

## Feynman-Hellmann 定理的两个推广式及其应用

杭州师范学院

高守恩

**摘要** 本文将 Feynman-Hellmann 定理推广,得到了两个有用的公式,并讨论了它们的应用。

## 一、引言

Feynman-Hellmann 定理(以下简称 F-H 定理)发表在本世纪 30 年代末<sup>[1]</sup>,它的应用相当广泛,既可以用来作理论分析,又可以用来计算力学量的平均值。量子力学中有许多复杂的问题,利用 F-H 定理去求解比直接用量子力学公式去求解要简单方便得多。本文把 F-H 定理加以推广,得出了两个有用的公式,应用就更为广泛,并且具体地讨论了它们在微扰理论和其他一些问题中的应用。

## 二、F-H 定理的两个推广式

设量子体系的哈密顿算符  $\hat{H}$  含有实参数  $\lambda$ ,它的本征值  $\varepsilon_n(\lambda)$  和归一化的本征函数  $\psi_n(\lambda)$  一般也是  $\lambda$  的函数,并满足定态薛定谔方程

$$\hat{H}(\lambda)\psi_n(\lambda) = \varepsilon_n(\lambda)\psi_n(\lambda) \quad (1)$$

利用积分号下对参数  $\lambda$  求导的方法,不难得到

$$\langle \psi_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \quad (2)$$

这就是著名的 F-H 定理。

在能量表象中,哈密顿算符  $\hat{H}$  的矩阵元为

$$\langle \psi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle = \varepsilon_n \delta_{mn} \quad (3)$$

上式等式两边对  $\lambda$  求导,则有

$$\begin{aligned} & \langle \frac{\partial \psi_m}{\partial \lambda} | \hat{H} | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle \\ & + \langle \psi_m | \hat{H} | \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \delta_{mn}, \end{aligned}$$

即得

$$\langle \psi_m | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle + (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \alpha_{mn}(\lambda) = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \delta_{mn}, \quad (4)$$

式中

$$\alpha_{mn}(\lambda) = \langle \psi_m | \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \rangle = -\alpha_{nm}^* \quad (5)$$

系数  $\alpha_{mn}$  满足反厄密条件。当  $m=n$  时,由(4)式得

$$\langle \psi_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda}$$

这就是 F-H 定理。当  $m \neq n$  时,由(4)式得

$$\langle \psi_m | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle + (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \alpha_{mn} = 0 \quad (6)$$

由上讨论可知, F-H 定理是(4)式的特殊情况,所以(4)式是 F-H 定理的第一个推广式。

若设力学量算符  $\hat{F}$  依赖于与  $\hat{H}$  同一个实参数  $\lambda$ ,则  $\hat{F}$  和  $\hat{H}$  乘积算符  $(\hat{F}\hat{H})$  的平均值对实参数  $\lambda$  求得

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi_n | \hat{F}\hat{H} | \psi_n \rangle = \langle \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} | \hat{F}\hat{H} | \psi_n \rangle \\ & + \langle \psi_n | \frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda} \hat{H} + \hat{F} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \hat{F}\hat{H} | \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \rangle \end{aligned}$$

整理后得

$$\langle \psi_n | \hat{F} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \langle \psi_n | \hat{F} | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | [\hat{F}, \hat{H}] | \psi_n \rangle, \quad (7)$$

$$\text{令 } \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \sum_m \alpha_{mn} \psi_m \quad (8)$$

利用(6)式、(7)式可以写成

$$\langle \psi_n | \hat{F} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \langle \psi_n | \hat{F} | \psi_n \rangle + \sum_m h_{mn} \langle \psi_n | \hat{F} | \psi_m \rangle \quad (9)$$

$$\text{式中 } h_{mn} = \langle \psi_m | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle, h = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \quad (10)$$

$\sum_m$  表示除了  $m=n$  项外,对所有  $m$  求和,系数  $\alpha_{mn}$  由(5)式可知,是纯虚数,选择适当的相位因子,可以使它等于零,关于这点证明如下:

$$\text{按定义 } \alpha_{nm} = \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \rangle$$

用  $e^{i\beta}$  代替  $\psi_n$ , 式中  $\beta$  是依赖于实的参数  $\lambda$ , 则有

$$\alpha_{nn} \rightarrow \langle e^{i\beta} \psi_n | \frac{\partial}{\partial \lambda} (e^{i\beta} \psi_n) \rangle = i\beta + \alpha_{nn}$$

