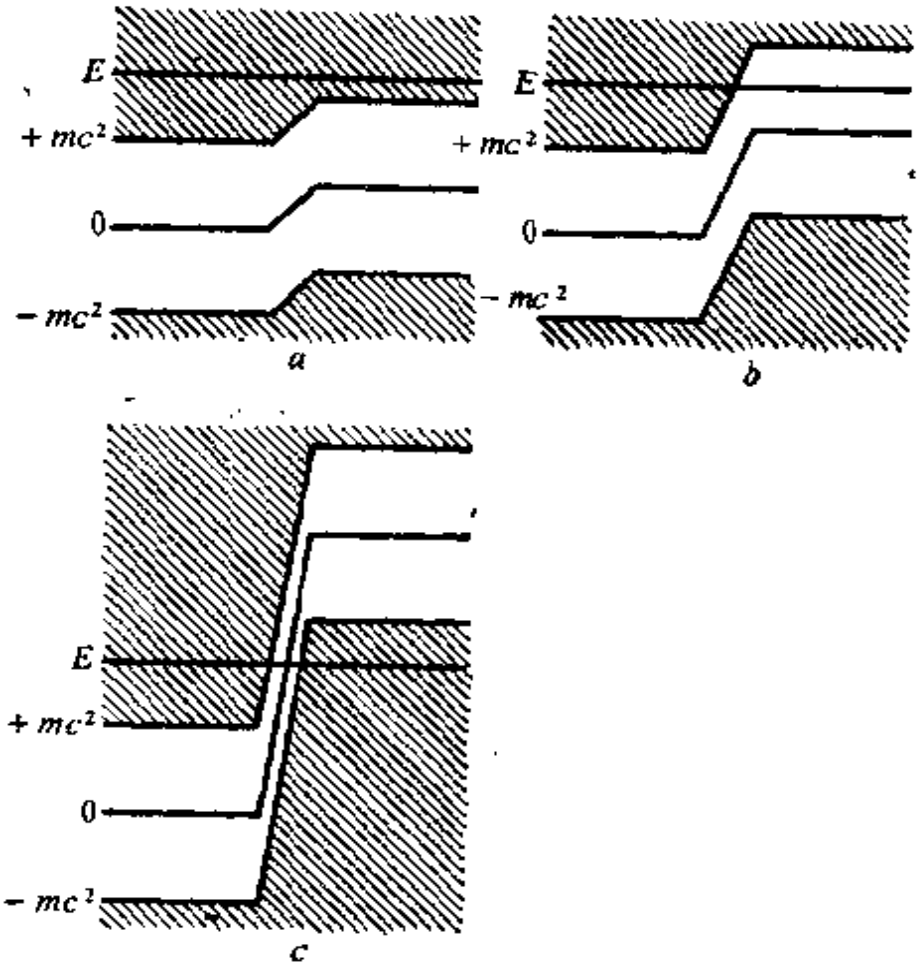


图 72a—c

图 72a—c 三种不同高度的势阶. 画阴影线的区域表示粒子能够运动的能量范围

解 这是问题 197 的特殊情形. 对于螺旋性 $h=+1$, 分量 u_2 和 $u_4=0$, 于是只剩下两个微分方程:

$$\begin{aligned} -i\frac{du_3}{dz}+(\varkappa+Q)u_1&=0,\\ i\frac{du_1}{dz}+(\varkappa-Q)u_3&=0 \end{aligned} \tag{207.3}$$

其中

$$Q=\frac{V(z)-E}{\hbar c};\qquad \varkappa=\frac{mc^2}{\hbar c}. \tag{207.4}$$

引入如下的对称和反对称组合

$$\varphi_s = u_1 + u_3; \quad \varphi_a = u_1 - u_3, \tag{207.5}$$

可以将(207.3)式化为

$$-\varkappa\varphi_s = i\varphi_a' + Q\varphi_a; \quad \varkappa\varphi_a = i\varphi_s' - Q\varphi_s \tag{207.6}$$

这样比原来的(207.3)式更容易消去其中一个函数. 消去 φ_a 后, 得到

$$\varphi_s'' + [Q^2 - \varkappa^2 + iQ']\varphi_s = 0. \tag{207.7}$$

我们必须在满足边界条件的情况下求解这个微分方程, 然后由(207.6)的第二个方程求出 φ_a, 才能得到问题的完整解答.

如果我们采用变量

$$x = (1 + e^{2z/l})^{-1} \tag{207.8}$$

代替 z, 就可以将微分方程(207.7)的系数化为有理函数. 这时

$$\frac{du}{dz} = -\frac{2}{l}x(1-x)\frac{du}{dx}; \quad V(z) = V_0(1-x). \tag{207.9}$$

进一步引入能量单位 $2\hbar c/l$ 以及无量纲缩写

$$\varepsilon = \frac{El}{2\hbar c}; \quad \varepsilon_0 = \frac{lmc^2}{2\hbar c}; \quad v_0 = \frac{lV_0}{2\hbar c}. \tag{207.10}$$

于是方程(207.7)变换为

$$x(1-x)\frac{d}{dx}\left[x(1-x)\frac{d\varphi_s}{dx}\right] + \{[v_0(1-x) - \varepsilon]^2 - \varepsilon_0^2 + iv_0x(1-x)\}\varphi_s = 0. \tag{207.11}$$

如果令

$$\varphi_s = x^\nu(1-x)^\mu f(x), \tag{207.12}$$

其中

$$\nu^2 = \varepsilon_0^2 - (\varepsilon - v_0)^2; \quad \mu^2 = \varepsilon_0^2 - \varepsilon^2, \tag{207.13}$$

将(207.12)代入(207.11), 则 f 满足超几何微分方程

$$x(1-x)f'' + [(2\nu+1) - (2\nu+2\mu+2)x]f' - (\mu+\nu-iv_0)(\mu+\nu-iv_0+1)f = 0. \tag{207.14}$$

正如下面就要看到的, 我们只需要在 $x=0$ 处为正则的解

$$f(x)={}_2F_1(\mu+\nu-iv_0,\ \mu+\nu+iv_0+1,\ 2\nu+1;\ x).$$

(207.15)

为了看出这一点，下面来研究边界条件．按(207.8)，当$z=-\infty$时，$x=1$，而$z=+\infty$时，$x=0$．而且按(207.10)和(207.13)，有

$$\mu=-i\frac{l}{2}k;\quad k^2=\frac{E^2-(mc^2)^2}{(\hbar c)^2}=\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2;$$

(207.16)

因此对于$V=0$，即在左面无限远处，μ始终是一个与粒子动量$p=\hbar k$成正比的虚参量．在$x=1$附近，将超几何级数(207.15)代入(207.12)，利用变换规则

$$\begin{aligned}{}_2F_1(a,\ b,\ c;x)=&\frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}{}_2F_1(a,b,a+b-c+1;1-x)\\&+(1-x)^{c-a-b}\frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\\&\times{}_2F_1(c-a,\ c-b,\ c-a-b+1;1-x),\end{aligned}$$

则得$z\to-\infty$，$x\simeq1$时φ_s的表示式：

$$\varphi_s\to(1-x)^{\mu}\left\{\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu+iv_0+1)\Gamma(\nu-\mu-iv_0)}+(1-x)^{-2\mu}\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu+\mu-iv_0)\Gamma(\nu+\mu+iv_0+1)}\right\}.$$

考虑到

$$1-x=\frac{2^{2z/l}}{1+e^{2z/l}}\to e^{2z/l}$$

以及(207.16)，φ_s又可以化为

$$\varphi_s\to Ae^{ikz}+Be^{-ikz};\qquad(207.17)$$

$$\begin{aligned}A&=\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu+\mu-iv_0)\Gamma(\nu+\mu+iv_0+1)};\\B&=\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu-iv_0)\Gamma(\nu-\mu+iv_0+1)}.\end{aligned}\qquad(207.18)$$

上式中A和B的差别只是μ的符号相反．因此在大的负z处，φ_s是由一个振幅为A的入射波和一个与物理问题相适应的，振幅为

B 的反射波组成的. 由此可见, 特解 (207.15) 满足在大的负 z 值处的边界条件. 如果将渐近函数(207.17)代入 (207.6) 的第二式中, 同样可以将 φ_a 分解为两个波:

$$\varphi_a \to A\left(\frac{E}{mc^2}-\frac{k}{\varkappa}\right)e^{ikz}+B\left(\frac{E}{mc^2}+\frac{k}{\varkappa}\right)e^{-ikz}. \tag{207.19}$$

于是, 除干涉项外, 电流密度[参见问题 198, (198.13)式]

$$j_z=ec(u_1^*u_3+u_3^*u_1)=\frac{1}{2}ec\,(|\varphi_3|^2-|\varphi_a|^2). \tag{207.20}$$

可写成

$$j_z=j_{入}-j_{反} \tag{207.21}$$

其中入射流是

$$j_{入}=\frac{1}{2}ec|A|^2\left\{1-\left(\frac{E}{mc^2}-\frac{k}{\varkappa}\right)^2\right\}=ec|A|^2\frac{pc(E-pc)}{(mc^2)^2} \tag{207.22}$$

反射流是

$$j_{反}=\frac{1}{2}ec|B|^2\left\{1-\left(\frac{E}{mc^2}+\frac{k}{\varkappa}\right)^2\right\}=ec|B|^2\frac{pc(E+pc)}{(mc^2)^2}. \tag{207.23}$$

在求最后两个等式时, 利用了能量动量关系式

$$E=\sqrt{(pc)^2+(mc^2)^2}.$$

现在来讨论波函数在势阶右面 $x=0$ 附近或 $z\to+\infty$ 时的渐近行为. 由(207.12)和(207.15)直接得到

$$\varphi_3\to x^\nu=e^{-\frac{2}{l}\nu z}, \tag{207.24}$$

按(207.10)和(207.13), 上式中的 ν 可写成

$$\nu=-i\frac{l}{2}k';\qquad k'^2=\frac{(E-V_0)^2-(mc^2)^2}{(\hbar c)^2}. \tag{207.25}$$

在此必须按(207.2)区分三种情况. 如果 $E-V_0>mc^2$ 或 $V_0-E>mc^2$ (情况 a 或 c), 则 $k'^2>0$, 且 k' 是实数; 另一方面, 如果 $|E-V_0|<mc^2$ (情况 b), 则 ν 是实数而 k' 是虚数. 在情况 b 中,

当 $\nu>0$ 时，方程(207.24)描述入射波的全反射，因此反射系数

$$R=j_{反}/j_{入}=\left|\frac{B}{A}\right|^2\frac{E+pc}{E-pc} \tag{207.26}$$

应等于1.

要证明这一点并不难，由(207.18)式，利用恒等式 $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$，则得

$$\frac{B}{A}=\frac{\nu+\mu+iv_0}{\nu-\mu+iv_0}\cdot\frac{\Gamma(\nu+\mu-iv_0)\Gamma(\nu+\mu+iv_0)}{\Gamma(\nu-\mu+iv_0)\Gamma(\nu-\mu-iv_0)}\times\frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(2\mu)}. \tag{207.27}$$

由于

$$\mu=-i\sigma$$

总是虚数，(207.27)中的 $\Gamma(-2\mu)$ 与 $\Gamma(2\mu)$ 之比对 $\left|\frac{B}{A}\right|^2$ 没有贡献. 如果 ν 是实数(情况 b)，则 $\Gamma(\nu+\mu-iv_0)$ 与 $\Gamma(\nu-\mu+iv_0)$ 互为复共轭，而 $\Gamma(\nu+\mu+iv_0)$ 与 $\Gamma(\nu-\mu-iv_0)$ 互为复共轭，因此它们的比也没有贡献. 这样一来，只剩下

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{\nu^2+(v_0-\sigma)^2}{\nu^2+(v_0+\sigma)^2}=\frac{2v_0(\varepsilon-\sigma)}{2v_0(\varepsilon+\sigma)}=\frac{E-pc}{E+pc},$$

代入(207.26)式，的确给出 $R=1$.

另一方面，对于情况 a 和 c，ν 是虚数，于是在右边无限远处存在一个行波

$$\varphi_3=e^{ik'z},$$

按照(207.6)，

$$\varphi_3=\left(-\frac{k'}{\varkappa}+\frac{E-V_0}{mc^2}\right)e^{ik'z}=\frac{E'-p'c}{mc^2}e^{ik'z},$$

其中 $p'=\hbar k'$ 是粒子在 $z\to+\infty$ 处的动量，并且 $E'=E-V_0$. 按(207.20)，透射电流是

$$j_{透}=\frac{1}{2}ec\left\{1-\left(\frac{E'-p'c}{mc^2}\right)^2\right\}=ec\,\frac{p'c(E'-p'c)}{(mc^2)^2}. \tag{207.28}$$

考虑到(207.22)，则得透射系数

$$T=j_{透}/j_{入}=\frac{1}{|A|^2}\frac{p'c(E'-p'c)}{pc(E-pc)}. \qquad (207.29)$$

为了由(207.18)计算出 $|A|^2$，除利用 $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$ 外，还要利用普遍公式

$$|\Gamma(\pm iy)|^2=\frac{\pi}{y\sinh\pi y} \quad (y\text{ 是实数});$$

由于

$$\mu=-i\sigma,\ \nu=-i\sigma',$$

于是得到

$$1/|A|^2=\frac{\sigma}{\sigma'}\cdot\frac{\sigma+\sigma'-v_0}{\sigma+\sigma'+v_0}$$
$$\times\frac{\sinh 2\pi\sigma\sinh 2\pi\sigma'}{\sinh\pi(\sigma+\sigma'+v_0)\sinh\pi(\sigma+\sigma'-v_0)}. \qquad (207.30)$$

将(207.30)代入(207.29)，出现一个因子

$$\frac{p'c(E'-p'c)}{pc(E-pc)}\cdot\frac{\sigma}{\sigma'}\cdot\frac{\sigma+\sigma'-v_0}{\sigma+\sigma'+v_0}$$
$$=\frac{(E'-p'c)(pc+p'c-V_0)}{(E-pc)(pc+p'c+V_0)}.$$

容易证明这个因子等于1：如果用 $E-E'$ 代替 V_0，上式可以写成

$$\frac{(E'-p'c)(E'+p'c)-(E'-p'c)(E-pc)}{(E-pc)(E+pc)-(E-pc)(E'-p'c)}=1$$

因为上式分子和分母中的第一项中 $E'^2-(p'c)^2=(mc^2)^2=E^2-(pc)^2$. 因此，最后得到透射系数

$$T=\frac{\sinh 2\pi\sigma\sinh 2\pi\sigma'}{\sinh\pi(\sigma+\sigma'+v_0)\sinh\pi(\sigma+\sigma'-v_0)}. \qquad (207.31)$$

上式中的分母可以适当改写一下，使特征量 v_0（它正比于势阶的宽度和高度的乘积，而与粒子的能量无关）与标志动量的 σ 和 σ' 分开来：

$$T=\frac{\sinh 2\pi\sigma\sinh 2\pi\sigma'}{\sinh^2\pi(\sigma+\sigma')\cosh^2\pi v_0-\cosh^2\pi(\sigma+\sigma')\sinh^2\pi v_0}.$$

(207.32)

在(207.2)的情况 a 中，仍有 $\sigma+\sigma'-v_0>0$ 或 $V_0<(p+p')c$. 这是正常的情况，在非相对论理论中也出现. 但是在情况 c 中，$\sigma+\sigma'-v_0<0$，因而 $T<0$. 于是，对于大的正 z 值，波穿入负能量的区域(参见图 72)，也就是电流为负，动量为正的区域. 如果 $\pi v_0 \gg 1$ 或

$$V_0 \gg \frac{2\pi\hbar c}{l},$$

则表达式(207.32)变为

$$T=-4\sinh\frac{\pi lp}{\hbar}\sinh\frac{\pi lp'}{\hbar}e^{-\frac{\pi lV_0}{\hbar c}},$$

即随着"势阶大小" $V_0 l$ 的增大，从正能量区域通过势阶穿入负能量区域的几率迅速减小. 在情况 c 中，由于 $V_0>mc^2$，T 中的指数因子小于

$$e^{-\frac{\pi lmc}{\hbar}}=e^{-\pi l/\lambda},$$

其中 $\lambda=\hbar/mc$ 是入射粒子的康普顿波长.

文献. Klein, O. Z. f. Physik **53**, 157(1929) Sauter, F. Z. f. Physik **69**, 742; **73**, 547(1931)

问题 208 在势跃变处平面波的斜入射

一具有任意极化的平面狄拉克波斜向入射到一个势的跃变面上，跃变面两边的势差小于粒子的动能. 试导出反射和折射定律，并计算透射波的极化状态.

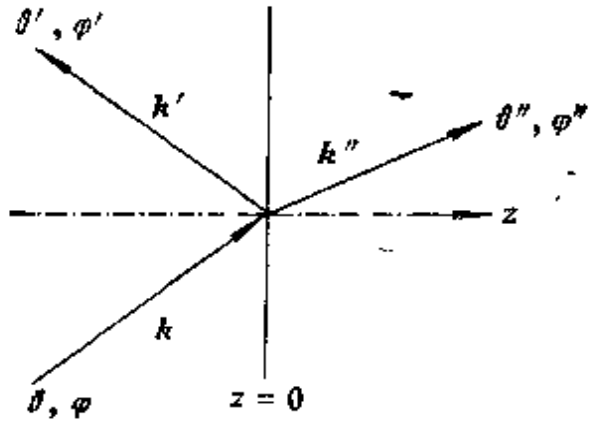


图 73 在势跃变处的三个波矢

解 设入射波 ψ 用极角为 ϑ,φ 的波矢 $\boldsymbol{k}$ 描述，反射波用极角为 ϑ', φ' 的 $\boldsymbol{k}'$ 描述，透射波用极角为 ϑ'', φ''

的 k'' 描述. 进一步设 $z=0$ 是反射面，则 ψ 和 ψ' 定义在 $z<0$ 的区域，而 ψ'' 则定义在 $z>0$ 的区域(见图 73).

在 $z=0$ 的面上，对于所有的 x, y 值，关系式：

$$\psi+\psi'=\psi'' \tag{208.1}$$

必须成立. 由此可见，三个波矢有相同的 x 分量和 y 分量：

$$\begin{aligned} k\sin\vartheta\cos\varphi &= k'\sin\vartheta'\cos\varphi' \\ &= k''\sin\vartheta''\cos\varphi''; \\ k\sin\vartheta\sin\varphi &= k'\sin\vartheta'\sin\varphi' \\ &= k''\sin\vartheta''\sin\varphi''. \end{aligned}$$

如果

$$\varphi=\varphi'=\varphi'', \tag{208.2}$$

$$\vartheta'=\pi-\vartheta, \tag{208.3}$$

$$k\sin\vartheta=k''\sin\vartheta'', \tag{208.4}$$

则上面的关系式成立. (208.2)式表示三个 $\boldsymbol{k}$ 矢量处在同一个子午平面内，可以选取这个平面为 xz 平面. 于是 $\varphi=0$, $\varphi'=0$, $\varphi''=0$, 因此三个波矢的 y 分量都等于零. (208.3)式是反射定律，(208.4)式是折射定律，折射率是 $n=k''/k$. 这两个定律和适用于非相对论薛定谔波的反射和折射定律(问题 45)几乎完全相同.

关于极化有附加的知识. 利用 $\varphi=0$ 和 $\vartheta'=\pi-\vartheta$, 可以将三个波函数在标准表示中写成

$$\psi=\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\sqrt{V(1+\eta^2)}}\begin{pmatrix} A\cos\dfrac{\vartheta}{2}+B\sin\dfrac{\vartheta}{2} \\ A\sin\dfrac{\vartheta}{2}-B\cos\dfrac{\vartheta}{2} \\ \eta\left(A\cos\dfrac{\vartheta}{2}-B\sin\dfrac{\vartheta}{2}\right) \\ \eta\left(A\sin\dfrac{\vartheta}{2}+B\cos\dfrac{\vartheta}{2}\right) \end{pmatrix};$$

$$\psi'=\frac{e^{ik\cdot r}}{\sqrt{V(1+\eta^2)}}\begin{pmatrix} C\sin\frac{\vartheta}{2}+D\cos\frac{\vartheta}{2} \\ C\cos\frac{\vartheta}{2}-D\sin\frac{\vartheta}{2} \\ \eta\left(C\sin\frac{\vartheta}{2}-D\cos\frac{\vartheta}{2}\right) \\ \eta\left(C\cos\frac{\vartheta}{2}+D\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\end{pmatrix};$$

$$\psi''=\frac{e^{ik''\cdot r}}{\sqrt{V(1+\eta''^2)}}\begin{pmatrix} E\cos\frac{\vartheta''}{2}+F\sin\frac{\vartheta''}{2} \\ E\sin\frac{\vartheta''}{2}-F\cos\frac{\vartheta''}{2} \\ \eta''\left(E\cos\frac{\vartheta''}{2}-F\sin\frac{\vartheta''}{2}\right) \\ \eta''\left(E\sin\frac{\vartheta''}{2}+F\cos\frac{\vartheta''}{2}\right)\end{pmatrix}. \tag{208.5}$$

上式中分别与常数 A, C 和 E 成正比的旋量的第一部分，属于螺旋性等于 $+1$ 的波，而与 B, D 和 F 成正比的部分，属于螺旋性等于 -1 的波。

将(208.5)代入边界条件(208.1)，得到下面四个关系式：

$$\begin{aligned} A+pB+pC+D&=r(E+qF),\\ pA-B+C-pD&=r(qE-F),\\ A-pB+pC-D&=r\lambda(E-qF),\\ pA+B+C+pD&=r\lambda(qE+F). \end{aligned} \tag{208.6}$$

上式中的缩写为

$$p=\tan\frac{\vartheta}{2};\quad q=\tan\frac{\vartheta''}{2};\quad r=\sqrt{\frac{1+\eta^2}{1+\eta''^2}}\,\frac{\cos\frac{\vartheta''}{2}}{\cos\frac{\vartheta}{2}};$$

$$\lambda=\frac{\eta''}{\eta}. \tag{208.7}$$

由(208.6)式，重新组合后得到

$$\begin{aligned} A+pC&=\frac{1}{2}r[(1+\lambda)E+(1-\lambda)qF],\\ pA+C&=\frac{1}{2}r[(1+\lambda)qE-(1-\lambda)F] \end{aligned} \tag{208.8a}$$

和

$$\begin{aligned} B+pD&=\frac{1}{2}r[-(1-\lambda)qE+(1+\lambda)F],\\ pB+D&=\frac{1}{2}r[(1-\lambda)E+(1+\lambda)qF] \end{aligned} \tag{208.8b}$$

由第一对方程消去 C，并由第二对方程消去 D，得到下列关系式：

$$\begin{aligned} (1-p^2)A&=\frac{1}{2}r[(1+\lambda)(1-pq)E+(1-\lambda)(p+q)F];\\ (1-p^2)B&=\frac{1}{2}r[-(1-\lambda)(p+q)E+(1+\lambda)(1-pq)F]. \end{aligned} \tag{208.9}$$

上式表达了透射波的振幅系数 E、F 和入射波的振幅系数 A、B 之间的联系.

入射波螺旋性(或简称极化)的期待值定义为

$$h=\frac{A^2-B^2}{A^2+B^2}=\frac{1-(B/A)^2}{1+(B/A)^2} \tag{208.10}$$

而透射波极化的期待值定义为

$$h''=\frac{E^2-F^2}{E^2+F^2}=\frac{1-(F/E)^2}{1+(F/E)^2}. \tag{208.11}$$

从(208.9)式，可得

$$B/A=\frac{-(1-\lambda)(p+q)+(1+\lambda)(1-pq)(F/E)}{(1+\lambda)(1-pq)+(1-\lambda)(p+q)(F/E)}. \tag{208.12}$$

利用缩写

$$u=\frac{1-\lambda}{1+\lambda}\cdot\frac{p+q}{1-pq}=\frac{\eta-\eta''}{\eta+\eta''}\tan\frac{\vartheta+\vartheta''}{2}, \tag{208.13}$$

可将(208.12)式简化为

$$B/A=\frac{(F/E)-u}{1+u(F/E)}. \tag{208.14}$$

按照(208.10)和(208.11)式，将上式中的 B/A 换成 h，F/E 换成 h''，化简后得到：

$$h''=\frac{1-u^2}{1+u^2}h-\frac{2u}{1+u^2}\sqrt{1-h^2}. \tag{208.15}$$

如果入射波在正 $\boldsymbol{k}$ 或负 $\boldsymbol{k}$ 方向上是完全极化的（$h=+1$ 或 -1），则得

$$h''=\pm\frac{1-u^2}{1+u^2},$$

即在势跃变处将发生部分退极化．不过它只与参量 u 的平方有关．另一方面，一个完全非极化入射束（$h=0$）给出

$$h''=-\frac{2u}{1+u^2},$$

即势跃变至少引起部分极化．后一种效应是 u 的一次方的数量级．由于在合理的装置中 u 通常比较小（大约是 0.1），所以研究非极化束的部分极化，比研究具有确定螺旋性的极化束的部分退极化，有更大的意义．此外，必须指出，垂直入射时 $u=0$，所以掠入射有利于这种效应．

问题 209　在势跃变处的反射强度

试计算上题中研究过的混合螺旋性平面波的反射系数．并导出在界面上电流的连续性定律．

解　电流密度

$$j_l=iec\psi^\dagger\gamma_4\gamma_l\psi=ec\psi^\dagger\alpha_l\psi$$

可以用标准表示中的旋量分量 ψ_μ 表示如下：

$$j_x=ec(\psi_1^*\psi_4+\psi_2^*\psi_3+\psi_3^*\psi_2+\psi_4^*\psi_1)$$

$$j_y=ec(-\psi_1^*\psi_4+\psi_2^*\psi_3-\psi_3^*\psi_2+\psi_4^*\psi_1)$$

$$j_z=ec(\psi_1^*\psi_3-\psi_2^*\psi_4+\psi_3^*\psi_1-\psi_4^*\psi_2),$$

由于在一个平面波中，ψ_μ^*和ψ_ν的指数因子相互消去，所以当我们选择$\varphi=0$，并利用(208.5)式的狄拉克波函数时，剩下的旋量振幅全是实的．确实，这导致上面的$j_y=0$．入射波的其余两个分量变成：

$$j_x=\frac{2ec}{V(1+\eta^2)}\left\{\left(A\cos\frac{\vartheta}{2}+B\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\eta\left(A\sin\frac{\vartheta}{2}+B\cos\frac{\vartheta}{2}\right)\right.$$
$$\left.+\left(A\sin\frac{\vartheta}{2}-B\cos\frac{\vartheta}{2}\right)\eta\left(A\cos\frac{\vartheta}{2}-B\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\right\};$$
$$j_z=\frac{2ec}{V(1+\eta^2)}\left\{\left(A\cos\frac{\vartheta}{2}+B\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\eta\left(A\cos\frac{\vartheta}{2}-B\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\right.$$
$$\left.-\left(A\sin\frac{\vartheta}{2}-B\cos\frac{\vartheta}{2}\right)\eta\left(A\sin\frac{\vartheta}{2}+B\cos\frac{\vartheta}{2}\right)\right\}.$$

它们可以简化为

$$j_x=\frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)}(A^2+B^2)\sin\vartheta;$$
$$j_z=\frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)}(A^2+B^2)\cos\vartheta. \tag{209.1}$$

用类似的步骤可得反射波的两个分量①：

$$j'_x=\frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)}(C^2+D^2)\sin\vartheta;$$
$$j'_z=-\frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)}(C^2+D^2)\cos\vartheta \tag{209.2}$$

和透射波的两个分量：

$$j''_x=\frac{2ec\eta''}{V(1+\eta''^2)}(E^2+F^2)\sin\vartheta'';$$
$$j''_z=-\frac{2ec\eta''}{V(1+\eta''^2)}(E^2+F^2)\cos\vartheta''. \tag{209.3}$$

为了求出它们之间的关系，首先要解出线性方程组(208.6)或(208.8a, b)，将振幅常数C, D, E, F用入射波的A和B表示出来．经过比较麻烦然而初等的运算，结果得到

① 对于本题，由于$\int d^3x e^{i(k-k')\cdot r}=0$，可以略去入射波与反射波的干涉项．当只讨论密度的局部关系时，这些干涉项是有意义的，参见问题23.

$$C=\frac{-\alpha A+\beta B}{\Delta};\qquad D=-\frac{\beta A+\alpha B}{\Delta};\tag{209.4}$$

$$E=\frac{\rho A+\sigma B}{2r\lambda};\qquad F=\frac{-\sigma A+\rho B}{2r\lambda}.\tag{209.5}$$

上式中的缩写为：

$$\left.\begin{aligned}
&\alpha=2(\lambda^2+1)p(1+q^2)-4\lambda q(1+p^2);\\
&\beta=(\lambda^2-1)(1-p^2)(1+q^2);\\
&\Delta=(\lambda+1)^2(1-pq)^2+(\lambda-1)^2(p+q)^2;\\
&\rho\Delta=(\lambda+1)(\Delta-\alpha p)-(\lambda-1)\beta\\
&\quad=4\lambda(\lambda+1)(1-pq)(1-p^2);\\
&\sigma\Delta=(\lambda-1)(p\Delta-\alpha)+(\lambda+1)\beta p\\
&\quad=4\lambda(\lambda-1)(p+q)(1-p^2).
\end{aligned}\right\}\tag{209.6}$$

由(209.4)和(209.5)，进一步得到

$$\left.\begin{aligned}
&\Delta^2\cdot(C^2+D^2)=(\alpha^2+\beta^2)(A^2+B^2);\\
&4r^2\lambda^2(E^2+F^2)=(\rho^2+\sigma^2)(A^2+B^2).
\end{aligned}\right\}\tag{209.7}$$

将(209.6)代入(209.7)，经过冗长的初等运算后得到

$$\Delta\cdot(\rho^2+\sigma^2)=16\lambda^2(1-p^2)^2\tag{209.8}$$

和

$$\Delta^2-(\alpha^2+\beta^2)=\Delta\cdot 4\lambda(1-p^2)(1-q^2).\tag{209.9}$$

现在不难用入射电流来表示反射电流和透射电流．对垂直于势跃变面的 z 分量，我们得到

$$j'_z=-\frac{C^2+D^2}{A^2+B^2}\,j_z=-\frac{\alpha^2+\beta^2}{\Delta^2}\,j_z\tag{209.10}$$

和

$$\begin{aligned}
j''_z&=\frac{\eta''}{1+\eta''^2}\cdot\frac{1+\eta_l^2}{\eta}\cdot\frac{\cos\vartheta''}{\cos\vartheta}\cdot\frac{E^2+F^2}{A^2+B^2}\,j_z\\
&=\frac{\eta''}{\eta}\cdot\frac{1+\eta_l^2}{1+\eta''^2}\cdot\frac{\cos\vartheta''}{\cos\vartheta}\cdot\frac{\rho^2+\sigma^2}{4r^2\lambda^2}\,j_z.
\end{aligned}$$

在最后的公式中，引用(208.7)的定义，可以得到

$$\frac{\eta''}{\eta}\cdot\frac{1+\eta_l^2}{1+\eta''^2}\cdot\frac{\cos\vartheta''}{\cos\vartheta}\cdot\frac{1}{r^2}=\lambda\frac{1-q^2}{1-p^2};$$

因此

$$j''_z=\frac{1-q^2}{1-p^2}\cdot\frac{\rho^2+\sigma^2}{4\lambda}\cdot j_z. \tag{209.11}$$

利用(209.8)和(209.9)式可以将(209.10)和(209.11)化为

$$\begin{aligned} j'_z&=-\left\{1-\frac{4\lambda(1-p^2)(1-q^2)}{\Delta}\right\}j_z,\\ j''_z&=\frac{4\lambda(1-p^2)(1-q^2)}{\Delta}\,j_z. \end{aligned} \tag{209.12}$$

上式中 Δ 的定义见(209.6)式. 由 (209.12) 式立即得到连续性方程

$$j_z+j'_z=j''_z. \tag{209.13}$$

显

$$R=1-\frac{4\lambda(1-p^2)(1-q^2)}{\Delta} \tag{209.14}$$

是反射系数. 在正入射($p=0$, $q=0$)的情况下,它简化为

$$R=\left(\frac{\lambda-1}{\lambda+1}\right)^2. \tag{209.15}$$

VII. 辐 射 理 论

问题 210　薛定谔场的量子化

试利用对于场的能量、动量和电荷的适当表示式，将自由空间薛定谔波场量子化为满足玻色或费密统计的粒子系统.

解　我们首先把自由空间的薛定谔方程当做一个经典的波方程. ψ 简单地是空间坐标和时间的标量函数. 这样，在常用的归一化下，有如下的积分表示式(参见问题 3 和 5)：

场的总能量

$$W=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\psi^*\nabla^2\psi \tag{210.1}$$

场的总动量

$$\boldsymbol{P}=\frac{\hbar}{i}\int d^3x\psi^*\nabla\psi \tag{210.2}$$

场的总电荷

$$Q=e\int d^3x\psi^*\psi. \tag{210.3}$$

这里 m 和 e 是唯象的常数，尚未被解释为粒子性质，因为，到此为止，场还不是由粒子组成的.

我们知道，薛定谔场应当满足两个共轭的波方程

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi;\quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*. \tag{210.4}$$

它们的解可以表示为在一个任意周期性的立方体（体积为 $\mathscr{V}$）内归一化的平面波；因此完全解可以写成

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathscr{V}^{-\frac{1}{2}}\sum_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{210.5}$$

将上式代入(210.4)可得色散定律

$$\hbar\omega=\frac{\hbar^2k^2}{2m}. \tag{210.6}$$

如果将(210.5)代入(210.1)、(210.2)和(210.3)，利用平面波的正交归一性关系，

$$\frac{1}{V}\int_V d^3x e^{i(k-k')r}=\delta_{kk'}$$

则得

$$W=\frac{\hbar^2}{2m}\sum_k k^2c_k^*c_k;\quad \boldsymbol{P}=\sum_k \hbar\boldsymbol{k}c_k^*c_k;\quad Q=e\sum_k c_k^*c_k. \tag{210.7}$$

现在我们来把这个经典理论量子化. 波函数ψ将用一个作用在粒子数空间的希耳伯矢量χ上的算符ψ来代替. 对于傅里叶级数(210.5)的系数c_k和c_k^*同样要换成相应的算符c_k和它的厄密共轭算符$c_k^\dagger$，这些算符必须满足如下的条件，即$c_k^\dagger c_k$的本征值是整数：

$$\begin{aligned}&\text{或者 } N_k=c_k^\dagger c_k=0,\ 1,\ 2,\ 3,\cdots && \text{在玻色统计的情况下}\\ &\text{或者 } N_k=c_k^\dagger c_k=0,\ 1 && \text{在费密统计的情况下.}\end{aligned} \tag{210.8}$$

这样做了以后，(210.7)的三个表达式也变成算符，它们的本征值是

$$W=\sum_k N_kE_k;\qquad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}; \tag{210.9a}$$

$$\boldsymbol{P}=\sum_k N_k\boldsymbol{p}_k;\qquad \boldsymbol{p}_k=\hbar\boldsymbol{k}; \tag{210.9b}$$

$$Q=e\sum_k N_k. \tag{210.9c}$$

这些表达式描述一个没有相互作用的粒子系统，N_k是处在状态$\boldsymbol{k}$的粒子数，并且每一个粒子的能量为E_k，动量为$\boldsymbol{p}_k$，电荷为e.

如果将系数c_k，c_k^*换成满足下述对易规则①②的算符c_k，$c_k^\dagger$

$$\begin{aligned}&[c_k,c_{k'}^\dagger]_-\equiv c_kc_{k'}^\dagger-c_{k'}^\dagger c_k=\delta_{kk'} && \text{玻色情况}\\ &\text{或}\qquad [c_k,c_{k'}^\dagger]_+\equiv c_kc_{k'}^\dagger+c_{k'}^\dagger c_k=\delta_{kk'}. && \text{费密情况}\end{aligned} \tag{210.10}$$

① 本章所用的对易子记号$[a,b]=ab-ba$与第一章所用的相差一个因子$i/\hbar$.

② 对于玻色情况，在问题31中已经证明，本征值(210.8)是对易规则(210.10)的必然结果. 同样的方法也可应用于费密情况.

则这样的量子化正好给出所要求的本征值(210.8). 由这些对易关系容易构成波函数的对易子:

$$[\psi_{(r,t)},\psi^{\dagger}_{(r',t)}]_{\pm}=\frac{1}{\mathscr{V}}\sum_{k}\sum_{k'}[c_k,c^{\dagger}_{k'}]_{\pm}e^{i(k\cdot r-k'\cdot r')-i(\omega-\omega')t}$$

$$=\frac{1}{\mathscr{V}}\sum_{k}e^{ik\cdot(r-r')}=\delta(r-r'). \qquad (210.11)$$

显然这个对易关系对于两种符号不同的对易子同样适用.

问题 211 散射的玻恩近似

试将量子化的薛定谔理论应用于粒子在有心力势 $V(r)$ 上的弹性散射.

解 设上题中自由空间的量子化场受到势 $V(r)$ 的扰动; 则场的哈密顿量 W 必须加上微扰能量

$$W'=\int d^3x\psi^{\dagger}V\psi. \qquad (211.1)$$

如果限于一级近似, 则上式中的 $\psi^{\dagger}$ 和 ψ 可以用(210.5)的平面波展开式代入, 这样就得到

$$W'=\frac{1}{\mathscr{V}}\sum_{k}\sum_{k'}c^{\dagger}_{k'}c_k\int d^3xV(r)e^{i(k-k')r}e^{i(\omega'-\omega)t}. \qquad (211.2)$$

(211.2) 式中的积分是熟知的玻恩近似积分 (参见问题 105). 利用缩写

$$k-k'=K \qquad (211.3)$$

我们又得到表达式(注意它的量纲是尔格·厘米^3)

$$\langle k'|V|k\rangle=\int d^3xV(r)e^{iK\cdot r}=4\pi\int_0^{\infty}dr\,r^2V(r)\frac{\sin Kr}{Kr}, \qquad (211.4)$$

而 W' 可简写为

$$W'=\frac{1}{\mathscr{V}}\sum_{k}\sum_{k'}c^{\dagger}_{k'}c_k\langle k'|V|k\rangle e^{i(\omega'-\omega)t}. \qquad (211.5)$$

现在来描述散射过程. 如果在初态中只有一个粒子处在 k_0

态，而所有其余的单粒子态都是空的，则初始的希耳伯矢量是

$$\chi_i = |0\cdots 1_{k_0}\cdots 0_{k'}\cdots\rangle, \tag{211.6a}$$

同样，如果在末态中只有一个粒子处于 $\boldsymbol{k}_f$ 态，则末态的希耳伯矢量是

$$\chi_f = |0\cdots 0_{k_0}\cdots 1_{k'}\cdots\rangle. \tag{211.6b}$$

为了确定在这两个态之间的跃迁几率，需要知道矩阵元

$$\langle\chi_f|W'|\chi_i\rangle. \tag{211.7}$$

利用普遍规则

$$c_k|0_k\rangle = 0;\ c_k|1_k\rangle = |0_k\rangle$$

得

$$c_{k'}\chi_i = \delta_{k'k_0}|0_{k_0}\rangle,$$

即当 W' 作用到 χ_i 上时，除 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0$ 的一项外，(211.5)式中对 $\boldsymbol{k}$ 求和的所有项都等于零．这里算符 c_{k_0} 正好消灭了初始粒子，因而给出了真空的态矢，$|0\rangle$．现在如果再应用 $c_k^\dagger$，则所有求和项都有贡献，即

$$W'|1_{k_0}\rangle = \frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{k'}\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}_0\rangle e^{i(\omega'-\omega_0)t}|1_{k'}\rangle.$$

由于正交性

$$\langle\chi_f|1_{k'}\rangle = \langle 1_{k_f}|1_{k'}\rangle = \delta_{k_f k'}$$

矩阵元(211.7)仍然只保留了上述求和项中的一项，即

$$\langle\chi_f|W'|\chi_i\rangle = \frac{1}{\mathcal{V}}\langle\boldsymbol{k}_f|V|\boldsymbol{k}_0\rangle e^{i(\omega'-\omega_0)t}. \tag{211.8}$$

利用黄金规则，可以由矩阵元计算微分截面

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar}\rho_f|\langle\chi_f|W'|\chi_i\rangle|^2\frac{\mathcal{V}'}{v}, \tag{211.9}$$

其中

$$\rho_f = \frac{\mathcal{V}p^2\,dp\,d\Omega}{(2\pi\hbar)^3\,dE} = \frac{m^2v\mathcal{V}'}{8\pi^3\hbar^3}\,d\Omega. \tag{211.10}$$

(211.10)式中的量都是指末态的．将(211.10)代入(211.9)并利用矩阵元公式(211.8)，消去(大而任意的)周期性体积 $\mathcal{V}'$，得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|\langle\boldsymbol{k}_f|V|\boldsymbol{k}_0\rangle|^2. \tag{211.11}$$

考虑到表达式(211.4)，这个结果与一级玻恩近似公式完全一致(参见问题105和184).

问题212 经典辐射场的量子化

试利用场的能量和动量的经典表达式，将真空中的经典麦克斯韦场(在立方体 $\mathcal{V}=L^3$ 内满足周期性条件)量子化为光子系统.