我们选择  $i\beta = -\alpha_{nn}$ , 就使得对角系数  $\alpha_{nn} = 0$ , 于是有

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \sum_m' \alpha_{nm} \psi_m \quad (11)$$

在 (9) 式中, 当  $\hat{F} = \hat{I}$  ( $\hat{I}$  是单位矩阵) 时, 则 (9) 式的右边第二项等于零, 则得

$$\langle \psi_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda}$$

这表明 F-H 定理是 (9) 式的特殊情况, 所以 (9) 式是 F-H 定理第二个推广式。

我们还可以看到, 如果 (9) 式中  $\psi_n$  也是  $\hat{F}$  的本征函数, 则 (9) 式右边的第二项也为零, 则有

$$\langle \psi_n | \hat{F} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \langle \psi_n | \hat{F} | \psi_n \rangle \quad (12)$$

这个公式, 在计算问题过程中是很有用的。

上面我们得到的 F-H 定理的两个推广式, 一个是从对角情况推广到非对角的情况, 另一个是把 F-H 定理扩充为 (9) 式的形式。

### 三、F-H 定理推广式在微扰理论中的应用

为了利用 F-H 定理的推广式来研究微扰理论, 我们首先导出哈密顿算符  $\hat{H}$  和它的本征值  $\varepsilon_n$  对  $\lambda$  求导的矩阵元。为此, (2) 式两边对  $\lambda$  求导得

$$\begin{aligned} & \langle \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial \lambda^2} | \psi_n \rangle \\ & + \langle \psi_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \rangle = \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial \lambda^2} \end{aligned}$$

将 (11) 式代入上式得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial \lambda^2} - \frac{1}{2} \langle \psi_n | \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial \lambda^2} | \psi_n \rangle = \sum_m' h_{nm} \alpha_{mn} \\ & = \sum_m' \frac{h_{nm} h_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad (13) \end{aligned}$$

(10) 式两边对  $\lambda$  求导后得

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_{nm}}{\partial \lambda} &= \langle \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_m \rangle + \langle \psi_n | \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial \lambda^2} | \psi_m \rangle \\ &+ \langle \psi_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \frac{\partial \psi_m}{\partial \lambda} \rangle \end{aligned}$$

考虑了 (8) 式, 上式可以写成

$$\frac{\partial h_{nm}}{\partial \lambda} - \langle \psi_n | \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial \lambda^2} | \psi_m \rangle = \sum_k (h_{nk} \alpha_{kn} - \alpha_{nk} h_{km}) \quad (14)$$

(13) 式两边再对  $\lambda$  求导一次后得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \varepsilon_n}{\partial \lambda^3} - \frac{1}{3!} \langle \psi_n | \frac{\partial^3 \hat{H}}{\partial \lambda^3} | \psi_n \rangle - \frac{1}{2} \sum_m' (h_{nm}^{(2)} \alpha_{mn} \\ & - \alpha_{nm} h_{mn}^{(2)}) = \sum_{m,k}' \frac{h_{nk} h_{km} h_{mn}}{(\varepsilon_m - \varepsilon_n)(\varepsilon_k - \varepsilon_n)} \\ & - \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \sum_m' \frac{h_{nm} h_{mn}}{(\varepsilon_m - \varepsilon_n)^2}, \quad (15) \end{aligned}$$

$$\text{式中 } h^{(2)} = \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial \lambda^2}, h_{nm}^{(2)} = \langle \psi_n | \frac{\partial^2 \hat{H}}{\partial \lambda^2} | \psi_m \rangle. \quad (16)$$

利用这些矩阵元和求和规则, 可以得到微扰理论中非简并定态微扰理论的主要公式。

众所周知, 微扰体系的哈密顿算符  $\hat{H}$  写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \quad (17)$$

的形式, 式中  $\lambda$  是连续可变的实参数, 是一个小量,  $\hat{H}'$  称为微扰,  $\hat{H}_0$  表示未受微扰时体系的哈密顿算符, 它的本征值  $E_n^{(0)} = \varepsilon_n(\lambda=0)$  和本征函数  $\psi_n^{(0)} = \psi_n(\lambda=0)$  是已知的, 或严格可以求解的, 它们满足方程