解 经典辐射场是用矢势 $\boldsymbol{A}$ 来描述的. $\boldsymbol{A}$ 满足微分方程

$$\Box^2\boldsymbol{A}=0 \quad 以及 \quad \operatorname{div}\boldsymbol{A}=0 \tag{212.1}$$

在常用的规范下，给出的是横波. 为了阐明这些方程的物理意义，或者利用 $\boldsymbol{A}$ 与场强的关系:

$$\mathscr{E}=-\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}};\ \mathscr{H}=\operatorname{rot}\boldsymbol{A}, \tag{212.2}$$

或者利用场的总能量表达式

$$W=\frac{1}{8\pi}\int d^3x(\mathscr{E}^2+\mathscr{H}^2)=\frac{1}{8\pi}\int d^3x\left\{\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{A}}^2+(\operatorname{rot}\boldsymbol{A})^2\right\} \tag{212.3}$$

和场的总动量表达式

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{4\pi c}\int d^3x(\mathscr{E}\times\mathscr{H})=-\frac{1}{4\pi c^2}\int d^3x(\dot{\boldsymbol{A}}\times\operatorname{rot}\boldsymbol{A}). \tag{212.4}$$

微分方程(212.1)的平面波解可以写成常用的标准形式

$$\boldsymbol{A}=\sqrt{\frac{4\pi c^2}{\mathcal{V}}}\sum_{k,\lambda}\boldsymbol{u}_{k,\lambda}(q_{k,\lambda}e^{i(k\cdot r-\omega t)}+q^*_{k,\lambda}e^{-i(k\cdot r-\omega t)}), \tag{212.5}$$

其中 $\lambda=1,2$ 表示两种横向极化态，$\boldsymbol{u}_{k\lambda}$ 是单位矢量. 有三个正交性关系

$$(\boldsymbol{u}_{k1}\cdot\boldsymbol{k})=0;\ (\boldsymbol{u}_{k2}\cdot\boldsymbol{k})=0;\ (\boldsymbol{u}_{k1}\cdot\boldsymbol{u}_{k2})=0. \tag{212.6}$$

(212.5)式求和号前面的归一化因子是任意的，而且仅是习惯的表示. 在立方体 $\mathcal{V}=L^3$ 内的周期性条件使得矢量 $\boldsymbol{k}$ 只能取如下的值:

$$\boldsymbol{k}=\frac{2\pi}{L}\,\boldsymbol{n}, \tag{212.7}$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 的分量是整数，$n_i=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$. 频率 ω 与 k 的关系表现为色散定律

$$\omega=kc. \tag{212.8}$$

由于(212.5)求和式中的每一项是由两个复共轭的部分组成的，所以 $\boldsymbol{A}$ 是 $\boldsymbol{r}$ 和 t 的实函数，这正是经典麦克斯韦理论所必需的.

将(212.5)式代入能量积分(212.3)中，则得

$$\begin{aligned}W=\frac{c^2}{2\mathscr{V}}\sum_{k\lambda}\sum_{k'\lambda'}\int d^3x\left\{-\frac{\omega\omega'}{c}\boldsymbol{u}_{k'\lambda'}\boldsymbol{u}_{k\lambda}-(\boldsymbol{k}'\times\boldsymbol{u}_{k'\lambda'})(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{u}_{k\lambda})\right\}\\ \times\left\{q_{k'\lambda}e^{i(\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}-\omega't)}-q^*_{k'\lambda}e^{-i(\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}-\omega't)}\right\}\\ \times\left\{q_{k\lambda}e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}-\omega t)}-q^*_{k\lambda}e^{-i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}-\omega t)}\right\}.\end{aligned}$$

后两个括号的乘积积分后，在 qq 和 q^*q^* 类型的项中留下 $\boldsymbol{k}'=-\boldsymbol{k}$ 的项，而在 qq^* 和 q^*q 类型的项中留下 $\boldsymbol{k}'=+\boldsymbol{k}$ 的项. 然后再利用(212.6)，第一个括号变为

$$-\frac{\omega^2}{c^2}-(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{k})=\begin{cases}0 & \text{如果 } \boldsymbol{k}'=-\boldsymbol{k},\\ -2\dfrac{\omega^2}{c^2}\delta_{\lambda\lambda'} & \text{如果 } \boldsymbol{k}'=+\boldsymbol{k}.\end{cases}$$

因此 W 化为

$$W=\sum_{k\lambda}\omega^2(q_{k\lambda}q^*_{k\lambda}+q^*_{k\lambda}q_{k\lambda}). \tag{212.9}$$

对于由(212.4)表示的动量，类似的计算给出

$$\boldsymbol{P}=\sum_{k\lambda}\omega\boldsymbol{k}(q_{k\lambda}q^*_{k\lambda}+q^*_{k\lambda}q_{k\lambda}). \tag{212.10}$$

有了这些结果，现在就可将经典辐射场量子化，方法是将振幅 $q_{k\lambda}$ 和 $q^*_{k\lambda}$ 换成算符 $q_{k\lambda}$ 和它的厄密共轭 $q^\dagger_{k\lambda}$. 如令

$$q_{k\lambda}=C_kb_{k\lambda}\quad\text{和}\quad q^\dagger_{k\lambda}=C_kb^\dagger_{k\lambda}, \tag{212.11}$$

其中 C_k 是实的归一化因子，则表达式(212.9)和(212.10)化为

$$W=\sum_{k\lambda}\omega^2C_k^2(b_{k\lambda}b^\dagger_{k\lambda}+b^\dagger_{k\lambda}b_{k\lambda})$$

和

$$\boldsymbol{P}=\sum_{k\lambda}\omega\boldsymbol{k}C_k^2(b_{k\lambda}b_{k\lambda}^{\dagger}+b_{k\lambda}^{\dagger}b_{k\lambda}). \tag{212.12}$$

如果选择 $b_{k\lambda}$ 和 $b_{k\lambda}^{\dagger}$ 满足下面的对易规则

$$b_{k\lambda}b_{k'\lambda'}^{\dagger}-b_{k'\lambda'}^{\dagger}b_{k\lambda}=\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{212.13}$$

并且所有其余的组合均相互对易，则算符 $b_{k\lambda}^{\dagger}b_{k\lambda}$ 的本征值变成包括 0 在内的整数 $N_{k\lambda}$，

$$N_{k\lambda}=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots, \tag{212.14}$$

而算符 $b_{k\lambda}b_{k\lambda}^{\dagger}$ 的本征值变成 $N_{k\lambda}+1$(参见问题 31)。如果进一步令

$$C_k=\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}, \tag{212.15}$$

则算符(212.12)化为

$$W=\sum_{k\lambda}\frac{\hbar\omega}{2}(b_{k\lambda}b_{k\lambda}^{\dagger}+b_{k\lambda}^{\dagger}b_{k\lambda})$$

和

$$\boldsymbol{P}=\sum_{k\lambda}\frac{\hbar\boldsymbol{k}}{2}(b_{k\lambda}b_{k\lambda}^{\dagger}+b_{k\lambda}^{\dagger}b_{k\lambda}). \tag{212.16}$$

它们的本征值是

$$W=\sum_{k\lambda}\hbar\omega\left(N_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right);\quad \boldsymbol{P}=\sum_{k\lambda}\hbar\boldsymbol{k}\left(N_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right). \tag{212.17}$$

这样就可以将 $N_{k\lambda}$ 解释为处于由 $\boldsymbol{k}$ 和 λ 所确定的态中的光子数，每一个光子带有 $\hbar\omega$ 的能量和在波传播方向上大小为 $\hbar k=\hbar\omega/c$ 的动量。

(212.17)的第一式中出现一项零点能，即真空的能量

$$W_0=\sum_{k\lambda}\frac{\hbar\omega}{2}. \tag{212.18}$$

虽然 W_0 是无限大，但并不引致严重的物理后果，因为可以用下面的归一化方法将 W_0 去掉：

$$W-W_0=\sum_{k\lambda}\hbar\omega N_{k\lambda}, \tag{212.19}$$

即具有物理意义的能量是实际状态与真空态的能量差。在动量表达式中，零点的贡献恒等于零，因为在求和中，大小相等、方向相反

的 k 矢量总是成对地相互抵消.

这样, 矢势 $\boldsymbol{A}$ 变成一个产生或消灭光子的算符. 将(212.11)和(212.15)代入(212.5)则得到量子理论中 $\boldsymbol{A}$ 的表达式:

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\mathcal{V}\ k}}\ \{b_{k\lambda}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}+b^{\dagger}_{k\lambda}e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\}\boldsymbol{u}_{k\lambda}. \tag{212.20}$$

问题 213　光子的发射几率

电子从有心力场 $V(r)$ 的激发态跃变到较低的能级时将放出一个光子, 如果可以忽略推迟效应, 试确定发射光子的几率.

解　在经典的麦克斯韦理论中, 物质(电子)与辐射的相互作用是

$$H'=\frac{1}{c}\int d^3x(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j}), \tag{213.1}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 是矢势, $\boldsymbol{j}$ 是物质的电流密度. 在问题 212① 中, 已经得到 $\boldsymbol{A}$ 的量子场论表达式

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\mathcal{V}\ k}}\ \boldsymbol{u}^{(\lambda)}_{\boldsymbol{k}}(b_{k\lambda}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+b^{\dagger}_{k\lambda}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}). \tag{213.2}$$

由量子化的薛定谔场

$$\psi=\sum_n c_n u_n(\boldsymbol{r});\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_n+Vu_n=E_n u_n \tag{213.3}$$

利用公式

$$\boldsymbol{j}=-\frac{e\hbar}{2mi}(\psi^{\dagger}\nabla\psi-\nabla\psi^{\dagger}\cdot\psi)\quad(\text{电子的电荷是}-e)$$

可以得到电流密度的表达式:

$$\boldsymbol{j}=-\frac{e\hbar}{2mi}\sum_n\sum_{n'}(u^*_{n'}\nabla u_n-u_n\nabla u^*_{n'})c^{\dagger}_{n'}c_n. \tag{213.4}$$

$u_n(\boldsymbol{r})$ 和 $u^*_n(\boldsymbol{r})$ 是由(213.3)式给出的单粒子波函数, 下标 n 或 n' 是

① 在(213.2)和(213.3)中, 略去(212.20)和(210.5)的时间因子, 相当于从薛定谔图象过渡到海森伯图象.

一组三个量子数的综合记号. c_n 和 $c_{n'}^{\dagger}$ 是问题 210 中所用的算符，它们可以满足如下的对易或反对易规则

$$\begin{aligned} c_n c_{n'}^{\dagger} \pm c_{n'}^{\dagger} c_n &= \delta_{nn'} \\ c_n c_{n'} \pm c_{n'} c_n &= 0 \end{aligned} \tag{213.5}$$

在光子的自发发射的过程中，电子从初态 n_i 跃迁到末态 n_f，或者用量子场论的语言来说，在初态 n_i 中消灭了一个电子，而在末态 n_f 中产生了一个电子. 与此同时，在态 $(\boldsymbol{k}, \lambda)$ 中产生了一个光子. 这样的过程是由哈密顿量中带有算符乘积

$$b_{\boldsymbol{k}\lambda}^{\dagger} c_{n_f}^{\dagger} c_{n_i}$$

的项引起的. 当我们将(213.2)和(213.4)代入(213.1)时，的确会出现这样一项. 它可以写成

$$\langle f | H' | i \rangle b_{\boldsymbol{k}\lambda}^{\dagger} c_{n_f}^{\dagger} c_{n_i}, \tag{213.6a}$$

其中

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{1}{c} \int d^3x \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k\mathcal{V}}} \frac{e\hbar}{2m} i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)} \cdot (u_{n_f}^* \nabla u_{n_i} - u_{n_i} \nabla u_{n_f}^*) \tag{213.6b}$$

是 H' 在初态和末态之间的矩阵元. 由黄金规则 (参见问题 183) 可得跃迁几率

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f |\langle f | H' | i \rangle|^2. \tag{213.7}$$

在能量标度上的末态密度 ρ_f 完全取决于光子：

$$\rho_f = \frac{k^2 \, dk \, d\Omega_k \mathcal{V}}{(2\pi)^3 \hbar c \, dk} = \frac{\mathcal{V}}{8\pi^3 \hbar c} k^2 \, d\Omega_k, \tag{213.8}$$

其中 $d\Omega_k$ 是光子发射后进入的立体角元.

现在剩下的问题是计算(213.6b)中的积分

$$I = \int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} (u_{n_f}^* \nabla u_{n_i} - u_{n_i} \nabla u_{n_f}^*).$$

如果发射的光子的波长比原子的积分范围大很多，即如果在被积函数中，可以近似取 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 1$，则推迟效应可以忽略. 积分 I 可

分成两项，第二项可以利用分部积分化为第一项，因此得出

$$I=2\int d^3x u_{n_f}^*\nabla u_{n_i}.$$

从 u_{n_i} 和 $u_{n_f}^*$ 所满足的薛定谔方程，可以导出一个恒等式[参见问题 187 的(187.6)式]，利用它可以得到

$$I=\frac{2m}{\hbar^2}(E_i-E_f)\int d^3x u_{n_f}^*\boldsymbol{r}u_{n_i};$$

由能量守恒得出

$$E_f-E_i=\hbar\omega,$$

因此(213.6b)的矩阵元变成

$$\langle f|H'|i\rangle=\frac{e}{c}\,i\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k\mathscr{V}}}\,\omega\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle \qquad (213.9)$$

其中

$$\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle=\int d^3x u_{n_f}^*(\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r})u_{n_i}. \qquad (213.10)$$

将(213.8)和(213.9)代入(213.7)，最后得到

$$P_{k\lambda}=\frac{d\Omega_k}{2\pi}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega^3}{c^2}|\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2, \qquad (213.11a)$$

或者引用通常的记号 $\nu=\frac{\omega}{2\pi}$，则得

$$P_{k,\lambda}=\frac{e^2}{\hbar c}\frac{4\pi^2\nu^3}{c^2}d\Omega_k|\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2. \qquad (213.11b)$$

这个公式中的矩阵元仍可分解为两个因子的乘积

$$\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle=\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}_{if}, \qquad (213.12)$$

第一个因子只与光子的发射方向和极化取向有关，而第二个因子只与原子参数有关.

问题 214　辐射的角分布

试利用上题中最后的公式研究一个电子在 $P\to S$ 跃迁中发射的光子的角分布.

解 设Θ, Φ是确定$\boldsymbol{k}$的方向的极角. 然后我们可以定义两个极化态, 一个是$\boldsymbol{u}_k^{(1)}$, 在子午平面内, 另一个是$\boldsymbol{u}_k^{(2)}$, 与此面垂直. 这两个单位矢量的分量是

$$u_x^{(1)}=\cos\Theta\cos\Phi;\ u_y^{(1)}=\cos\Theta\sin\Phi;\ u_z^{(1)}=-\sin\Theta \tag{214.1a}$$

和

$$u_x^{(2)}=-\sin\Phi;\ u_y^{(2)}=\cos\Phi;\ u_z^{(2)}=0. \tag{214.1b}$$

为构成$\boldsymbol{r}_{if}$的分量, 首先将$\boldsymbol{r}$的三个分量x, y, z写成球谐函数:

$$\left.\begin{aligned} x&=r\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{-,1}+Y_{1,-1});\\ y&=-ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1,1}-Y_{1,-1});\\ z&=r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_{1,0}. \end{aligned}\right\} \tag{214.2}$$

然后求出这三个表达式在两个电子态

$$|i\rangle=v(r)Y_{1,m}(\vartheta,\ \varphi);\ |f\rangle=u(r)Y_{0,0}(\vartheta,\ \varphi). \tag{214.3}$$

之间的矩阵元. 必须指出$Y_{0,0}=4\pi)^{-\frac{1}{2}}$是一个常数. 因此得到

$$\left.\begin{aligned} x_{if}&=\frac{1}{\sqrt{6}}R(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}),\\ y_{if}&=-\frac{i}{\sqrt{6}}R(\delta_{m,1}-\delta_{m,-1}),\\ z_{if}&=\frac{1}{\sqrt{3}}R\delta_{m,0} \end{aligned}\right\} \tag{214.4}$$

其中

$$R=\int_0^\infty dr\,r^3u^*(r)v(r)=\sqrt{3}\,|r_{if}| \tag{214.5}$$

是径向积分.

按照上题的(213.11a)式, 发射一个极化为λ的光子进入立体角元$d\Omega_k$的几率是

$$P_{k,\lambda}=\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,\frac{d\Omega_k}{2\pi}\,|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}_{if}|^2. \tag{214.6}$$

利用(214.1a, b)式的 $\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}$ 和(214.4)式的 $\boldsymbol{r}_{if}$，可以求得：

$$\lambda=1\text{ 时，}\boldsymbol{u}_k^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}_{if}=\begin{cases}\dfrac{R}{\sqrt{6}}\cos\Theta e^{-i\Phi}; & m=+1,\\ -\dfrac{R}{\sqrt{3}}\sin\Theta; & m=0,\\ \dfrac{R}{\sqrt{6}}\cos\Theta e^{+i\Phi}; & m=-1\end{cases}\tag{214.7}$$

和

$$\lambda=2\text{ 时，}\boldsymbol{u}_k^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}_{if}=\begin{cases}-i\dfrac{R}{\sqrt{6}}e^{-i\Phi}; & m=+1,\\ 0; & m=0,\\ +i\dfrac{R}{\sqrt{6}}e^{i\Phi}; & m=-1.\end{cases}\tag{214.8}$$

因此如果将 $P_{k\lambda}$ 写成

$$P_{k\lambda}=\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\frac{R^2}{6\pi}d\Omega_k\cdot D_{k\lambda}(\Theta,\Phi),\tag{214.9}$$

方向因子 $D_{k\lambda}$		
m	$\lambda=1$	$\lambda=2$
$+1$	$\frac{1}{2}\cos^2\Theta$	$\frac{1}{2}$
0	$\sin^2\Theta$	0
-1	$\frac{1}{2}\cos^2\Theta$	$\frac{1}{2}$

则方向因子 $D_{k\lambda}$ 由附表中的表达式给出．在 $\lambda=2$ 的情况下，光子发射对于所有方向是等几率的；只是对于 $m=0$ 的初态，完全不发射这种极化($\lambda=2$)的光子．因此 $m=0$ 的 P 态只有通过发射极化态 $\lambda=1$ 的光子进行衰变，其角分布为 $\sin^2\Theta$，因此 $m=0$ 态的主要发射方向处在赤道平面 ($\Theta=90^\circ$) 上．然而，对于 $\lambda=1$ 和 $m=\pm1$，角分布正比于 $\cos^2\Theta$，因而发射更多地出现在 $\Theta=0^\circ$ 和 $\Theta=180^\circ$ 的方向上．

问题 215　跃 迁 几 率

试问一电子从较高的 P 态发射一个光子(不论光子的发射方向和极化如何)跃迁到较低的 S 态的几率等于多少？ 以氢原子为例,计算 $2P$ 态的平均寿命.

解　上题中，对于 $m=+1$，0，-1 和两种极化态,计算了光子进入 Θ, Φ 方向上的立体角元 $d\Omega_k$ 的微分发射几率. 利用这些公式并对两种极化态求和,则得

$$\sum_{\lambda} P_{k\lambda}=\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,\frac{R^2}{6\pi}\,d\Omega_k\sin^2\Theta;\ \text{对于}\ m=0 \tag{215.1a}$$

$$\sum_{\lambda} P_{k\lambda}=\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,\frac{R^2}{6\pi}\,d\Omega_k\cdot\frac{1}{2}(1+\cos^2\Theta);\ \text{对于}\ m=\pm 1 \tag{215.1b}$$

将这些表达式对光子的所有发射方向积分,则对于 m 的所有三个初始值,得出相同的从 P 态到 S 态的跃迁几率,即

$$P=\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\cdot\frac{R^2}{6\pi}\cdot\frac{8\pi}{3}=\frac{4}{9}\,\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,R^2. \tag{215.2}$$

由于在上题中已经相当详细地确定了 R，现在可以立即转入具体的例子. 从氢原子的 $2P$ 态只能跃迁到基态 $1S$. 这两个态的本征函数是

$$|i\rangle=\frac{1}{12}\sqrt{6}\,re^{-\frac{r}{2}}Y_{1,m} \tag{215.3a}$$

和

$$|f\rangle=2e^{-r}Y_{0,0} \tag{215.3b}$$

这里用的是原子单位(单位长度：$\hbar^2/me^2$). 于是由(214.5)可得

$$R=\int_0^\infty dr r^3\cdot\frac{\sqrt{6}}{12}\,re^{-\frac{r}{2}}2e^{-r}=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{2}{3}\right)^5\cdot 24;\quad R^2=\frac{2^{15}}{3^9},$$

如果我们仍然用与单位无关的记号,则

$$R^2=\frac{2^{15}}{3^9}\cdot\frac{\hbar^4}{m^2e^4}. \tag{215.4}$$

在本例中，光的频率由氢原子能级公式给出

$$\omega=\frac{3}{8}\frac{me^4}{\hbar^3}. \tag{215.5}$$

将(215.4)的 R^2 和(215.5)的 ω 代入(215.2)式，并适当组合其中的因子，最后得到

$$P=\left(\frac{2}{3}\right)^8\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\frac{me^4}{\hbar^2}. \tag{215.6}$$

$2P$ 态的平均寿命 τ 就是这个跃迁几率的倒数，因为在这种特殊情况下没有其他的衰变方式. 因此

$$\tau=\left(\frac{3}{2}\right)^8\left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^3\frac{\hbar^3}{me^4}. \tag{215.7}$$

对于激发电子态的寿命，量

$$\frac{\hbar^3}{me^4}=2.4187\times10^{-17}\text{ 秒} \tag{215.8}$$

是一个合适的时间单位. 因子

$$\frac{\hbar c}{e^2}=137.0373$$

是精细结构常数的倒数. 于是氢原子 $2P$ 态的平均寿命值是

$$\tau=1.5953\times10^{-9}\text{ 秒}.$$

问题 216　偶极辐射的选择定则

在问题 213 中已经证明，如果光子的波长远大于原子的线度，则在原子中单电子态之间的跃迁几率与电偶极矩阵元有关. 试导出这种跃迁的选择定则. 对于正常塞曼效应，结果如何？

解　按(213.11b)，在偶极近似下，一个极化为 λ 的光子发射到 $\boldsymbol{k}$ 方向(极角 Θ, Φ)上的立体角元 $d\Omega_k$ 中的几率是

$$P_{k\lambda}=\frac{e^2}{\hbar c}\cdot\frac{4\pi^2\nu^3}{c^3}\cdot d\Omega_k|\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2. \tag{216.1}$$

这里 $\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}$ 是在极化方向上的单位矢量. 按照(214.1a, b)，它的分量是

$$u_x^{(1)}=\cos\Theta\cos\Phi;\ u_y^{(1)}=\cos\Theta\sin\Phi;\ u_z^{(1)}=-\sin\Theta \quad (216.2a)$$

和

$$u_x^{(2)}=-\sin\Phi;\ u_y^{(2)}=\cos\Phi;\ u_z^{(2)}=0. \quad (216.2b)$$

两个原子态的波函数是

$$|i\rangle=\varphi_i(r)Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi);\ \langle f|=\varphi_f(r)Y^*_{l'm'}(\vartheta,\ \varphi),$$

因此 $\boldsymbol{r}$ 分量的矩阵元是

$$\left.\begin{aligned}\langle f|x\pm iy|i\rangle&=\int_0^\infty dr r^3\varphi_i\varphi_f\oint d\Omega Y^*_{l',m'}\sin\vartheta e^{\pm i\varphi}Y_{l,m},\\ \langle f|z|i\rangle&=\int_0^\infty dr r^3\varphi_i\varphi_f\oint d\Omega Y^*_{l',m'}\cos\vartheta Y_{l,m}.\end{aligned}\right\} \quad (216.3)$$

现在利用关系式

$$\left.\begin{aligned}\sin\vartheta e^{\pm i\varphi}Y_{l,m}&=\pm A_{l+1,\pm m+1}Y_{l+1,m\pm1}\mp A_{l,\mp m}Y_{l-1,m\pm1},\\ \cos\vartheta Y_{l,m}&=B_{l+1,m}Y_{l+1,m}+B_{l,m}Y_{l-1,m}\end{aligned}\right\} \quad (216.4)$$

其中系数

$$A_{l,m}=\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}};\ B_{l,m}=\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}. \quad (216.5)$$

将(216.4)代入(216.3)，对角度积分，则得

$$\langle f|x\pm iy|i\rangle=R_{if}\{\pm A_{l+1,\pm m+1}\delta_{l',l+1}\delta_{m',m\pm1}\mp A_{l,\mp m}\delta_{l',l-1}\delta_{m',m\pm1}\} \quad (216.6a)$$

$$\langle f|z|i\rangle=R_{if}\{B_{l+1,m}\delta_{l',l+1}+B_{l,m}\delta_{l',l-1}\}\delta_{m',m} \quad (216.6b)$$

其中 R_{if} 代表如下的径向积分

$$R_{if}=\int_0^\infty dr r^3\varphi_i(r)\varphi_f(r). \quad (216.7)$$

如果 $l'\neq l\pm1$，则(216.6)的矩阵元全部为零，这给出了偶极跃迁的第一个基本选择定则. 此外，由 (216.6a, b) 可见，对于 $m'=m\pm1$，只有 $x\pm iy$ 的矩阵元不为零，而对于 $m'=m$，只有 Z 的矩阵元不为零. 量子数 l 和 m 的任何其他改变不可能出现有偶

极跃迁中.

将这些选择定则与极化矢量(216.2a, b)结合起来，可以计算(216.1)中的矩阵元(对于两个极化态 $\lambda=1$ 和 $\lambda=2$)

$$\langle f|\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle.$$

结果总结在附表中.

m'	λ	$l'=l+1$	$l'=l-1$
$m+1$	1	$\frac{1}{2}\cos\Theta e^{-i\Phi}R_{if}A_{l+1,m+1}$	$-\frac{1}{2}\cos\Theta e^{-i\Phi}R_{if}A_{l,-m}$
	2	$-\frac{i}{2}e^{-i\Phi}R_{if}A_{l+1,m+1}$	$\frac{i}{2}e^{-i\Phi}R_{if}A_{l,-m}$
m	1	$-\sin\Theta R_{if}B_{l+1,m}$	$-\sin\Theta R_{if}B_{l,m}$
	2	0	0
$m-1$	1	$-\frac{1}{2}\cos\Theta e^{i\Phi}R_{if}A_{l+1,-m+1}$	$\frac{1}{2}\cos\Theta e^{i\Phi}R_{if}A_{l,m}$
	2	$-\frac{i}{2}e^{i\Phi}R_{if}A_{l+1,-m+1}$	$\frac{i}{2}e^{i\Phi}R_{if}A_{l,m}$

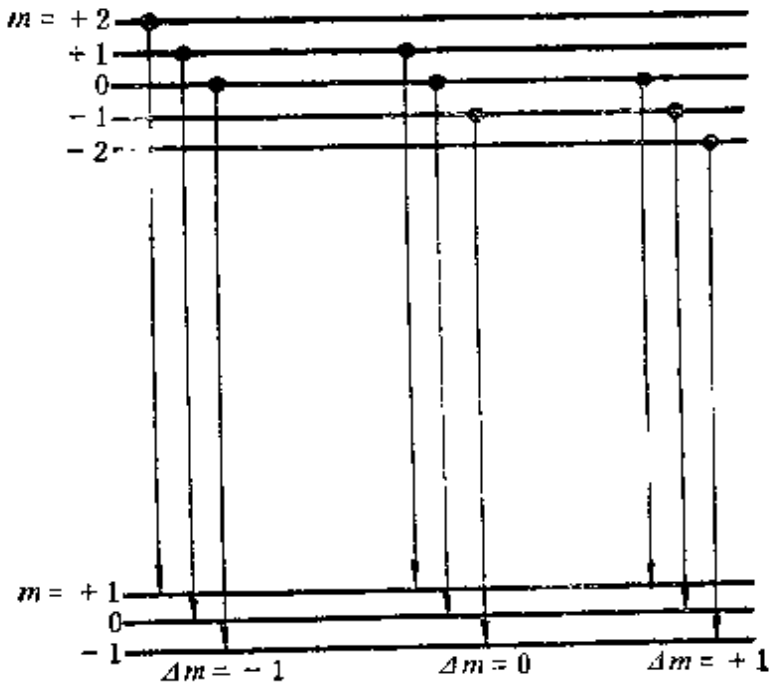


图 74　$l\to l'$ 的塞曼跃迁. 对 $\Delta m=+1,0,-1$, 有三条不同极化的谱线

如果发出辐射的原子在空间没有一定的取向，则观察到的强度只是对所有方向的平均值. 然而在塞曼效应中，由于原子在空间有一定的取向，观察将给出更多的知识. 如果取极轴($\Theta=0$)方向与磁场方向一致. 则当沿着场的方向观察光发射时，$m'=m$ 的矩阵元为零，于是只观察到 $m'=m+1$ 和 $m'=m-1$ 两条谱线. 另一方面，在垂直于磁场的任意方向上，$\cos\Theta=0$，于是 $m'=m\pm1$ 线只出现在极化态 $\lambda=2$，而 $m'=m$ 线只出现在极化态 $\lambda=1$.

现在以 D 态(5 个成分)到 P 态(3 个成分)的塞曼跃迁为例，如果没有磁场时发射谱线的频率是 ω_0，则在磁场中将有三种可能的频率，即

$$\left.\begin{array}{ll}\omega_1=\omega_0+\omega_L & \text{对 } m'=m-1,\\ \omega_0 & \text{对 } m'=m,\\ \omega_{-1}=\omega_0-\omega_L & \text{对 } m'=m+1\end{array}\right\}\text{其中 } \omega_L=\frac{e\mathscr{H}}{2mc}.$$

沿磁场方向($\Theta=0$)观察时，中间的谱线(ω_0)不出现，结果是频率为 $\omega_0+\omega_L$ 和 $\omega_0-\omega_L$ 的双线. 垂直于磁场方向观察时，三条谱线全部出现，构成了完整的塞曼三重线，不过这些谱线处于不同的极化状态.

问题 217　赖曼谱线的强度

试比较氢原子前两个赖曼谱线，$Ly\alpha$ 和 $Ly\beta$，的发射强度.

解　我们要研究的两个跃迁是

$$Ly\alpha:\ 2p\to 1s \quad 和 \quad Ly\beta:\ 3p\to 1s.$$

对所有方向积分，并对两种极化态求和后，得到发射几率

$$P=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2; \tag{217.1}$$

谱线强度(每秒发射的能量)与 $\omega\cdot P$ 成正比，所以上述两条谱线的强度比是

$$\frac{I_\alpha}{I_\beta}=\left(\frac{E_\alpha}{E_\beta}\right)^4\left|\frac{\langle 1s|\boldsymbol{r}|2p\rangle}{\langle 1s|\boldsymbol{r}|3p\rangle}\right|^2. \tag{217.2}$$

其中能量差(用原子单位)是

$$E_\alpha=\frac{1}{2}-\frac{1}{8}=\frac{3}{8}\quad 和\quad E_\beta=\frac{1}{2}-\frac{1}{18}=\frac{4}{9}. \tag{217.3}$$

下面来计算(217.2)中的两个矩阵元.

由问题 67, 末态波函数是

$$|1s\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}, \tag{217.4a}$$

而 $Ly\alpha$ 的初态波函数是

$$|2p\rangle=\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}re^{-\frac{1}{2}r}\cos\vartheta \tag{217.4b}$$

$Ly\beta$ 的初态波函数是

$$|3p\rangle=\frac{4}{27\sqrt{2\pi}}\left(r-\frac{1}{6}r^2\right)e^{-\frac{1}{3}r}\cos\vartheta. \tag{217.4c}$$

这里我们任意地选用了 $m=0$ 的 p 态, 只要不讨论方向效应, 这种选择不会影响结果的普遍性. 由于矢量 $\boldsymbol{r}$ 的分量是

$$x\pm iy=r\sin\vartheta e^{\pm i\varphi}\quad 和\quad z=r\cos\vartheta,$$

立即可以看出: 由于对 φ 积分, $x\pm iy$ 的矩阵元为零. 因此只要计算 $\langle f|z|i\rangle$ 即可. 我们得到

$$\langle 1s|z|2p\rangle=\frac{1}{4\pi\sqrt{2}}\oint d\Omega\cos^2\vartheta\int_0^\infty drr^4e^{-\frac{3}{2}r}$$

和 $$\langle 1s|z|3p\rangle=\frac{4}{27\pi\sqrt{2}}\oint d\Omega\cos^2\vartheta\int_0^\infty drr^3\left(r-\frac{1}{6}r^2\right)e^{-\frac{4}{3}r}.$$

上二式积分后得出

$$\langle 1s|z|2p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{256}{243};\ \langle 1s|z|3p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{27}{64}. \tag{217.5}$$

将(217.3)、(217.5)代入(217.2)式, 最后结果是

$$\frac{I_\alpha}{I_\beta}=\left(\frac{27}{32}\right)^4\cdot\left(\frac{256}{243}\cdot\frac{64}{27}\right)^2=0.510\times 6.23 \tag{217.6}$$

或

$$I_\alpha/I_\beta=3.18.$$

文献 其他各对氢原子态之间的径向矩阵元，已由 Bethe, H. A., Salpeter, E. E. 在 *Encyclopedia of physics*, Vol.**35**(1956)一书中给出，参见该书 63 节，特别是表 13.

问题 218 康普顿效应

试在非相对论的框架内，讨论光子在静止自由电子上的散射.

解 在有辐射场参与的情况下，电子场的电流密度①是

$$\boldsymbol{j}=-\frac{e\hbar}{2mi}(\psi^{\dagger}\nabla\psi-\nabla\psi^{\dagger}\cdot\psi)-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}\psi^{\dagger}\psi=\boldsymbol{j}'+\boldsymbol{j}'' \tag{218.1}$$

场 ψ 和场 $\boldsymbol{A}$ 的相互作用能量是

$$W=\frac{1}{c}\int d^3x\,\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{A}=W'+W''. \tag{218.2}$$

对于量子化的薛定谔场，有

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\sum_q c_q e^{iq\cdot r} \tag{218.3}$$

对于量子化的辐射场，有

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\mathcal{V}k}}\,\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}(b_{k\lambda}e^{ikr}+b_{k\lambda}^{\dagger}e^{-ikr}). \tag{218.4}$$

如果将(218.3)和(218.4)代入(218.2)式，容易看出，W''(由 $\boldsymbol{j}''$ 引起的)在一级近似中对散射就有贡献. 而 W'(由 $\boldsymbol{j}'$ 引起的)只在二级近似中才有贡献. 因此，下面限于讨论

$$W''=-\frac{e^2}{mc^2}\int d^3x\,\boldsymbol{A}^2\psi^{\dagger}\psi, \tag{218.5}$$

的贡献.

从经典图象看来，这个相互作用项是不难理解的：在经典电动力学中，入射光波的电场强度 $\mathscr{E}=-\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}$ 作用于电子，使电子满足下面的运动方程

$$m\ddot{\boldsymbol{r}}=-e\mathscr{E}=\frac{e}{c}\dot{\boldsymbol{A}};\ \text{因此}\ \dot{\boldsymbol{r}}=\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}.$$

---

① 在前面讨论过的辐射问题中，(218.1)式中最后的补充项在一级近似中没有贡献.

电子的运动引起一个感生电流密度 $\boldsymbol{j}''=\rho\dot{\boldsymbol{r}}-\frac{e}{mc}\rho\boldsymbol{A}$，$\rho$ 表示电荷密度；按照麦克斯韦理论，这电流与辐射场之间的相互作用是

$$W''=\frac{1}{c}\int d^3x\,\boldsymbol{j}''\cdot\boldsymbol{A}=\frac{e}{mc^2}\int d^3x\rho A^2$$

如果设 $\rho=-e|\psi|^2$，则得(318.5)式.

在一级近似下，康普顿散射过程用哈密顿算符中具有如下组合的项来描述，

$$c_q^\dagger c_q b_{k'\lambda'}^\dagger b_{k\lambda} \tag{218.6}$$

它表示在初态中同时消失了一个在$(\boldsymbol{k},\ \lambda)$态的光子和一个动量为 $\hbar\boldsymbol{q}$ 的电子，代之在末态中新产生出一个在 $(\boldsymbol{k}',\ \lambda')$ 态的光子和一个动量为 $\hbar\boldsymbol{q}'$ 的电子.

如果我们从(218.5)中挑选出算符乘积(218.6)的因子，则相应的矩阵元是

$$\langle f|W''|i\rangle=-\frac{e^2}{mc^2}\int d^3x\frac{2\pi\hbar c}{V\sqrt{kk'}}(\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{u}_{k'}^{(\lambda')})e^{i(k+q-k'-q')r}. \tag{218.7}$$

不难看出，除非

$$\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}', \tag{218.8}$$

即除非上述过程满足动量守恒定律，否则(218.7)的积分为零. 当(218.8)式成立时，(218.7)化为

$$\langle f|W''|i\rangle=-\frac{2\pi e^2\hbar}{Vmc}\frac{(\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{u}_{k'}^{(\lambda')})}{\sqrt{kk'}}. \tag{218.9}$$

应用黄金规则，得出散射截面

$$d\sigma(\boldsymbol{k}',\lambda')=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{V}{c}\rho_f|\langle f|W''|i\rangle|^2, \tag{218.10}$$

其中末态密度由下式给出

$$\rho_f=\frac{V^2k'^2dk'd\Omega'}{8\pi^3c^3dE_f}V \tag{218.11}$$

而末态能量是

$$E_f=\hbar ck'+\frac{\hbar^2}{2m}q'^2=\hbar c\left\{k'+\frac{1}{2\varkappa}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})^2\right\} \quad (218.12)$$

其中 $\varkappa=mc/\hbar$.

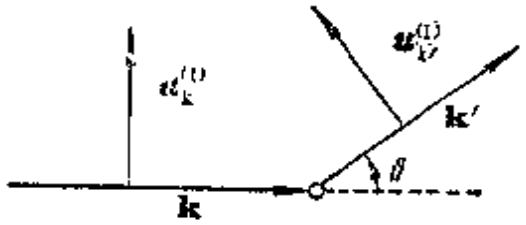


图75 康普顿效应. 初态(k)和末态(k')光子极化矢量的定义. 矢量 $u_k^{(1)}$ 和 $u_{k'}^{(1)}$ 在 k, k' 平面内, 矢量 $u_k^{(2)}$ 和 $u_{k'}^{(2)}$ (未画出)垂直于 k, k' 平面

现在来讨论极化, 在图75中, 碰撞前后光子的方向 k 和 k' 处在图的平面内, 矢量 $u_k^{(1)}$ 和 $u_{k'}^{(1)}$ 都处在这个平面中, $u_k^{(2)}$ 和 $u_{k'}^{(2)}$ (没有画出)与这个平面垂直. 这样, 从图可以直接写出(218.9)中的标积:

$$(u_k^{(1)}\cdot u_{k'}^{(1)})=\cos\vartheta;\quad (u_k^{(1)}\cdot u_{k'}^{(2)})=0; \quad (218.13a)$$

$$(u_k^{(2)}\cdot u_{k'}^{(1)})=0;\qquad (u_k^{(2)}\cdot u_{k'}^{(2)})=1. \quad (218.13b)$$

这些关系式表明, 只能有这样的跃迁: 碰撞前后的两个极化矢量都处在 k, k' 平面内, 或者都垂直于 kk' 平面. 对于第一种情况, 跃迁几率正比于 $\cos^2\vartheta$, 对于第二种情况, 跃迁几率与散射角无关. 如果入射光是非极化的, 则必须对初态极化 λ 求平均, 并对末态极化 λ' 求和, 因此得到

$$\sum_{\lambda'}\overline{(u_k^{(\lambda)}\cdot u_{k'}^{(\lambda')})^2}=\frac{1}{2}(1+\cos^2\vartheta). \quad (218.14)$$

在下面的讨论中, 进一步假设初态电子是静止的

$$q=0. \quad (218.15)$$

于是按(218.2)式, 能量守恒定律是

$$\hbar c\left\{k'+\frac{1}{2\varkappa}(k'-k)^2\right\}=\hbar ck. \quad (218.16)$$

这是一个确定 k' 的二次方程, 因为

$$(k'-k)^2=k'^2+k^2-2kk'\cos\vartheta.$$

因此(218.16)的解是

$$k'=k\cos\vartheta-\varkappa+\sqrt{\varkappa^2+2\varkappa k(1-\cos\vartheta)-k^2\sin^2\vartheta}. \quad (218.17)$$

为了计算(218.11)的 ρ_f，由(218.16)得

$$\frac{dE_f}{dk'}=\hbar c\left\{1+\frac{1}{\varkappa}(k'-k\cos\vartheta)\right\};$$

因此

$$\rho_f=\frac{\mathcal{V}}{8\pi^3\hbar c}\cdot\frac{k'^2}{1+\frac{1}{\varkappa}(k'-k\cos\vartheta)}\,d\Omega', \qquad (218.18)$$

将(218.9)代入(218.10)式，考虑到(218.14)和(218.18)式，则微分散射截面化为

$$d\sigma=\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{k'^2}{1+\frac{1}{\varkappa}(k'-k\cos\vartheta)}\,\frac{\frac{1}{2}(1+\cos^2\vartheta)}{kk'}\,d\Omega', \qquad (218.19)$$

其中的 k' 还可用(218.17)式代替.

至此，所有这些结果都是严格的非相对论公式，它们自然只能适用于电子获得的动能远小于静能 mc^2 的情况：

$$E_{kin}=\hbar c(k-k')\ll mc^2 \quad 或 \quad k-k'\ll\varkappa$$

因此可以合理地将(218.17)和(218.19)展开成 $k/\varkappa$ 的幂级数：

$$\frac{k'}{\varkappa}=\frac{k}{\varkappa}-\frac{k^2}{\varkappa^2}(1-\cos\vartheta)+\cdots$$

和

$$d\sigma=\frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\left\{1-2\,\frac{k}{\varkappa}(1-\cos\vartheta)\right\}(1+\cos^2\vartheta)\,d\Omega'. \qquad (218.20)$$

将(218.20)对所有方向积分，则总截面可以写成

$$\sigma=\frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{1}{1+2\,\frac{k}{\varkappa}} \qquad (218.21)$$

经典电动力学中熟知的所谓汤姆孙散射截面

$$\sigma_0=\frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2=6.652\times10^{-25}\text{ 厘米}^2 \qquad (218.22)$$

相当于本题的波长趋于无限大的极限情形. 在(218.21)式中,随着光子能量($k/\varkappa=\hbar\omega/mc^2$)增加而使截面下降的附加因子是第一次的量子理论修正,只要 $\frac{k}{\varkappa}\ll 1$,或者只要波长仍然远大于康普顿波长 $\frac{1}{\varkappa}=\frac{\hbar}{mc}$(对于 $\hbar\omega=mc^2=0.51\,\mathrm{MeV}$ 或 $k=\varkappa$,波长是 $\lambda=2\pi\hbar/mc$),这个修正就足够了.