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}. \quad (18)$$

微扰体系的薛定谔方程为

$$\hat{H} \psi_n = (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \psi_n = \varepsilon_n \psi_n. \quad (19)$$

由于方程 (19) 不能精确求解, 故采用微扰近似法求解。

现在在  $\lambda=0$  附近用泰勒级数展开  $\hat{H}$  的本征值  $\varepsilon_n$ , 我们得

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= \varepsilon_n(\lambda=0) + \lambda \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} + \frac{1}{2!} \lambda^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \\ &+ \frac{1}{3!} \lambda^3 \frac{\partial^3 \varepsilon_n}{\partial \lambda^3} + \dots \quad (20) \end{aligned}$$

为了简单起见, 假定  $\varepsilon_n(\lambda=0) = E_n^{(0)}$  是非简并的。对于哈密顿算符 (17) 式, 我们有

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} = \hat{H}', \quad \frac{\partial^n \hat{H}}{\partial \lambda^n} = 0, \quad (n \geq 2) \quad (21)$$

在  $\lambda \rightarrow 0$  的极限情况下, 有

$$h_{nm}(\lambda=0) = \langle \psi_n^{(0)} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_m^{(0)} \rangle = H_{nm}' \quad (22)$$

能量微扰一级修正, 可以从 (20) 式和 (2) 式得

$$E_n^{(1)} = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \lambda} = \langle \psi_n^{(0)} | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi_n^{(0)} \rangle = H_{nn}' \quad (23)$$

此式表示能量微扰一级修正, 它等于微扰在  $\hat{H}_0$  本征函数  $\psi_n^{(0)}$  描述的状态中的平均值。

能量微扰二级修正, 可以从 (20) 式和 (13) 式得

$$E_n^{(2)} = \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} = \sum_m' \frac{h_{nm} h_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_m' \frac{|H_{nm}'|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (24)$$

能量微扰三级修正, 可以从 (20) 式和 (15) 式得

$$E_n^{(3)} = \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \varepsilon_n}{\partial \lambda^3} \Big|_{\lambda=0} = \sum_{m,k}' \frac{H'_{mn} H'_{mk} H'_{kn}}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} - E_n^{(1)} \sum_m' \frac{|H'_{mn}|^2}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})} \quad (25)$$

通过 (16) 式两边再对  $\lambda$  求导, 可以得到高一级的微扰修正, 如此继续下去, 可以得到能量任意高阶微扰修正。

关于波函数的微扰修正, 我们将  $\hat{H}$  的本征函数  $\psi_n$  在  $\lambda=0$  附近用泰勒级数展开

$$\psi_n = \psi_n(\lambda=0) + \lambda \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} + \lambda^2 \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} + \dots \quad (26)$$

波函数的微扰一级修正, 由 (26) 式和 (8) 式得

$$\psi_n^{(1)} = \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} = \sum_m' \alpha_{mn} \psi_m^{(0)} = \sum_m' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \quad (27)$$

再对上式两边对  $\lambda$  求导, 并考虑了 (14) 式, 在  $\lambda \rightarrow 0$  极限情况下, 展开式 (26) 中的高阶项, 就是我们所得的波函数相应于波函数微扰高阶修正。

由上所述, 能量和波函数的各级修正, 可以利用 F-H 定理推广式来得到。一般来说, 能量求到二级近似, 波函数到一级修正, 问题的解与实验结果比较, 已符合得较好, 所以非简并的定态微扰理论高阶的公式, 一般不去具体的给出。

#### 四、关于 F-H 定理的推广式在其他问题中应用举例

[例一], 有一维线性谐振子, 试证线性谐振子动能平方的平均值等于其势能平方的平均值, 即

$$\langle \psi_n | \hat{T}^2 | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | V^2(x) | \psi_n \rangle \quad (28)$$

[解] 一维线性谐振子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2 d^2}{2m dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (29)$$

它的本征值与本征函数为

$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, (n=0, 1, 2, \dots) \quad (30)$$

$$\psi_n = N_n e^{-\frac{1}{2} \xi^2} H_n(\xi), \quad \xi = \alpha x. \quad (31)$$

在公式 (9) 中, 若令  $\hat{F} = \hat{H}, \lambda = \hbar$ , 即有

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hbar} = \frac{2}{\hbar} \hat{T}, \quad \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \hbar} = \varepsilon_n / \hbar. \quad (32)$$