注1 当 $q=0$ 时,来自(218.2)中 W' 的二级贡献等于零. 在相对论性理论中,电流密度一般采用狄拉克表示式(199.1),这个电流密度只在二级近似中能够引起康普顿跃迁. 但是这个表示式可以按照问题 199 的办法分解成两部分,因此可以进行与本题的非相对论方法完全类似的相对论性的讨论.

注2 对于较高能量的光子,必须用狄拉克理论处理电子场. 结果得到的不是(218.21)式,而是克莱因-仁科公式. 从下面的数字可以看出,我们的近似可适用于相当宽的能量范围. 对于 $k/\varkappa=0.2$,(218.21)式给出 $\sigma/\sigma_0=0.714$,而严格的克莱因-仁科公式给出 $\sigma/\sigma_0=0.737$. 在 $k/\varkappa=1$ 处,则分别是 $\sigma/\sigma_0=0.333$(由(218.21)式)和 $\sigma/\sigma_0=0.431$(克莱因-仁科). 实际的截面值随光子能量增加的下降比我们的近似公式给出的要慢得多,例如在 $k/\varkappa=1000$ 处,我们的近似给出 $\sigma/\sigma_0=0.0050$,而正确值却是 0.0215.

问题 219 韧致辐射

在非相对论性的讨论中,一个电子通过重核附近时产生一个X射线光子的过程,可以作为一个二级过程来处理. 在此过程中,重核简单地用它的静电场来描述,并且假设核的质量是无限大. 试计算在这种近似下的韧致辐射谱.

解 图 76 中画出这个过程的两个最简单的可能的图形. 初态中有一个静止的核和一个动量为 $\hbar\boldsymbol{q}$ 的电子,末态中无限重的核仍然是静止的,电子具有较小的动量 $\hbar\boldsymbol{q}'$,产生一个光子($\boldsymbol{k}$, λ). 这个产生过程与电子在核上的简单的卢瑟福散射结合在一起,引起二顶角先后次序上的两种可能. 由于核的质量是无限大,因此没

有能量而只有动量传递给核. ($M=\infty$, p 有限, $p^2/2M=0, v=0$), 所以在初态和末态其他粒子之间能量守恒仍然成立, 但是动量并不守恒.

微扰能量由两项组成

$$H' = H_1 + H_2, \tag{219.1}$$

其中

$$H_1 = -Ze^2\int d^3x\,\frac{1}{r}\,\psi^\dagger\psi \tag{219.2}$$

是电子(电荷密度 $\rho=-e\psi^\dagger\psi$)与核(电荷为 Ze)的库仑相互作用. 而

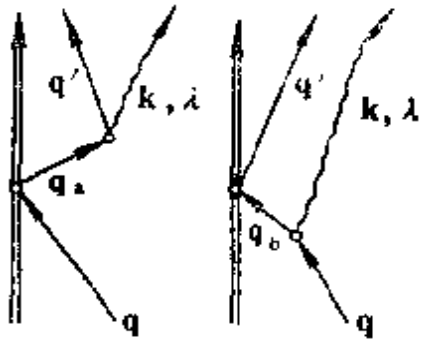
$$\left.\begin{aligned} H_2 &= \frac{1}{c}\int d^3x(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j});\\ \boldsymbol{j} &= -\frac{e\hbar}{2mi}(\psi^\dagger\nabla\psi-\nabla\psi^\dagger\cdot\psi)\end{aligned}\right\} \tag{219.3}$$

是辐射相互作用. 场算符是

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k,\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{kV}}\,\boldsymbol{u}_k^{(\lambda)}(b_{k\lambda}e^{ik\cdot r}+b_{k\lambda}^\dagger e^{-ik\cdot r}) \tag{219.4}$$

和

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_\nu c_\nu e^{iq_\nu r};\quad \nabla\psi=\frac{i}{\sqrt{V}}\sum_\nu \boldsymbol{q}_\nu c_\nu e^{iq_\nu r} \tag{219.5}$$



a) b)

图 76a 和 b 在非相对论性近似中, 制致辐射的两个最低级费曼图, 双线表示核, 单线是电子, 波线是光子

将(219.4)和(219.5)代入(219.2)和(219.3), 并对空间积分, 则得

$$H_1=-\frac{Ze^2}{V}\sum_{\mu,\nu}c_\mu^\dagger c_\nu\,\frac{4\pi}{|\boldsymbol{q}_\mu-\boldsymbol{q}_\nu|^2} \tag{219.6}$$

和

$$H_2=-\frac{e\hbar}{2mc}\sum_{k,\lambda}\sum_{\mu,\nu}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{kV}}\,\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot(\boldsymbol{q}_\mu+\boldsymbol{q}_\nu)c_\mu^\dagger c_\nu\{b_{k\lambda}\delta_{k,q_\mu-q_\nu}+b_{k\lambda}^\dagger\delta_{k,q_\nu-q_\mu}\} \tag{219.7}$$

对于图 76 中的图形 a, 必须找出 H_1 中的因子 $c_Q c_{q_a}^\dagger$ 和 H_2 中的因子 $c_{q_a}c_Q^\dagger b_{k\lambda}$ 相应的矩阵元是

$$\langle \boldsymbol{q}_a | H_1 | \boldsymbol{q} \rangle = -\frac{4\pi Ze^2}{\mathscr{V}} \cdot \frac{1}{|\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}_a|^2} \qquad (219.8a)$$

和

$$\langle \boldsymbol{q}', \boldsymbol{k}\lambda | H_2 | \boldsymbol{q}_a \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k\mathscr{V}}}\,\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot(\boldsymbol{q}_a+\boldsymbol{q}'). \qquad (219.8b)$$

在第一个顶角上不存在守恒定律，但在第二个顶角上动量守恒给出

$$\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}'=\boldsymbol{q}_a, \qquad (219.9a)$$

由于 $\boldsymbol{u}_{k\lambda}$ 垂直于 $\boldsymbol{k}$，因此

$$\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot(\boldsymbol{q}_a+\boldsymbol{q}')=2\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q}'. \qquad (219.10a)$$

对于图 76 中的图形 b，我们需要的是 H_2 中的因子 $c_{\boldsymbol{q}}c^{\dagger}_{\boldsymbol{q}_b}b^{\dagger}_{k\lambda}$ 和 H_1 中的 $c_{\boldsymbol{q}_b}c^{\dagger}_{\boldsymbol{q}'}$，相应的矩阵元是

$$\langle \boldsymbol{q}_b, \boldsymbol{k}\lambda | H_2 | \boldsymbol{q} \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k\mathscr{V}}}\,\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_b) \qquad (219.11a)$$

和

$$\langle \boldsymbol{q}' | H_1 | \boldsymbol{q}_b \rangle = -\frac{4\pi Ze^2}{\mathscr{V}} \cdot \frac{1}{|\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{q}_b|^2}. \qquad (219.11b)$$

在这情况下，在第一个顶角上动量守恒，

$$\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_b=0 \qquad (219.9b)$$

因此有

$$\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_b)=2\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q}. \qquad (219.10b)$$

初态的能量

$$E_i=\frac{\hbar^2q^2}{2m} \qquad (219.12)$$

必须等于末态的能量

$$E_f=\frac{\hbar^2q'^2}{2m}+\hbar ck, \qquad (219.13)$$

因此

$$q^2=q'^2+2\varkappa k;\ \varkappa=\frac{mc}{\hbar}. \qquad (219.14)$$

利用(219.9a, b)，对于两个中间态有

$$E_a=\frac{\hbar^2q_a^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{q}'+\boldsymbol{k})^2 \qquad (219.15)$$

$$E_b=\frac{\hbar^2q_b^2}{2m}+\hbar ck=\frac{\hbar^2}{2m}\{(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})^2+2\varkappa k\}. \quad (219.16)$$

利用上面这些缩写，现在可以将二级矩阵元写成

$$\langle f|H'|i\rangle=\frac{\langle f|H_2|a\rangle\langle a|H_1|i\rangle}{E_i-E_a}+\frac{\langle f|H_1|b\rangle\langle b|H_2^2|i\rangle}{E_i-E_b},$$

将 (219.8a, b) 和 (219.11a, b) 的矩阵元代入上式，再利用 (219.10a, b)，则得较详细的表达式：

$$\langle f|H'|i\rangle=\frac{4\pi Ze^2}{\mathcal{V}}\cdot\frac{e\hbar}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\mathcal{V}k}}\frac{1}{|\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{k}|^2}$$
$$\times\left\{\frac{(\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q}')}{E_i-E_a}+\frac{(\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q})}{E_i-E_b}\right\}. \quad (219.17)$$

为了计算截面，必须应用黄金规则．因此需要知道末态密度 ρ_f．由于动量不守恒，末态两个粒子的发射方向是独立的，因此要确定 ρ_f 就有些困难．对于一个粒子(1)我们知道

$$\rho_1=\frac{d^3p_1\mathcal{V}}{h^3\,dE_1}=\frac{p_1^2}{v_1}\frac{\mathcal{V}}{h^3}\,d\Omega_1,$$

另一个粒子(2)（对于它，ρ_2 一定有类似的表达式）的能量被限制在间隔 $E_2\to E_2+dE_2$ 中．当第一个粒子的能量间隔给定时，E_2 的位置和 dE_2 的宽度就可由能量守恒确定．因此

$$\rho_f=\rho_1\rho_2dE_2$$

在本题的特殊情况下，如果 1 是非相对论性的电子($\boldsymbol{q}'$)，而 2 是光子($\boldsymbol{k}$)，则

$$\frac{p_1^2}{v_1}=m\hbar q';\quad \frac{p_2^2}{v_2}=\frac{1}{c}\hbar^2k^2;\quad dE_2=\hbar c\,dk,$$

于是

$$\rho_f=\frac{m\hbar q'}{8\pi^3\hbar^3}\mathcal{V}\,d\Omega'\cdot\frac{\hbar^2k^2}{8\pi^3\hbar^3c}\mathcal{V}\,d\Omega_k\hbar c\,dk. \quad (219.18)$$

将(219.17)和(219.18)代入普遍公式

$$d\sigma=\frac{\mathcal{V}}{v_1}\cdot\frac{2\pi}{\hbar}\rho_f|\langle f|H'|i\rangle|^2$$

中，得到电子被散射到立体角元 $d\Omega'$ 中，而极化为 λ，动量大小在区间 $k \to k+dk$ 内的光子发射到立体角元 $d\Omega_k$ 中的微分截面：

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c}\cdot\frac{Z^2e^4}{\pi^2}\cdot\frac{q'k}{q}\cdots\frac{1}{(E_i-E_a-\omega)^2}$$

$$\times\left\{\frac{\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q}'}{E_i-E_b}+\frac{\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{v}}{E_i-E_b}\right\}^2 d\Omega_k\,d\Omega'\,dk \qquad (219.19)$$

留下的问题是，确定不考虑末态两个粒子的动量方向和发射光子的极化取向时的光子能谱．这意味着对所有方向求积分，并对各种 λ 求和．在这类问题中，积分过程常常是相当麻烦的，不过，在现在的情况下，正如下面就要看到的，这些积分变得非常简单．

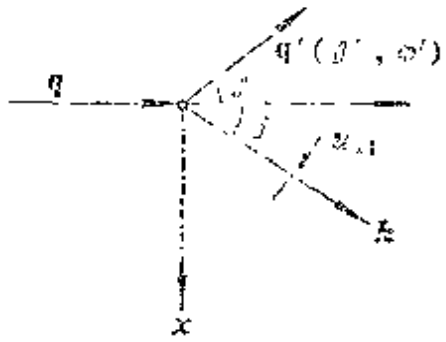


图 77　关于康致瑞射的记号

在图 77 中，在一个坐标系中画出三个动量．它们并不在一个平面中，亦即：如果选择 $\boldsymbol{q}$ 与 $\boldsymbol{k}$ 所在的平面为 xz 平面，则 $\boldsymbol{q}'$ 将有一个 y 分量．因此这三个动量的分量是

$$\boldsymbol{q} = q(0,\ 0,\ 1);$$

$$\boldsymbol{k} = k(\sin\vartheta,\ 0,\ \cos\vartheta);$$

$$\boldsymbol{q}' = q'(\sin\vartheta'\cos\varphi',\ \sin\vartheta'\sin\varphi',\ \cos\vartheta')$$

而两个极化矢量的分量是

$$\boldsymbol{u}_{k1} = (-\cos\vartheta,\ 0,\ \sin\vartheta);\ \boldsymbol{u}_{k2} = (0,\ 1,\ 0).$$

为进一步计算截面，现在取典型的非相对论近似．因为 x 大，由 (219.14) 式可以断定 $k \ll q$ 和 $k \ll q'$，因此与电子的动量相比，可以略去光子的动量．这使 (219.19) 式中的能量分母大为简化．由 (219.12)、(219.15) 和 (219.16) 得

$$E_i - E_a = \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 - q'^2 - 2\boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{k} - k^2)$$

$$E_i - E_b = \frac{\hbar^2}{2m}(-2\varkappa k + 2\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{k} - k^2)$$

上二式中的最后两项可以略去，并且第二式中的 $2\varkappa k$，按(219.14)，可以用 $q^2 - q'^2$ 代替，于是

$$E_i - E_a \simeq \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 - q'^2) \simeq -(E_i - E_b). \qquad (219.20)$$

因此(219.19)中的两个能量分母变成反号相等，这样就可将两个分子简单地相减，对于 $\lambda=1$ 和 $\lambda=2$ 得到：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{u}_{k1}\cdot\boldsymbol{q}' - \boldsymbol{u}_{k1}\cdot\boldsymbol{q} = q'(-\cos\vartheta\sin\vartheta'\cos\varphi' + \sin\vartheta\cos\vartheta') - q\sin\vartheta;\\ &\boldsymbol{u}_{k2}\cdot\boldsymbol{q}' - \boldsymbol{u}_{k2}\cdot\boldsymbol{q} = q'\sin\vartheta'\sin\varphi'.\end{aligned} \qquad (219.21)$$

将上面两个表达式平方后相加，就得到对 λ 的求和.

最后，在同样的近似下，(219.19)式中的卢瑟福能量分母可以写成

$$(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}' - \boldsymbol{k})^4 \simeq (\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}')^4 = (q^2 + q'^2 - 2qq'\cos\vartheta')^2. \qquad (219.22)$$

集合所有这些因子，立刻看出 ϑ 和 φ' 只出现在(219.21)式的平方求和中，于是对这些角度的积分，可以利用直接的基本计算，在这些项中分别进行：

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \oint d\Omega_k \sum_\lambda (\boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q}' - \boldsymbol{u}_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{q})^2 = \frac{16\pi^2}{3}(q^2 + q'^2 - 2qq'\cos\vartheta'). \qquad (219.23)$$

幸运的是，这里得到的截面分子中的括号(219.23)与出现在(219.19)分母中的括号(219.22)相同，不过后者是二次方. 将所有这些因子集拢来，我们得到

$$d\sigma(k) = Z^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{16}{3}\,\frac{q'}{q}\,\frac{dk}{k}\int_{-1}^{+1}\frac{d\cos\vartheta'}{q^2 + q'^2 - 2qq'\cos\vartheta'},$$

这里 $d\sigma(k)$ 是在能量间隔 dk 中产生一个光子(不考虑光子的发射方向和极化取向)的部分截面. 利用基本积分公式

$$\int_{-1}^{+1}\frac{d\cos\vartheta'}{q^2+q'^2-2qq'\cos\vartheta'}=\frac{1}{qq'}\log\frac{q+q'}{q-q'}$$

最后得到

$$d\sigma(k)=\frac{16}{3}Z^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\left(\frac{1}{q^2}\log\frac{q+q'}{q-q'}\right)\frac{dk}{k}. \quad (219.24)$$

利用(219.14)，可将上式中的动量 q' 用入射电子能量 E 和出射光子能量 $E_k=\hbar ck$ 来表示：

$$\log\frac{q+q'}{q-q'}=\log\frac{(q+q')^2}{q^2-q'^2}=\log\left\{\frac{(\sqrt{E}+\sqrt{E-E_k})^2}{E_k}\right\}.$$

图 78 中画出这个韧致谱．它显示出对于很低能量的光子的产生有一个显著的奇异性．这就是所谓的红外发散．

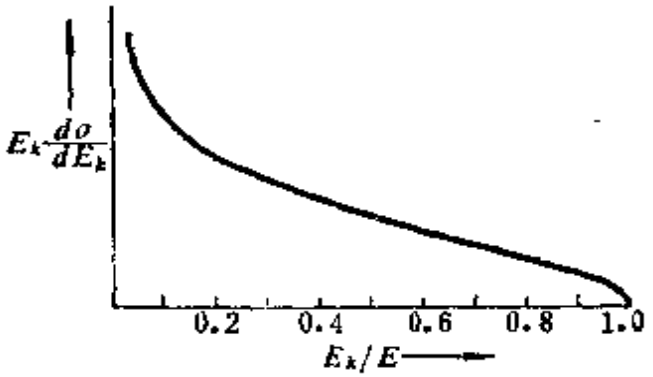


图 78　非相对论性理论中韧致辐射的强度分布．如果考虑库仑场的屏蔽，则在 $E_k=0$ 处就不会出现对数发散

文献　对于相对论性的讨论以及屏蔽问题，参见 Heitler, W.：辐射的量子理论，第三版，Oxford 1954, pp. 242—256。

数 学 附 录

坐 标 系

我们从直角坐标系出发，列出一些常用的曲线坐标系的变换公式，以及离坐标系中心的距离

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

和拉普拉斯算符

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

的变换公式.

a) **球极坐标.** 设 z 轴是极轴，用 ϑ 表示矢量 $\boldsymbol{r}$ 与 z 轴之间的夹角，并用 φ 表示绕 z 轴的方位角(参见第一卷问题 57，图 33).

$$x=r\sin\vartheta\cos\varphi;\ y=r\sin\vartheta\sin\varphi;\ z=r\cos\vartheta;$$

$$\nabla^2u=\frac{\partial^2u}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2u}{\partial\varphi^2}\right\}.$$

b) **圆柱坐标.** 设 z 轴是半径为 $\rho=$常数的所有圆柱的公共轴，角度 φ 仍然是绕 z 轴的方位角，选取 ρ, φ, z 作为坐标

$$x=\rho\cos\varphi;\ y=\rho\sin\varphi;\ z=z;\ r=\sqrt{\rho^2+z^2}$$

$$\nabla^2u=\frac{\partial^2u}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial u}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2u}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2u}{\partial z^2}$$

c) **抛物线坐标.** 设 z 轴是两族抛物面 $\xi=$常数和 $\eta=$常数的公共转动轴，两族抛物面的焦点都在坐标系的中心($z=0$)，一族抛物面向正 z 方向张开，另一族则向负 z 方向张开. φ 仍然是绕 z 轴的方位角. 对于坐标 ξ, η, φ 有两种习惯的选择：

第一系统. $x=\sqrt{\xi\eta}\cos\varphi$; $y=\sqrt{\xi\eta}\sin\varphi$; $z=\frac{1}{2}(\xi-\eta)$;

$$r=\frac{1}{2}(\xi+\eta);\ \xi=r+z;\ \eta=r-z;\ \rho=\sqrt{\xi\eta};$$

$$\nabla^2u=\frac{4}{\xi+\eta}\left\{\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u}{\partial\eta}\right)+\frac{\xi+\eta}{4\xi\eta}\left(\frac{\partial^2u}{\partial\varphi^2}\right)\right\}$$

第二系统. $x=\xi\eta\cos\varphi$; $y=\xi\eta\sin\varphi$; $z=\frac{1}{2}(\xi^2-\eta^2)$;

$$r=\frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2);\ \xi^2=r+z;\ \eta^2=r-z;\ \rho=\xi\eta;$$

$$\nabla^2u=\frac{1}{\xi^2+\eta^2}\left\{\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u}{\partial\eta}\right)+\left(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\right)\frac{\partial^2u}{\partial\varphi^2}\right\}.$$

d) **椭球坐标.** 选 z 轴上的两点，$z=\pm c$，作为一族长椭球（$\xi=$常数）的公共焦点. 与这族椭球面正交，存在着一族同样以 $z=\pm c$ 为焦点的双叶旋转抛物面. φ 仍是绕 z 轴的方位角. 设 r_1 和 r_2 分别是从焦点 $z=-c$ 和 $z=+c$ 到空间某一点的距离.

$$x=c\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\cos\varphi;\ y=c\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\sin\varphi;$$

$$z=c\xi\eta;\ r_1=c(\xi+\eta);\ r_2=c(\xi-\eta);$$

$$\xi=\frac{1}{2c}(r_1+r_2);\ \eta=\frac{1}{2c}(r_1-r_2);$$

$$r=c\sqrt{\xi^2+\eta^2-1};\ \rho=c\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}$$

取值的范围：$1\leqslant\xi<\infty$; $-1\leqslant\eta\leqslant+1$; $0\leqslant\varphi<2\pi$.

$$\nabla^2u=\frac{1}{c^2(\xi^2-\eta^2)}\left\{\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1)\frac{\partial u}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}(1-\eta^2)\frac{\partial u}{\partial\eta}+\frac{\xi^2-\eta^2}{(1-\eta^2)(\xi^2-1)}\frac{\partial^2u}{\partial\varphi^2}\right\}.$$

Γ 函 数

Γ 函数是阶乘的推广，后者只对于正整数定义为

$$n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots n \tag{1}$$

并具有如下的特性：

$$(n+1)! = (n+1) \cdot n!. \tag{2}$$

它同样可以用欧拉积分来定义：

$$n! = \int_0^\infty dt\, e^{-t} t^n. \tag{3}$$

这个定义补充了值 $0! = 1$，否则按定义(1)，$0!$ 是没有意义的.

对任意复数 $z = x + iy$，(2)和(3)的推广是

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z);\ \Gamma(n+1) = n! \tag{4}$$

和

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dt\, e^{-t} t^{z-1} \quad (\text{如果 } \mathrm{Re}\, z > 0). \tag{5}$$

这是一个亚纯函数，在负实轴上的 $z = -n\ (n = 0, 1, 2, \cdots)$ 处有极点，相应的留数是 $(-1)^n/n!$.

特殊值：

$$\Gamma(1) = 0! = 1;\ \ \Gamma(n) = (n-1)!; \tag{6}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi};\quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \left(\frac{1}{2}\right)! = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}; \tag{7}$$

$$\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right) = \left(n+\frac{1}{2}\right)! = \frac{(2n+1)!}{2^{2n+1} n!}\sqrt{\pi}. \tag{8}$$

不同自变量函数之间的关系：

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \tag{9}$$

$$\Gamma(2z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} 2^{2z-1} \Gamma(z) \Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right). \tag{10}$$

无穷级数或乘积展开：为了计算复数

$$\Gamma(x+iy)=\xi e^{i\eta}, \tag{11a}$$

可以利用展开

$$\xi=\Gamma(x)\prod_{n=0}^{\infty}\left\{1+\frac{y^2}{(x+n)^2}\right\}^{-\frac{1}{2}} \tag{11b}$$

和

$$\eta=y\left\{-C+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{y}\tan^{-1}\frac{y}{x+n-1}\right)\right\} \tag{11c}$$

其中

$$C=\int_0^{\infty}dte^{-t}\log\frac{1}{t}=0.577215\cdots \tag{11d}$$

是欧拉常数. 对于 $x=1$, 得

$$\xi^2=|\Gamma(1+iy)|^2=\frac{\pi y}{\sinh\pi y}. \tag{12}$$

渐近行为: 对于 $|z|\gg1$ 和 $|\arg z|<\pi$(即不包括具有 Γ 函数极点的负实轴)可以应用斯特令公式

$$\log\Gamma(z)=\left(z-\frac{1}{2}\right)\log z-z+\frac{1}{2}\log 2\pi+O\left(\frac{1}{z}\right) \tag{13}$$

或

$$\Gamma(z)\simeq\sqrt{\frac{2\pi}{z}}\,e^{z(\log z-1)}. \tag{14}$$

上式常用于

$$z!=\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)\simeq\sqrt{2\pi z}\,e^{z(\log z-1)}\left\{1+\frac{1}{12z}+\frac{1}{288z^2}+\cdots\right\}. \tag{15}$$

(15)式中的级数是半收敛的. 令 (15) 中的括号值等于 1, 可得如下的比较:

n	$n!$	$\sqrt{2\pi n}\,e^{n(\log n-1)}$
0	1	0
1	1	0.925
2	2	1.920
3	6	5.836
4	24	23.506
5	120	118.01

贝塞耳函数

微分方程

$$u''+\frac{1}{z}u'+\left(1-\frac{\nu^2}{z^2}\right)u=0 \tag{1}$$

的解是

$$u=AJ_\nu(z)+BN_\nu(z) \tag{2}$$

或

$$u=C_1H_\nu^{(1)}(z)+C_2H_\nu^{(2)}(z). \tag{3}$$

函数 J_ν 称为贝塞耳函数(在正常意义下)，函数 N_ν 称为纽曼函数. 如果 ν 不是整数，可以用定义

$$N_\nu(z)=\frac{1}{\sin\pi\nu}(\cos\pi\nu J_\nu(z)-J_{-\nu}(z)), \tag{4}$$

对于 $\nu=n$, $n=0$, ±1, $\pm2\cdots$ 的情况，

$$J_{-n}(z)=(-1)^nJ_n(z) \tag{5}$$

与 J_n 不再是线性独立的. 这时函数 $N_n(z)$ 仍可用它的渐近式来定义(见下面).

贝塞耳函数 J_ν 可以用下面的幂级数来定义

$$J_\nu(z)=\left(\frac{z}{2}\right)^\nu\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!\,\Gamma(\nu+n+1)}\left(\frac{z}{2}\right)^{2n}, \tag{6}$$

它在沿着负实轴割开的整个复 z 平面上是收敛的($z=0$ 是分支点).

函数 $H_\nu^{(1)}$ 和 $H_\nu^{(2)}$ 称为第一类和第二类汉克耳函数. 它们的定义是

$$H_\nu^{(1)}(z)=J_\nu(z)+iN_\nu(z);\quad H_\nu^{(2)}(z)=J_\nu(z)-iN_\nu(z). \tag{7}$$

对于实的 z，(2) 的一组基本解具有实数值；其朗斯基行列式等于 $2/\pi z$. (3)的朗斯基行列式等于 $-4i/\pi z$. 如果 ν 不是整数，则 J_ν 和 $J_{-\nu}$ 构成第三组基本解，其朗斯基行列式等于 $-2\sin\pi\nu/(\pi z)$.

递推关系. 对于 (2) 和 (3) 所定义的四种类型函数中的每一

种，下面的关系式成立：

$$u_{\nu-1}+u_{\nu+1}=\frac{2\nu}{z}u_\nu;\quad u_{\nu-1}-u_{\nu+1}=2u'_\nu \tag{8a}$$

或

$$u_{\nu+1}=\frac{\nu}{z}u_\nu-u'_\nu;\quad u_{\nu+1}=\frac{2\nu}{z}u_\nu-u_{\nu-1}. \tag{8b}$$

渐近行为. 利用缩写

$$\zeta=z-\frac{\pi}{2}\left(\nu+\frac{1}{2}\right) \tag{9a}$$

对于$|z|\gg 1+|\nu|$和$|\arg z|<\pi$，即对于沿负实轴割开的z平面上的大$|z|$值，下列渐近公式成立：

$$\left.\begin{aligned} &J_\nu(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\zeta;\ N_\nu(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\sin\zeta;\\ &H_\nu^{(1)}(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}e^{i\zeta};\quad H_\nu^{(2)}(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}e^{-i\zeta}. \end{aligned}\right\} \tag{9b}$$

对于实的z，函数$z^{-\frac{1}{2}}H_\nu^{(1,2)}(z)$分别描述向外和向内的球面波.

修正贝塞耳函数　对于实的正x值，下面各函数的值是实的：

$$I_\nu(x)=i^{-\nu}J_\nu(ix) \tag{10}$$

和

$$K_\nu(x)=\frac{i\pi}{2}i^\nu H_\nu^{(1)}(ix)\quad(\text{当 }\nu\text{ 是整数}) \tag{11a}$$

或

$$K_\nu(x)=\frac{\pi}{2\sin\nu\pi}[I_{-\nu}(x)-I_\nu(x)]\quad(\text{当 }\nu\text{ 不是整数}). \tag{11b}$$

最后一个函数特别有意义，因为对于大x，它有如下的渐近行为：

$$K_\nu(x)\to\sqrt{\frac{\pi}{2x}}e^{-x}. \tag{12}$$

在问题185中给出更多的关于K_0和K_1的公式. 在问题99中，微分方程

$$u''-g^2x^{-n}u=0 \tag{13a}$$

的解写成

$$u=\sqrt{x}K_{1/2\lambda}\left(\frac{g}{\lambda}x^{-\lambda}\right)\quad\text{其中}\lambda=\frac{n-2}{2}. \tag{13b}$$

在一些光学衍射问题中要用到函数

$$\mathrm{Ai}(x)=\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{x}{3}}\,K_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right), \tag{14a}$$

它被称为爱里函数. 它向负 x 值的解析延拓给出

$$\mathrm{Ai}(-x)=\frac{1}{3}\sqrt{x}\left\{J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)\right\}. \tag{14b}$$

在本书的问题 40 中已经用过爱里函数,它的图形画在图 28 中,爱里函数同样可以有效地用在问题 117 中,然而在那里已经先用了原来 $\nu=\pm\frac{1}{3}$ 的函数 J_ν 和 I_ν.

球贝塞耳函数. 指标值 $\nu=l+\frac{1}{2}$ ($l=0, 1, 2, \cdots$ 是整数) 的贝塞耳函数很重要, 因为波动方程在球极坐标中用分离变量法求解时,会出现这类贝塞耳函数. 通常采用四种标准型式①

$$j_l(z)=\sqrt{\frac{\pi z}{2}}\,J_{l+\frac{1}{2}}(z); \tag{15}$$

$$n_l(z)=\sqrt{\frac{\pi z}{2}}\,N_{l+\frac{1}{2}}(z)=(-1)^{l+1}\sqrt{\frac{\pi z}{2}}\,J_{-(l+\frac{1}{2})}(z); \tag{16}$$

$$h_l^{(1)}(z)=j_l(z)-in_l(z);\quad h_l^{(2)}(z)=j_l(z)-in_l(z). \tag{17}$$

它们是微分方程

$$u''+\left(1-\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{z^2}\right)u=0 \tag{18}$$

的解,并有非常简单的渐近行为:

$$\begin{gathered} j_l(z)\to\sin\left(z-\frac{l\pi}{2}\right);\quad n_l(z)\to-\cos\left(z-\frac{l\pi}{2}\right); \\ h_l^{(1)}\to i^{-(l+1)}e^{iz};\qquad h_l^{(2)}(z)\to i^{l+1}e^{-iz}. \end{gathered} \tag{19}$$

最重要的朗斯基行列式是

---

① 这里用 j_l 等表示的函数在文献中常常用 $\hat{j}_l$ 等等来表示,而 $\hat{j}_l=\frac{1}{z}j_l$. 其优点是,这样一来, $\hat{h}_l^{(1,2)}(z)=\frac{1}{z}h_l^{(1,2)}(z)$ 就变成向外和向内的球面波.

$$j_l n_l' - n_l j_l' = 1;\ h_l^{(1)} h_l^{(2)\prime} - h_l^{(2)} h_l^{(1)\prime} = -2i. \tag{20}$$

对于 $|z| \ll l+\frac{1}{2}$，有

$$j_l(z) \simeq \frac{2^l l!}{(2l+1)!} z^{l+1};\quad n_l(z) = -\frac{(2l)!}{2^l l!} z^{-l}. \tag{21}$$

递推关系. 对于由(15)—(17)式所定义的四类函数中的每一类，都有下列关系式：

$$u_{l+1} = \frac{2l+1}{z} u_l - u_{l-1};\quad u_{l+1} = \frac{l+1}{z} u_l - u_l'. \tag{22}$$

也可以用第一个关系式来构造负 l 的函数.

球贝塞耳函数是初等函数，其中最简单的一些汇集如下：

$$j_0 = \sin z; \qquad n_0 = -\cos z;$$

$$j_1 = \frac{\sin z}{z} - \cos z; \qquad n_1 = -\frac{\cos z}{z} - \sin z;$$

$$j_2 = \left(\frac{3}{z^2} - 1\right)\sin z - \frac{3}{z}\cos z; \quad n_2 = -\left(\frac{3}{z^2} - 1\right)\cos z - \frac{3}{z}\sin z;$$

$$h_0^{(1)} = -ie^{iz}; \qquad h_0^{(2)} = ie^{iz};$$

$$h_1^{(1)} = \left(-\frac{i}{z} - 1\right)e^{iz}; \qquad h_1^{(2)} = \left(\frac{i}{z} - 1\right)e^{-iz};$$

$$h_2^{(1)} = \left(-\frac{3i}{z^2} - \frac{3}{z} + i\right)e^{iz}; \quad h_2^{(2)} = \left(\frac{3i}{z^2} - \frac{3}{z} - i\right)e^{-iz}.$$

勒让德函数

微分方程

$$(1-z^2)u'' - 2zu' + \nu(\nu+1)u = 0 \tag{1}$$

是在 $z = \pm 1$ 和 ∞ 处具有奇异性的超几何类型的方程. 它的完全解可写成

$$u_\nu = A\,{}_2F_1\left(-\nu,\ \nu+1,\ 1;\ \frac{1-z}{2}\right)$$
$$+ Bz^{-\nu-1}\,{}_2F_1\left(\frac{\nu}{2}+1,\ \frac{\nu}{2}+\frac{1}{2},\ \nu+\frac{3}{2};\ \frac{1}{z^2}\right) \tag{2}$$

其中 A 的因子称为第一类勒让德函数，$P_\nu(z)$；B 的因子（归一化因子除外）称为第二类勒让德函数，$Q_\nu(z)$.

如果 ν 是整数，$l=0, 1, 2, \cdots$，第一类函数就变成一个多项式. 对于 $z=x$ 是实数，且 $|x|\leqslant 1$ 或 $x=\cos\vartheta$，勒让德多项式有简单的几何意义，并与球谐函数有如下的关系：

$$P_l(\cos\vartheta)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,Y_{l,0}. \tag{3}$$

勒让德多项式的性质. 它们构成一个正交函数系：

$$\int_{-1}^{+1} dx\,P_l(x)P_\nu(x)=\frac{1}{l+\frac{1}{2}}\delta_{l\nu}. \tag{4}$$

最低阶的几个多项式是

$$\begin{aligned} &P_0(x)=1;\ P_1(x)=x;\ P_2(x)=\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2};\\ &P_3(x)=\frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x;\ \ P_4(x)=\frac{35}{8}x^4-\frac{15}{4}x^2+\frac{3}{8}. \end{aligned} \tag{5}$$

它们或者是 x 的偶函数，或者是 x 的奇函数，取决于指标 l 是偶还是奇. 因此

$$P_l(-x)=(-1)^lP_l(x). \tag{6}$$

l 大于 1 的高阶多项式可以由下列递推关系导出：

$$(l+1)P_{l+1}(x)+lP_{l-1}(x)=(2l+1)xP_l(x). \tag{7}$$

微商与多项式的关系是：

$$(1-x^2)P_l'=l(P_{l-1}-xP_l)=(l+1)(xP_l-P_{l+1}). \tag{8a}$$

因而得到

$$(2l+1)P_l=P_{l+1}'-P_{l-1}'. \tag{8b}$$

在 $x=\pm 1$ 处有

$$P_l(\pm 1)=(-1)^l; \tag{9a}$$

在 $x=\pm 1$ 处，P_l 的 n 阶微商是

$$\frac{d^nP_l(\pm 1)}{dx^n}=(\mp 1)^{l+n}\frac{(l+n)!}{2^n n!\,(l-n)!}. \tag{9b}$$

用(2)式定义的多项式，当 $x=\cos\vartheta$ 时，可以写成

$$P_l(\cos\vartheta)={}_2F_1\left(l+1,\ -l,\ 1;\ \sin^2\frac{\vartheta}{2}\right)$$
$$=\sum_{n=0}^{l}(-1)^n\frac{(l+n)!}{n!^2(l-n)!}\sin^{2n}\frac{\vartheta}{2}$$
$$=1-\frac{l(l+1)}{(1!)^2}\sin^2\frac{\vartheta}{2}+\frac{(l-1)l(l+1)(l+2)}{(2!)^2}\sin^4\frac{\vartheta}{2}+\cdots \tag{10}$$

如果 $l\gg1$，并且 $\left|\sin\frac{\vartheta}{2}\right|$ 是 $\frac{1}{l}$ 的量级，则上面的级数简化为贝塞耳级数，于是得到

$$P_l(\cos\vartheta)\simeq J_0\left[(2l+1)\sin\frac{\vartheta}{2}\right], \tag{11}$$

其误差是 $1/l^2$ 的量级．即使对于大的 ϑ，近似公式 (11) 仍能相当精确地给出 P_l 的零点．例如 $l=10$，近似曲线与精确曲线的比较已画在问题 104 图 55 中．

关于几何关系，参见球谐函数．

第一类勒让德函数．展开．如果 ν 不是整数，展开式(10)不再是有限项，因而 $P_\nu(x)$ 变成在 $x=\pm1$ 处具有奇异性的超越函数．然而它可以展成勒让德多项式的级数

$$P_\nu(x)=\frac{\sin\pi\nu}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n(2n+1)}{(\nu-n)(\nu+n+1)}P_n(x). \tag{12}$$

这个展开是如下普遍展开的一个特殊情形

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)f_nP_n(x), \tag{13a}$$

其中

$$f_n=\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}dx\,f(x)P_n(x); \tag{13b}$$

由于勒让德多项式构成一个完备的正交系，所以上述展开总是可能的．

这类展开中常用的有

$$e^{ixy}=\frac{1}{y}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(y)\,P_l(x); \tag{14}$$

$$\frac{\sin\left(y\sqrt{2(1-x)}\right)}{y\sqrt{2(1-x)}}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,j_l^2(y)\,P_l(x). \tag{15}$$

级数(14)和(15)通常与 $y=kr$ 和 $x=\cos\vartheta$ 并用，于是 $y\sqrt{2(1-x)}=2kr\sin\frac{\vartheta}{2}$，它们对所有的实 y 都适用。另一个重要的例子甚至可以用来作为勒让德多项式的定义：

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xy+y^2}}=\sum_{n=0}^{\infty}y^nP_n(x),\quad \text{如果}|y|<1. \tag{16}$$

第二类勒让德多项式. 除了 -1 到 $+1$ 之间的实数外，对任意复数 z，展开式

$$\frac{1}{z-x}=\sum_{n=0}^{n}(2n+1)Q_n(z)\,P_n(x) \tag{16a}$$

给出

$$Q_n(z)=\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}\frac{dx\,P_n(x)}{z-x}. \tag{16b}$$

函数 $Q_n(z)$ 称为第二类勒让德多项式. 从(16a)式对于 z 和 x 的对称性立刻可知，它们满足多项式 $P_n(x)$ 的微分方程(1). 然而 $z=\pm1$ 是 $Q_n(z)$ 的具有对数奇异性的分支点. 最简单的一些 $Q_n(z)$ 是

$$\begin{aligned}&Q_0(z)=\frac{1}{2}\log\frac{z+1}{z-1};\ Q_1(z)=P_1(z)Q_0(z)-1;\\&Q_2(z)=P_2(z)Q_0(z)-\frac{3}{2}z.\end{aligned} \tag{17}$$

更高阶的 Q_n 可以由递推关系(7)导出，(7)式不仅适用于 P_n，也适用于 Q_n. 高阶 Q_n 的普遍形式是

$$Q_n(z)=P_n(z)Q_0(z)-W_{n-1}(z),$$

其中 W_{n-1} 是一个 $n-1$ 次的多项式，W_{n-1} 是奇或偶取决于指标 n 是偶或奇.

球 谐 函 数

在球极坐标

$$x=r\sin\vartheta\cos\varphi;\ y=r\sin\vartheta\sin\varphi;\ z=r\cos\vartheta \tag{1}$$

中(z 是极轴)，波动方程分离变量后，解的角向部分满足微分方程

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}+l(l+1)u=0, \tag{2}$$

其中分离参数 l 是整数，$l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$. 进一步分离变量

$$u=\Theta(\vartheta)e^{im\varphi} \tag{3a}$$

$m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$，得到 $\Theta(\vartheta)$ 满足的方程

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\Theta}{d\vartheta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right]\Theta(\vartheta)=0, \tag{3b}$$

或利用新变量

$$t=\frac{z}{r}=\cos\vartheta,$$

则(3b)式化为

$$(1-t^2)\frac{d^2\Theta}{dt^2}-2t\frac{d\Theta}{dt}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-t^2}\right]\Theta=0. \tag{3c}$$

这是一个比勒让德多项式 $P_l(t)$ 满足的方程稍许普遍化的微分方程，当 $m=0$ 时，它就过渡到勒让德方程. 但是对于 $m\neq0$，它仍然是超几何类型的方程. 对于 $m\geqslant0$，它唯一的正则解，在任意归一化下，可以写成

$$\Theta_{l,m}=(1-t^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^mP_l(t)}{dt^m}. \tag{3d}$$

并且 $\Theta_{l,-m}$ 是同样的函数. 由于多项式 P_l 最多只能微分 l 次，$(l+1)$ 次以及更高次的微分均等于零，因此对于每一个 l 值，存在 $2l+1$ 个具有整数 $|m|\leqslant l$ 的正则解.