将 (32) 式代入 (9) 式得

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | (\hat{T} + V(x)) \frac{2}{\hbar} \hat{T} | \psi_n \rangle &= \frac{2}{\hbar} \langle \psi_n | \hat{T}^2 \\ &+ V(x) \hat{T} | \psi_n \rangle = \frac{\varepsilon_n^2}{\hbar} \end{aligned} \quad (33)$$

若令  $\lambda = \omega$ , 则有

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \omega} = \frac{2}{\omega} V(x), \quad \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \omega} = \frac{\varepsilon_n}{\omega}, \quad (34)$$

将 (34) 式代入 (9) 式得

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | (\hat{T} + V(x)) \frac{2}{\omega} V(x) | \psi_n \rangle \\ = \frac{2}{\omega} \langle \psi_n | \hat{T} V(x) - V^2(x) | \psi_n \rangle = \frac{\varepsilon_n^2}{\omega}, \end{aligned} \quad (35)$$

以  $\frac{1}{\omega} \times (33)$  式减去以  $\frac{1}{\hbar} \times (35)$  式得

$$\langle \psi_n | \hat{T}^2 - V^2(x) + V(x) \hat{T} - \hat{T} V(x) | \psi_n \rangle = 0$$

即

$$\langle \psi_n | \hat{T}^2 - V^2(x) | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \hat{T} V(x) - V(x) \hat{T} | \psi_n \rangle$$

现在我们证明, 在束缚态  $\psi_n$  情况下

$$\langle \psi_n | \hat{T} V(x) - V(x) \hat{T} | \psi_n \rangle = 0 \quad (36)$$

证:  $\langle \psi_n | \hat{T} V(x) - V(x) \hat{T} | \psi_n \rangle$

$$= \langle \psi_n | \hat{H} V(x) - V(x) \hat{H} | \psi_n \rangle$$

$$= \varepsilon_n \langle \psi_n | V(x) - V(x) | \psi_n \rangle = 0$$

所以, 我们得到

$$\langle \psi_n | \hat{T}^2 | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | V^2(x) | \psi_n \rangle.$$

[例二], 类氢离子 (核电荷为  $Ze$ ) 中电子, 处于束缚态  $\psi_{nlm}$  中, 试计算  $r^{-1}, r^{-2}, r^{-3}$  在态  $\psi_{nlm}$  中的平均值。

[解] 在中心力场  $V(r)$  中, 粒子的哈密顿算符为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2\mu} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 + V(r), \\ (V(r) &= -Ze^2/r). \end{aligned} \quad (37)$$

在  $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z)$  对角表象中,  $\hat{H}$  的归一化本征函数为

$$\psi_{nlm} = \frac{1}{r} u(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (38)$$

相应的本征值为

$$\varepsilon_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2n^2 \hbar^2}. \quad (39)$$

(28) 中  $u(r)$  满足方程

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2 d^2}{2\mu dr^2} u(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} u(r) - \frac{Ze^2}{r} u(r) \\ = \varepsilon_n u(r) \end{aligned} \quad (40)$$

总能量算符  $\hat{H}$  等价于

$$\hat{H} \rightarrow -\frac{\hbar^2 d^2}{2\mu dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}.$$

现在利用公式(9), 分别计算出  $\langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm}$ ,  $\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nlm}$ ,  $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nlm}$

在公式(9)中, 令  $\hat{F} = \hat{L}_z$ ,  $\lambda = Ze^2$ , 则有

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial (Ze^2)} = -\frac{1}{r}, \quad \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial (Ze^2)} = -\frac{Z}{n^2 a_0} \quad (41)$$

式中  $a_0 = \hbar^2 / \mu e^2$  是玻尔第一轨道半径, 将(41)式代入(9)式得

$$\langle \psi_{nlm} | \hat{L}_z \left( -\frac{1}{r} \right) | \psi_{nlm} \rangle = -\frac{Z}{n^2 a_0} \langle \psi_{nlm} | \hat{L}_z | \psi_{nlm} \rangle$$

即得

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm} = \langle \psi_{nlm} | \frac{1}{r} | \psi_{nlm} \rangle = \frac{Z}{n^2 a_0} \quad (42)$$

若令  $\lambda = l$ , 则有

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial l} = \frac{2l+1}{2\mu r^2} \hbar^2, \quad \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial l} = -\frac{2\varepsilon_n}{n} \quad (43)$$

将(43)式代入(9)式中, 我们就得

$$\begin{aligned} \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu} \langle \psi_{nlm} | \hat{L}_z \frac{1}{r^2} | \psi_{nlm} \rangle \\ = -\frac{2\varepsilon_n}{n} \langle \psi_{nlm} | \hat{L}_z | \psi_{nlm} \rangle \end{aligned}$$

即得

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nlm} = \langle \psi_{nlm} | \frac{1}{r^2} | \psi_{nlm} \rangle = \frac{Z^2}{n^3 a_0^2 \left( l + \frac{1}{2} \right)} \quad (44)$$

若令  $\lambda = r$ , 则有

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial r} = -\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r^3} + \frac{Ze^2}{r^2}, \quad \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial r} = 0 \quad (45)$$

将(45)式代入(9)式中, 我们就得到

$$\langle \psi_{nlm} | \hat{L}_z \left( -\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r^3} + \frac{Ze^2}{r^2} \right) | \psi_{nlm} \rangle = 0$$

即得

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nlm} = \langle \psi_{nlm} | \frac{1}{r^3} | \psi_{nlm} \rangle &= \frac{Z\mu e^2}{l(l+1)\hbar^2} \langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nlm} \\ &= \frac{1}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l+1)} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \end{aligned} \quad (46)$$

从这个例子中看出, 利用 F-H 定理的推广式,

计算类氢离子中电子处于束缚态  $\psi_{nlm}$  中的  $\langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm}$ ,

$\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nlm}$ ,  $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nlm}$ , 很方便地得到了正确结果.

总之, F-H 定理的两个推广式, 它们的应用比 F-H 定理本身更为广泛, 计算量子力学中复杂的有关问题, 既简单又方便. 关于它们的应用进一步的讨论, 有待于深入, 这对于发展量子力学的基础理论无疑是有意义的.

## 参考文献

- [1] R.P.Feynman, *Phys. Rev.* 56 (1935)340
- [2] 钱伯初等, 《量子力学习题精选与剖析》, 科学出版社 (1988), 第 154 页.

(上接 29 页)

的逆变换式  $\cos\theta' = \frac{\cos\theta - \beta}{1 - \beta\cos\theta}$

$$\text{可求出 } \frac{1}{1 + \beta\cos\theta'} = \gamma^2 (1 - \beta\cos\theta) \quad (9)$$

于是, 依据(6)、(7)式及(9)式有

$$\begin{aligned} \lambda_f - \lambda_i &= \frac{\lambda_f'}{\gamma(1 + \beta\cos\theta_f')} - \frac{\lambda_i'}{\gamma(1 + \beta\cos\theta_i')} \\ &= \lambda' \gamma \beta (\cos\theta_i - \cos\theta_f) \end{aligned} \quad (10)$$

把(7)式的逆变换式

$$\lambda' = \frac{\lambda}{\gamma(1 - \beta\cos\theta)}$$

应用于入射光波有

$$\lambda' = \lambda_i' = \frac{\lambda_i}{\gamma(1 - \beta\cos\theta_i)} \quad (11)$$

最后将(4)式及(11)式代入(10)式不难导出  $\Sigma$  中散射光与入射光的波长差

$$\lambda_f - \lambda_i = \lambda_i \frac{\cos\theta_i - \cos\theta_f}{(p_i/cp) - \cos\theta_i} \quad (12)$$

令  $p_i = 0$ , 则  $p_{ti} = m_0 c^2$ ,  $p_i = m_0 c^2 + ch/\lambda_i$ ,  $p = h/\lambda_i$ ,  $\theta_i = 0$ . 代入(12)式不难得到与(1)式一致的结果. 它表明本文的结果可回到“特殊”康普顿效应的情形. 此外, (12)式和文献[2]中的(3)式都含有角度量, 似乎与  $x$  轴的选取有关. 其实不然, 文献[2]中, 规定  $x$  轴沿碰撞前入射光子动量的正向; 本文中, 规定  $x$  轴沿目标电子和入射光子合动量的正向. 也正因为如此, 得到了两个形式上不同的表达式.

## 参考文献

- [1] 蔡圣善, 朱耘, 经典电动力学, 上海: 复旦大学出版社, 1985. 425
- [2] 姚仲祥, 大学物理, 1988, 7(4), 19.