关于归一化，仍可自由选择. 我们取最常用的形式，这种形式最好地反映了这些在整个单位球面上为正则的解的几何意义

$$Y_{l,m}(\vartheta,\ \varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathscr{P}_l^m(\vartheta)e^{im\varphi} \tag{4}$$

它满足

$$\oint d\Omega|Y_{l,m}|^2=1 \tag{5}$$

或

$$\int_0^{2\pi}d\vartheta\sin\vartheta|\mathscr{P}_l^m(\vartheta)|^2=1 \tag{6}$$

于是归一化的(3d)(对于$m\geqslant 0$)必须是

$$\mathscr{P}_l^m=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ (1-t^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^mP_l(t)}{dt^m}. \tag{7}$$

为了包括$m<0$的情况,定义

$$\mathscr{P}_l^{-m}(\vartheta)=(-1)^m\mathscr{P}_l^m(\vartheta). \tag{8}$$

在这种标准形式下，从$l=0$到$l=3$为止的球谐函数$Y_{l,m}$已经列在问题67的表b中．对于$m=0$,得出下列有用的关系:

$$\mathscr{P}_l^0=\sqrt{l+\frac{1}{2}}\,P_l\quad\text{或}\quad Y_{l,0}=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,P_l. \tag{9}$$

递推关系．在具有相邻l和m值的球谐函数之间有几个重要的关系:

$$\sin\vartheta e^{i\varphi}Y_{l,m}=a_{l,m}Y_{l+1,m+1}-a_{l-1,-m-1}Y_{l-1,m+1}; \tag{10a}$$

$$\sin\vartheta e^{-i\varphi}Y_{l,m}=-a_{l,-m}Y_{l+1,m-1}+a_{l-1,m-1}Y_{l-1,m-1}; \tag{10b}$$

$$\cos\vartheta Y_{l,m}=b_{l,m}Y_{l+1,m}+b_{l-1,m}Y_{l-1,m}, \tag{11}$$

其中缩写

$$\left.\begin{aligned}a_{l,m}&=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}};\\ b_{l,m}&=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}.\end{aligned}\right\} \tag{12}$$

重复应用(10)和(11)式，可以得到$\sin\vartheta$和$\cos\vartheta$的高次幂与$Y_{l,m}$的乘积,因而右边可能出现与l和m相差超过±1的指标.

微商．如果将算符

$$r\left(\frac{\partial}{\partial x}\pm i\frac{\partial}{\partial y}\right)=e^{\pm i\varphi}\left\{\sin\vartheta\, r\frac{\partial}{\partial r}+\cos\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\pm\frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$$

和

$$r\frac{\partial}{\partial z}=\cos\vartheta\, r\frac{\partial}{\partial r}-\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} \tag{13}$$

作用在球谐函数上，则得如下的结果：

$$r\left(\frac{\partial}{\partial x}\pm i\frac{\partial}{\partial y}\right)Y_{l,m}=\mp la_{l,\pm m}Y_{l+1,m\pm1}$$
$$\mp(l+1)a_{l-1,\mp m-1}Y_{l-1,m\pm1}$$

$$r\frac{\partial}{\partial z}Y_{l,m}=-b_{l,m}Y_{l+1,m}+(l+1)b_{l-1,m}Y_{l-1,m}, \tag{14}$$

其中 $a_{l,m}$ 和 $b_{l,m}$ 由(12)式定义.

在角动量理论中，L_x, L_y, L_z 这三个厄密算符起着重大的作用，其中

$$L_z=-i\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right), \tag{15}$$

L_x, L_y 是上式的循环置换. 在球极坐标中，可以写出

$$L_\pm=L_x\pm iL_y=ie^{\pm i\varphi}\left(\mp i\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{16a}$$

和

$$L_z=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{16b}$$

L_+ 和 L_- 对于球谐函数的作用相当于移位算符，它们使指标 m 升高或降低 1：

$$L_+Y_{l,m}=\mp\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,Y_{l,m+1}, \tag{17a}$$

$$L_-Y_{l,m}=-\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,Y_{l,m-1}. \tag{17b}$$

另一方面，$Y_{l,m}$ 是 L_z 的本征函数：

$$L_zY_{l,m}=mY_{l,m}. \tag{18}$$

$Y_{l,m}$ 也是二阶算符

$$L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2=\frac{1}{2}(L_+L_-+L_-L_+)+L_z^2 \tag{19}$$

的本征函数，即

$$L^2Y_{l,m}=l(l+1)Y_{l,m}. \tag{20}$$

此外，还有关系式

$$L_-L_+Y_{l,m}=[l(l+1)-m(m+1)]Y_{l,m}, \tag{21a}$$

$$L_+L_-Y_{l,m}=[l(l+1)-m(m-1)]Y_{l,m}. \tag{21b}$$

这里定义的算符 L_i 除相差一个因子 $\hbar$ 外，与本书正文中所用的角动量分量算符相同.

正交性和展开式. 球谐函数满足正交归一化关系

$$\oint d\Omega\, Y^*_{l',m'}Y_{l,m}=\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{22}$$

它们在下述意义上构成一个完备的函数系：在单位球面上正则的任意函数，可以展开成级数：

$$f(\vartheta,\ \varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}f_{l,m}Y_{l,m}(\vartheta,\ \varphi) \tag{23a}$$

其系数为

$$f_{l,m}=\oint d\Omega\, Y^*_{l,m}(\vartheta,\ \varphi)f(\vartheta,\ \varphi). \tag{23b}$$

下面是几个重要的展开式：

1. 勒让德多项式 $P_l(\cos\gamma)$ 的展开，其中 γ 是单位球上 $(\vartheta,\ \varphi)$ 点和 $(\vartheta',\ \varphi')$ 点方向之间的夹角.

$$P_l(\cos\gamma)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l}Y^*_{l,m}(\vartheta',\ \varphi')Y_{l,m}(\vartheta,\ \varphi) \tag{24}$$

这个公式等价于极轴转动 γ 角所给出的一个变换. 它只混合 l 相同的球谐函数. 这公式也称为加法定理.

2. 平面波. 如果平面波沿极轴方向传播，则只出现下列勒让德多项式：

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l j_l(kr)Y_{l,0}(\vartheta). \tag{25}$$

在问题 81 中，曾以较大的篇幅证明过这个公式. 另外，由上式反

过来可得球贝塞耳函数的一个积分表示：

$$j_l(z)=i^{-l}\frac{z}{2}\int_{-1}^{+1}dt\,e^{izt}P_l(t). \tag{26}$$

如果平面波沿着极角为 Θ, Φ 的矢量 $\boldsymbol{k}$ 方向传播，展开式 (25) 可推广为

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=\frac{4\pi}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}i^l j_l(kr)Y_{l,m}^{*}(\Theta,\Phi)Y_{l,m}(\vartheta,\varphi). \tag{27}$$

3．球面波(被用作为波动方程的格林函数)．设 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 是两个矢量，它们的方向由极角 ϑ, φ 和 ϑ', φ' 所确定，并且 γ 是 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 之间的夹角，则

$$\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{1}{rr'}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\Gamma_l(r,r')Y_{l,0}(\cos\gamma) \tag{28a}$$

其中

$$\Gamma_l(r,r')=\begin{cases}\dfrac{i}{k}\,j_l(kr)h_l^{(1)}(kr') & \text{对于 } r<r',\\[2ex] \dfrac{i}{k}\,j_l(kr')h_l^{(1)}(kr) & \text{对于 } r>r'.\end{cases} \tag{28b}$$

在 $k\to 0$ 的极限情形下，得出熟知的公式：

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\begin{cases}\dfrac{1}{r'}\displaystyle\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r}{r'}\right)^l P_l(\cos\gamma) & \text{对于 } r<r',\\[2ex] \dfrac{1}{r}\displaystyle\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos\gamma) & \text{对于 } r>r'\end{cases} \tag{29}$$

超 几 何 级 数

微分方程

$$\begin{aligned}&z(1-z)v''+\{(c-2\lambda)-(a+b+1-2\lambda-2\mu)z\}v'\\&+\left\{\frac{\lambda(\lambda-c+1)}{z}+\frac{\mu(\mu-a-b-c)}{1-z}\right.\\&\left.-[(\lambda+\mu)(\lambda+\mu-a-b)+ab]\right\}v=0\end{aligned} \tag{1}$$

只在 $z=0$, 1, ∞ 处有正则奇异性. 令

$$v(z)=z^{\lambda}(1-z)^{\mu}u(z), \tag{2}$$

可将(1)式化为标准形式

$$z(1-z)u''+[c-(a+b+1)z]u'-abu=0. \tag{3}$$

上式称为超几何或高斯微分方程. 对于三个参数 a、b、c 的一切值, 除了 $c=-n(n=0, 1, 2, \cdots)$ 以外, 这方程有一个在 $z=0$ 处正则且不为零的解; 当解按 $u(0)=1$ 归一化时, 这个解就称为超几何级数 ${}_2F_1(a, b, c; z)$. 利用在原点附近的级数展开, 求解微分方程(3), 得到①

$$\begin{aligned}{}_2F_1(a, b, c, z)=1+\frac{ab}{c}\frac{z}{1!}+\frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!}\\ +\frac{a(a+1)(a+2)b(b+1)(b+2)}{c(c+1)(c+2)}\frac{z^3}{3!}+\cdots\end{aligned} \tag{4a}$$

或

$${}_2F_1(a, b, c, z)=\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)n!}z^n \tag{4b}$$

这个函数对于参数 a 和 b 的交换是不变的. 如果 $a=-n$, 或 $b=-n(n=0, 1, 2, \cdots)$, 它变成一个 n 次多项式, 称为雅科毕(Jacobi)多项式, 定义是

$$J_n(p, q; z)={}_2F_1(-n, p+n; q; z).$$

这些多项式按照

$$\int_0^1 dz\, z^{q-1}(1-z)^{p-q}J_mJ_n=0 \quad \text{当 } m\neq n$$

构成一个正交系.

当 $c=-n$, 超几何级数不存在; 然而, 在这种情况下, 极限过

① 记号 ${}_nF_m$ 是波哈末(Pochammer)引入的, 他把超几何级数推广为带有 $n+m$ 个参数的 ${}_nF_m$, 这些参数的 n 个乘积出现在级数的分子上, 而 m 个乘积出现在分母上, 正如 ${}_2F_1$ 的下标 2 和 1 在(4a)右边所体现的一样. 在本书中, 只需要 ${}_2F_1$ 和合流级数 ${}_1F_1$.

程

$$\lim_{c\to -n}\frac{{}_2F_1(a,\ b,\ c,\ z)}{\Gamma(c)} \tag{5}$$
$$=\frac{\Gamma(a+n+1)\Gamma(b+n+1)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\frac{z^{n+1}}{(n+1)!}$$
$$\times {}_2F_1(a+n+1,\ b+n+1,\ n+2;\ z)$$

给出微分方程(3)的一个解.

如果三个参数 a, b, c 中没有任何一个是零或负整数,则级数(4a、b)对于 $|z|<1$ 是绝对收敛的. 它向圆 $|z|<1$ 外部的解析开拓可以唯一地通过 $z=1$ 到 $z=\infty$ 的分支割线作出.

下列公式可以作为它在 $|z|<1$ 的外部的解析开拓:

$${}_2F_1(a,\ b,\ c;\ z)=\frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}{}_2F_1(a,\ b,\ a+b-c+1;\ 1-z) \tag{6}$$
$$+\frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}(1-z)^{c-a-b}$$
$$\times {}_2F_1(c-a,\ c-b,\ c-a-b+1;\ 1-z)$$

和

$${}_2F_1(a,\ b,\ c;\ z)=\frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-z)^{-a}$$
$$\times {}_2F_1\left(a,\ a-c+1,\ a-b+1;\ \frac{1}{z}\right) \tag{7}$$
$$+\frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-z)^{-b}{}_2F_1\left(b,\ b-c+1,\ b-a+1;\ \frac{1}{z}\right).$$

(7)式确定了 ${}_2F_1$ 在 $z\to\infty$ 时的渐近行为:

$${}_2F_1(a,\ b,\ c,\ z)\to\frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-z)^{-a}$$
$$+\frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-z)^{-b}. \tag{8}$$

在 $|z|<1$ 时,超几何微分方程的一般解是

$$u=C_1{}_2F_1(a,\ b,\ c,\ z)+C_2z^{1-c}{}_2F_1(a+1-c,\ b+1-c,\ 2-c;\ z). \tag{9}$$

由(5)式容易看出，仅对于整数 $c=0, \pm1, \pm2, \cdots$，(9)式中的二个特解才完全相同. 第二个解在 $z=0$ 处有一个对数奇异性.

对于超几何级数的实际运用最重要的一些公式汇集如下：

$$
\begin{aligned}
{}_2F_1(a, b, c, z) &= \frac{a(c-b)}{c(a-b)}\,{}_2F_1(a+1, b, c+1; z) \\
&\quad + \frac{b(c-a)}{c(b-a)}\,{}_2F_1(a, b+1, c+1; z) \\
&= \frac{c-a}{c}\,{}_2F_1(a, b, c+1; z) \\
&\quad + \frac{a}{c}\,{}_2F_1(a+1, b, c+1; z),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
z\,{}_2F_1(a, b, c, z) &= \frac{c-1}{a-b}\left[{}_2F_1(a-1, b, c-1; z)\right. \\
&\quad \left. - {}_2F_1(a, b-1, c-1; z)\right] \\
&= \frac{c-1}{a-1}\left[{}_2F_1(a-1, b, c-1; z)\right. \\
&\quad \left. - {}_2F_1(a-1, b-1, c-1; z)\right] \\
&= \frac{c-a}{a-b}\,{}_2F_1(a-1, b, c; z) \\
&\quad + \frac{c-b}{b-a}\,{}_2F_1(a, b-1, c; z) + {}_2F_1(a, b, c; z),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(1-z)\,{}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{c-1}{a-1}\,{}_2F_1(a-1, b-1, c-1; z) \\
&\quad + \frac{a-c}{a-1}\,{}_2F_1(a-1, b, c; z).
\end{aligned}
$$

导数：

$$
\frac{d}{dz}\,{}_2F_1(a, b, c, z) = \frac{ab}{c}\,{}_2F_1(a+1, b+1, c+1; z)
$$

$$
\begin{aligned}
z(1-z)\frac{d}{dz}\,{}_2F_1(a, b, c, z) &= \frac{a(c-a)}{a-b}\,{}_2F_1(a-1, b, c; z) \\
&\quad + \frac{b(c-b)}{b-a}\,{}_2F_1(a, b-1, c; z)
\end{aligned}
$$

$$+\frac{b(c-b)-a(c-a)}{a-b}\,{}_2F_1(a,\ b,\ c;\ z)$$

合流级数

如果在超几何微分方程中，取极限 $b\to\infty$，$z=x/b$，则得库末(Kummer)微分方程

$$x\frac{d^2u}{dx^2}+(c-x)\frac{du}{dx}-au=0 \tag{1}$$

原来 $z=1$ 处的奇异点已移到 $x=\infty$ 处．因此在复 x 平面上，$x=0$ 处有一个正则奇异点，但是在 $x=\infty$ 处的非正则奇异点是由 $z=1$ 和 $z=\infty$ 处的两个奇异点汇合而成的．因此方程的解称为合流(或汇合)超几何级数．

(1)式的通解是

$$u=C_1\,{}_1F_1(a,\ c;\ x)+C_2x^{1-c}\,{}_1F_1(a-c+1,\ 2-c;\ x) \tag{2}$$

其中 ${}_1F_1$ 是由下式定义的所谓合流级数：

$${}_1F_1(a,\ c;\ z)=1+\frac{a}{c}\,\frac{z}{1!}+\frac{a(a+1)}{c(c+1)}\,\frac{z^2}{2!}+\frac{a(a+1)(a+2)}{c(c+1)(c+2)}\,\frac{z^3}{3!}+\cdots \tag{3a}$$

或

$${}_1F_1(a,\ c;\ z)=\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)}\,\frac{z^n}{n!}. \tag{3b}$$

这个级数在整个 z 平面上绝对收敛．为了使它成为单值的，必须从 $z=0$ 到 $z=\infty$ 作一分支割线，在本书所用的标准记号下，这条割线沿着正虚轴方向．

级数 (3a, b) 只在 $c=-n(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$ 时才是没有定义的，但是，这时

$$\lim_{c\to -n}\frac{{}_1F_1(a,\ c;\ z)}{\Gamma(c)}=\frac{\Gamma(a+n+1)}{\Gamma(a)}\,\frac{z^{n+1}}{(n+1)!}\,{}_1F_1(a+n+1,\ n+2;\ z) \tag{4}$$

是(1)式的一个解(用 z 代替 x).

合流级数在 $|z|\to\infty$ 时的渐近行为是

$$ {}_1F_1(a,\ c;\ z)\to e^{-i\pi a}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}\ z^{-a}+\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}\ e^z z^{a-c}. \tag{5}$$

上式对于 $a=-n$, $n=0$, 1, 2, … 不适用, 这时, 按照(3), 函数 ${}_1F_1(-n,\ c;\ z)$变成一个 n 次多项式. 这类多项式中特别重要的有拉盖尔多项式

$$ L_n^{(m)}(z)=\frac{(n+m)!}{n!m!}\ {}_1F_1(-n,\ m+1;\ z) \tag{6}$$

和厄密多项式(参见问题 30)

$$\left.\begin{aligned} H_{2n}(z)&=(-1)^n\frac{(2n)!}{n!}\ {}_1F_1\left(-n,\ \frac{1}{2};\ z^2\right),\\ H_{2n+1}(z)&=(-1)^n\frac{(2n+1)!}{n!}\,2z\,{}_1F_1\left(-n,\ \frac{3}{2};\ z^2\right).\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

最后,我们再列出一些有关合流级数的重要公式:

$$ {}_1F_1(a,\ c;\ z)=\frac{a}{c}\ {}_1F_1(a+1,\ c+1;\ z)+\frac{c-a}{c}\ {}_1F_1(a,\ c+1;\ z)$$

$$=e^z\,{}_1F_1(c-a,\ c;\ z);$$

$$ z\frac{d}{dz}\ {}_1F_1(a,\ c;\ z)=a\{{}_1F_1(a+1,\ c;\ z)-{}_1F_1(a,\ c;\ z)\};$$

$$\frac{d}{dz}\ {}_1F_1(a,\ c;\ z)=\frac{a}{c}\ {}_1F_1(a+1,\ c+1;\ z).$$

一些由积分定义的函数

误差积分以及有关的函数. 误差积分由下式定义

$$\operatorname{erfc}z=\int_z^\infty dt\ e^{-t^2};$$

作为另一种选择,也常采用定义

$$\operatorname{erf}z=\int_0^z dt\ e^{-t^2}=z\,{}_1F_1\left(\frac{1}{2},\ \frac{3}{2};\ -z^2\right).$$

两个积分之和正好是一个完整的积分

$$\operatorname{erfc} z+\operatorname{erf} z=\int_0^\infty dt\, e^{-t^2}=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

erf$z$ 的幂级数展开是

$$\operatorname{erf} z=z-\frac{z^3}{1!3}+\frac{z^5}{2!5}-\cdots;$$

对于 $z\gg 1$ 的实正自变量，函数 erfc$z$ 可以表示为半收敛级数

$$\operatorname{erfc} z\to\frac{e^{-z^2}}{2z}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{(2n)!}{2^{2n}\cdot n!}z^{-2n}=\frac{e^{-z^2}}{2z}\left(1-\frac{1}{2z^2}+\frac{3}{4z^4}-\cdots\right).$$

由恒等式

$$F(z,\ \beta)=\int_z^\infty dt\, e^{-\beta t^2}=\beta^{-\frac{1}{2}}\operatorname{erfc}(\sqrt{\beta}z)$$

微分后可得

$$\frac{\partial F}{\partial\beta}=-\int_z^\infty dt\, t^2e^{-\beta t^2}=-\frac{1}{2}\beta^{-\frac{3}{2}}\operatorname{erfc}(\sqrt{\beta}z)-\frac{z}{2\beta}e^{-\beta z^2}$$

因此，当 $\beta=1$ 时，得到简化公式

$$\int_z^\infty dt\, t^2e^{-t^2}=\frac{1}{2}\operatorname{erfc} z+\frac{z}{2}e^{-z^2}$$

用这种方法重复进行微分，则所有形如

$$\int_z^\infty dt\, t^{2n}e^{-t^2}$$

的积分最后都可化为误差函数. 对于 $z=0$，给出下列完全积分的特殊公式

$$\int_0^\infty dt\, t^{2n}e^{-t^2}=\sqrt{\pi}\,\frac{(2n-1)!}{2^{2n}(n-1)!}.$$

如果取 $t^2=x$，上式可以写成一个欧拉积分，于是

$$\int_0^\infty dt\, t^{2n}e^{-t^2}=\frac{1}{2}\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

指数积分. 这函数的定义是

$$\operatorname{Ei} z=\int_{-\infty}^{z}\frac{dt}{t}e^t,$$

并且对于负的实 $z=-x$ 值特别重要，这时我们写

$$\mathrm{E}_1(x)=-\mathrm{Ei}(-x)=\int_x^\infty \frac{dt}{t}\,e^{-t}$$

它的幂级数展开是

$$\mathrm{E}_1(x)=-C+\log\frac{1}{x}+x-\frac{x^2}{2!2}+\frac{x^3}{3!3}-\cdots$$

其中 c 是欧拉常数

$$C=\int_0^\infty dt\,e^{-t}\log\frac{1}{t}=0.577215\cdots$$

对于 $x\gg 1$，E_1 可展开为下面的半收敛级数.

$$\mathrm{E}_1(x)=\frac{e^{-x}}{x}\left(1-\frac{1!}{x}+\frac{2!}{x^2}-\cdots\right)$$

指数积分可以推广为

$$\mathrm{E}_n(x)=\int_x^\infty \frac{dt}{t^n}\,e^{-t}$$

利用分部积分，按公式

$$\mathrm{E}_n(x)=\frac{1}{n-1}\left[x^{n-1}e^{-x}-\mathrm{E}_{n-1}(x)\right]$$

最终可将这些积分化为 $\mathrm{E}_1(x)$.

索　引

(I, II 两 卷)

数字表示第几个问题，不是指页数. 卷 I 包括问题 1—128, 卷 II 包括问题 129—219. 字母 A 表示卷 II 末尾的数学附录.

一　划

一维平面波 16
一维散射问题 21, 22, 23
一维狄拉克问题中的螺旋性 197
一维狄拉克问题中的旋量代数性质 197

二　划

几率守恒 1
几率密度 1. 16, 17, 126
几率流密度 1, 16, 17, 80, 126
二原子分子 69, 70, 71
二电子原子(见氦, 即 154, 155, 156)
二电子态的自旋 139
二级球谐函数, 张量性质 54
二能级系统 179, 180
二能级系统的周期性微扰 180
二能级系统的微扰理论 179, 180
二维问题中的幺正矩阵 130
二维转子的斯塔克效应 43
二维斯塔克效应的微扰理论 43
广延电荷的库仑散射 108, 112

三　划

幺正变换 10, 50
三原子线型分子 149
三原子分子的振动模式 149
三原子线型分子的价振动 149
三原子分子的质心运动 149
三电子态的自旋 146
三电子原子 157, 158
三粒子自旋函数的对称化 146
三维转子的斯塔克效应 79
三维斯塔克效应的微扰理论 79
三维格林函数的分波展开 94
三重态的自旋函数 139
三重态的张量力性质 143, 144
与托马斯费密微分方程等价的变分法 177
马提厄方程 148
马提厄方程的本征值 148

四　划

中子被氢分子散射 147
中性氢分子的平衡距离 163

索　引

(I, II 两 卷)

数字表示第几个问题，不是指页数. 卷 I 包括问题 1—128, 卷 II 包括问题 129—219. 字母 A 表示卷 II 末尾的数学附录.

一　划

一维平面波 16
一维散射问题 21, 22, 23
一维狄拉克问题中的螺旋性 197
一维狄拉克问题中的旋量代数性质 197

二　划

几率守恒 1
几率密度 1. 16, 17, 126
几率流密度 1, 16, 17, 80, 126
二原子分子 69, 70, 71
二电子原子(见氦, 即 154, 155, 156)
二电子态的自旋 139
二级球谐函数, 张量性质 54
二能级系统 179, 180
二能级系统的周期性微扰 180
二能级系统的微扰理论 179, 180
二维问题中的幺正矩阵 130
二维转子的斯塔克效应 43
二维斯塔克效应的微扰理论 43
广延电荷的库仑散射 108, 112

三　划

幺正变换 10, 50
三原子线型分子 149
三原子分子的振动模式 149
三原子线型分子的价振动 149
三原子分子的质心运动 149
三电子态的自旋 146
三电子原子 157, 158
三粒子自旋函数的对称化 146
三维转子的斯塔克效应 79
三维斯塔克效应的微扰理论 79
三维格林函数的分波展开 94
三重态的自旋函数 139
三重态的张量力性质 143, 144
与托马斯费密微分方程等价的变分法 177
马提厄方程 148
马提厄方程的本征值 148

四　划

中子被氢分子散射 147
中性氢分子的平衡距离 163

电荷守恒 1
电荷密度 1
电荷共轭 194
电四极矩 (见四极矩61)
电流密度 1, 213
电子的 g 因子 136
电子气的压力 167, 171
电子的自旋共振 138
电子结合中的同位素移动 73
电子的磁矩 136, 138
电子自旋角动量与轨道角动量的耦合 133
电子的内禀磁矩 136, 138
电介质极化率 159
电介质极化率的微扰理论 159
对易关系 7, 8
对称化核 94
对称陀螺 46
对称陀螺的能级 46
对称陀螺型的分子 46
对数相(位) 69, 110, 111, 112
对数微商 20, 22, 23, 82—86, 89, 92, 101

矢量粒子 52
矢势 125
矢势的平面波展开 212
布洛赫定理 28
布里渊区 29
布拉特-魏格纳公式 114
本征值的简并度 42, 66
本征值条件 18, 25
本底积分 113

卡洛盖罗方程 97, 100
卡洛盖罗方程的线性化近似 98, 99, 101, 102
汉克耳函数 63, 82, 83, 117, 185
汉克耳函数公式 A
归一化 1, 14, 15
归一化体积 183
白矮星 171
白矮星中的电子气 171
可观察量的重复测量 12
功函数 169
末态密度 183, 186, 211, 213
弗洛凯定理 28
卢瑟福散射 108, 110

六 划

光子的发射 213, 214
光子的发射几率 213
光的色散 187
光学定理 104
光波引起的微扰 186
光波的折射率 187
光电子的角分布 186
光电效应 186
自由落体的量子理论 40, 119
自旋为 1 的粒子 52
自旋矢量算符 129
自旋交换算符 140
自旋共振 138
自旋代数 (见克利福特代数 151, 141)
自旋代数的乘法表 131

自旋算符的希耳伯空间 129, 139
自旋算符的本征矢量 130
自旋分量的对易关系 129
自旋有关的有心力 140, 147
自旋有关的张量力 143
自旋态中的轨道角动量 133
自旋态磁矩的期待值 135
自旋轨道耦合 136
自旋轨道耦合哈密顿算符 136
自轭 (见厄密; 6, 31)
共振分母 182, 186, 187
共振场强 138
共振吸收 182
共振能级 27
共振散射 84, 86
动能密度 5
动能算符 13, 46, 49
动量密度 1
动量算符 3, 7, 8, 10
动量空间 14, 15, 34, 76, 77
动量空间中的谐振子 34
动量空间中的开普勒问题 78
动量空间中的有心力 76, 77, 91
动量空间中氢原子的本征函数 78
动量空间波函数的积分方程 14, 77
氘的光谱学发现 150
氘的有心力模型 72, 75
氘的硬心势 91, 92
氘的张量相互作用 144, 145
氘的束缚态和散射长度 147
氘核的四极矩 145
氘核的磁矩 145
氘的抗磁磁化率 160
氘的磁性 160
托马斯因子 136
托马斯-费密原子的梯兹近似 176—178
托马斯-费密近似下原子的总能量 174
托马斯-费密原子 172—178
托马斯-费密原子的阿马耳狄修正 173
托马斯-费密微分方程解的里兹近似 177
汤川吸引势的结合能 72
汤川势的散射 102, 106, 108
汤川势的散射长度 102
汤川势的相移 106
多体问题中的交换积分 153
多体系统的对称化 152
多变曲线 171
有效力程 88, 89
有限深方阱势 25, 63, 89
有心力场中的自旋电子 133, 201
有心力场中自旋电子态的四极矩 134
有心力场中的相对论性电子 201
有心力场对狄拉克电子的散射 206
合流级数 30, 42, 65, 67, 69, 70, 110, 111, 202, 203, 204
合流级数公式 A
仲氢的自旋函数 147
仲氢 155, 156
宇称 18-20, 22, 25, 26, 143

宇称混合算符 200
场致发射 169, 170
场致发射中的隧道效应 169, 170
负箝势的散射长度 99, 100
阴影效应 109
许温格变分原理 95
交换积分 44
好量子数 133
约化质量 72, 75, 150
行波 16
全反射 45
全同粒子卢瑟福散射 164
全同粒子卢瑟福散射的对称化 164, 165
全同粒子散射 164
伍德-萨克森势 64
同位素移动的微扰理论 73
扩散方程 16
地表上空引力场的能级 40, 119
伦纳德-琼斯势 104
闭壳组态 61
传导流的相对论性理论 199
曲线坐标 13, 46
刚性转子 43, 79

七　划

连续性方程 1, 21
连续谱 26, 219
角动量 4
角动量的对易关系 50, 51
角动量算符 42
角动量与张量的对易关系 53, 54
角动量与拉普拉斯算符 49
角动量的期待值 4, 58
角动量引起的磁矩 127
角动量希耳伯空间的构成 56
狄拉克方程的电荷共轭 194
狄拉克方程的迭代 189
狄拉克方程的洛仑兹不变性 191
狄拉克方程，一维问题 197, 207
狄拉克方程，宇称变换 193
狄拉克方程分为两个二分量方程 200
狄拉克方程的标准形式 189
狄拉克方程的哈密顿算符 189, 200
狄拉克微扰法 181, 182, 183
狄拉克粒子在势阶上的反射 207, 209
狄拉克粒子对势阶的透射 207
狄拉克理论中的标量 192
狄拉克理论中的张量 192
狄拉克理论中的矢量 192
狄拉克理论中的电流密度 189, 199, 207, 209
狄拉克理论中的势阶 207
狄拉克理论中的螺旋性算符 190
狄拉克理论中的赝标量 192, 193
狄拉克理论中的赝矢量 192, 193
狄拉克矩阵的反对易性质 189
狄拉克矩阵的标准表示 189
克利福特代数 192, 194, 197
克利福特数 191, 192
克莱因-戈登方程 189
克莱因-仁科公式 218

克莱因佯谬 202, 207
克拉策尔分子势 69
库末微分方程(见合流级数)
库仑力的维里定理 151, 175
库仑散射,反常散射 112
库仑散射的分波展开 111
库仑势的能级 67, 203
库仑激发 185
里卡提方程 115
里兹近似(氦态) 154, 156
里兹近似(中性氢分子) 163
里兹变分法 44, 72, 74, 75
两个质子间的短程吸引力 165
两粒子在圆周上的运动 148
两粒子自旋函数的对称化 139
两体问题的氢原子 150
韧致辐射 219
韧致辐射谱 219
韧致辐射截面 219
束缚态与低能散射 90, 147
束缚态开普勒问题的非相对论性理论 67
束缚态开普勒问题的相对论性理论 202
希耳伯空间 6, 10, 12, 31, 33, 50
希耳伯空间中的谐振子 31, 33
低能散射 83, 88, 89
形状因子 108
形状无关近似 88
折射率 187, 45, 115
折射定律 45, 208
极化流 199
极化率(电介质) 159
纽曼函数公式 A
纽曼级数 94, 105
坐标公式 A
时间反演 16
连续谱的 X 射线 219
抗磁性 123, 160
含时哈密顿算符 11
均匀电场中电子的运动 41
抛物线坐标 110, A
作用在粒子数上的算符 210
沙巴提尔变换 124
伽马函数公式 A

八　划

势的傅里叶变换 77
势壁(见势垒)
势垒 19, 21—23
势垒贯穿系数的 WKB 方法 169
势阱 18, 25, 62
势阱容量 25, 63, 68, 106
势阱大小(见势阱容量) 63
势阶 8
势能密度 5
势跃变上平面狄拉克波的退极化 208
转子 43, 79
转动下球谐函数的变换 55
转动群 46, 52
转动群的生成元 52
转矩 4
非谐振子 35, 69, 70

非谐振子的微扰理论 35
非谐振子的能级 35
非相对论性自旋粒子的平面波 137
非相对论性理论中的旋量 132
非齐次微分方程 94
非弹性散射 166
周期性立方体 15, 210
周期性微扰中的共振 180, 182
周期性微扰,光电效应 186
周期势 28, 29
泡利代数 131
泡利原理 152, 167
泡利矩阵 52, 129, 130, 189
泡利矩阵的反对易性质 131
波包 17
波数谱 17
波群 17
波算符的对易关系 210
径向动量算符 59
径向 WKB 函数 116
径向波函数的 WKB 方法 116
径向波函数的积分方程 94
直角势垒 23
直角势阱 25, 63
直角势阱的能级 18
直角势阱上的散射 89, 101
质量密度 1
质子-质子散射 165
质子-质子反常散射 165
质子-中子系统的散射长度 147
质心运动与内部运动的分离 150
经典回转点 40, 117—124
经典相互作用积分 44, 155, 156, 163
空间平均 3, 4, 5
空间平均值的经典力学 3, 4, 5
空间转动下的自旋矢量 132
金属中的传导电子 167, 168
金属中传导电子的电子气 167, 168
金属的顺磁磁化率 168
张量力 143
张量与角动量的对易子 53, 54
拉莫尔频率 138
拉盖尔多项式 A
规范变换 125, 126
线型分子的谐振动 149
变分近似 44, 72, 74, 75
范德瓦耳斯力 161
顶角 219
泊松方程 156, 172—174
欧勒角 46, 55
单态自旋函数 139
驻波 18
定态 16

九　划

氢原子 67
氢原子激发态的寿命 215
氢原子的相对论性理论 202, 203
氢原子的谱线强度 217
氢原子的本征函数(表) 67
氢原子的精细结构(非相对论性理论) 136
氢原子的精细结构(相对论性理论)

203
氢分子 44, 143, 163
氢星 171
氢的赖曼谱线 217
相角，共振时的行为 27
相位平均 58
相位函数 104, 124
相移 82, 84—87, 93
相移的逐级近似法 96, 97
相移的积分方程 94
相速度 16
相对论性自旋粒子的平面波 190
相对论性理论中轨道角动量的期待值 203
相对论性物质波的色散定律 189
费密能量 167, 168
费密量子化 210, 213
费密气体 167
费密气体中的态密度 167
费密气体的磁性 168
费涅耳反射公式 45
屏蔽 73
屏蔽常数 154—157, 160
屏蔽常数(X 射线) 178
屏蔽的氢函数 154—157, 160
屏蔽核的有效势 156
玻尔磁子 127
玻恩近似 94, 96—98, 102, 105—107, 183, 184, 211
玻恩积分，发散 105, 108
玻恩-奥本海默近似 44, 161, 163
玻恩散射的动量密度 184
玻色量子化 210, 213
指数势 75
指数势上的散射 107
指数势的相移 107
指数积分(公式) A
总角动量 133, 142, 201
总角动量的本征旋量 133, 137, 142, 201
总角动量的本征旋量的二重态 142
顺磁性 128, 168
顺磁共振 180
胡耳森势 68
胡耳森势的能级 68
复角动量 113
复合态 113, 114
重原子中 K 电子的屏蔽 178
重叠积分 44, 156, 158, 163
星体物质中的电离 171
测不准规则 17
洛仑兹协变量 192
带有分隔势壁的直角势阱的能级 19
误差积分 A
轴矢量 (见赝矢量 192, 193)
结合能 90
修正贝塞耳函数公式 A
点电荷的库仑散射 110, 111
统计方法 167—168

十 划

能量守恒 5
能量本征值(见能级)
能级 18, 19, 30, 38—40, 46, 62,

67—71, 119, 203
能级密度 26
能流矢量 5
能带 28, 29
能谱的带状结构 28, 29
振子(见谐振子,非谐振子,圆振子,球振子)
振子强度 187
振幅结构 26, 27
原子中的电子气(见托马斯-费密原子 172—178)
原子-原子相互作用的微扰理论 161, 162
原子基态中的两个电子 154
氦的基态 154
氦的激发态 155, 156
氦激发态的维里定理 155
氦激发态的交换积分 155, 156
氦和二电子离子的离解能 154, 155
氦基态的变分处理 154
朗德因子 135
朗斯基行列式 24, 28
朗格边界条件的 WKB 方法 117, 118
海森伯表象 10
海森伯测不准规则 17, 40
海特勒-伦敦近似 163
离化氢分子 44
离解能 44, 69, 70, 163
真空能量 212
真实态 26
索末菲辐射条件 80
索末菲-瓦特孙变换 113
莫尔斯势 70, 71
核半径对电子结合能的影响 73
矩阵组的不可约表示 189
积分方程的逐级近似解 94, 96, 105
流 (见电流密度 1, 198, 199, 207, 209, 213)
透射强度 21—23, 39, 45, 207, 209
高能散射 104
准势 104, 124
逐级近似(确定相移) 96, 97
爱里函数 40, 41, 117, A
圆柱坐标 A
圆振子 42

十 一 划

球贝塞耳函数 62, 63, 81, 83, 87, 94, 108, 109
球贝塞耳函数公式 A
球贝塞耳函数的积分表示 81
球谐函数公式 A
球谐函数的正交性 57
球谐函数表 67
球谐级数的收敛性 83, 103
球形电荷上的散射 108
球形空腔上的散射 86, 88
球形势阱的能级 62
球极坐标 A
球极坐标中的角动量分量算符 48
球振子 65
偶极-偶极相互作用 161, 162
偶极辐射 213—215

偶极辐射的选择定则 216
偶极辐射的极化 214, 216
偶极辐射的角分布 214
偶极跃迁 43, 79, 213—216
谐振子的能级 30
谐振子的本征函数表 30
谐振子的矩阵表示 33
谐振子希耳伯空间的构成 31
粒子波的折射率 45, 115
粒子共振 113, 114
粒子的置换 152, 153
粒子数算符 210
旋量与洛仑兹变换 191
旋转陀螺的角动量分量 46
黄金规则 182, 183, 211, 213
黄金规则应用于散射 183, 211
康普顿效应(非相对论性截面公式) 218
康普顿散射截面 218
混合螺旋性态 195, 196
跃迁几率 182, 183, 186, 211, 213
虚能级 26, 27
维格纳-爱卡特定理 133
第二类球谐函数 106
弹性散射(见散射)
勒让德函数和多项式 A

十 二 划

散射振幅 80, 82, 105
散射振幅的分波展开 82, 83
散射振幅分波展开的收敛性 83, 103
散射振幅的角动量展开 82
散射振幅的碰撞参数积分 104
散射波与入射平面波的干涉 80
散射截面的定义 80
散射长度 84, 92, 95
散射长度的不同符号 88, 147
量子化辐射场 212
量子化辐射场的光子数 212
量子化波动图象中的散射 211
量子力学中的刚体 46
期待值 3, 4, 7, 9, 12
期待值的时间微商 9
斯莱特行列式 152, 153, 158
斯特令公式 A
普薛耳-特勒势 38, 39, 93
普薛耳-特勒势阱的能级 38, 39
普薛耳-特勒势阱上的低能散射 93
超几何级数 37—39, 46, 64, 68, 207
超几何级数公式 A
傅里叶积分 14, 15, 17
傅里叶变换 14, 34, 76, 184
锂基态 157, 158
锂基态的交换积分 158
确定相移的 WKB 方法 121- 123
确定能级的 WKB 方法 118—120
硬球上的散射 84, 109
程函 115
晶格(见周期性势) 28, 29
短程力 112
温侧-克喇末-布里渊方法(见 WKB 法)
象力(对场致发射的影响) 170

椭圆积分 170
椭球坐标 44, A

十 三 划

辐射场的零点能 212
辐射场的量子化 212
辐射跃迁几率 215
微扰(见周期性微扰 186)
微分散射截面 80
群速度 16, 17
碰撞参数 185
感生偶极矩 187
雷杰极点和雷杰轨迹 113, 114

十 四 划

磁化 128
磁化率(抗磁,顺磁) 120, 160, 168
磁化率的微扰理论 128
磁共振(自旋倒转) 188
磁量子数 127
磁偶极子(见磁矩)
磁矩 127, 135, 136, 138, 145
磁矩算符 135
碱金属原子的电介质极化率 159
碱金属原子与质子的非弹性散射 166
谱线形状 182
谱线强度 213, 217
截面(见散射截面)
截面和跃迁几率 183
耦合参数,幂展开 102, 105
慢中子在氢分子上的散射 147
隧道效应 23
算符的微商 8, 10, 11
算符的矩阵表示 6, 33

十 五 划

横波 212

十 六 划

薛定谔表象 10
薛定谔方程中的磁场 125
薛定谔场的总动量 1, 3, 210
薛定谔场的量子化 210
薛定谔理论中的谐振子 30
薛定谔的变分原理 2
激发态的寿命 215
激发简并度 162
质矢量(狄拉克理论) 192, 193
质标量(狄拉克理论) 192, 193

十 七 划

螺旋性 137
螺旋性的期待值 196, 208
K 壳层的屏蔽常数 178
K 壳层的结合能 154
K 壳层的结合能—X 射线 178
S 态与 D 态的混合 143—145
WKB 近似下的谐振子 118
WKB 近似下的相移 121, 122
WKB 近似下的开普勒问题 120
WKB 近似下的库仑散射相位 123
X 射线的同位素移动 73
δ 函数,傅里叶积分 14
μ 子原子 74