第33卷 第1期　　物 理 学 报　　Vol. 33, No. 1
1984 年 1 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Jan., 1984

用旋量零标架方法计算氢原子能级

许殿彦
(北京大学计算机科学技术系)

1983年3月12日

提　　要

本文用旋量零标架方法计算相对论性氢原子能级，所得结果与Γ矩阵方法算得的结果一样，但不明显地使用任何对易关系.

一、引　　言

求解弯曲时空中的(或平直 Minkowski 时空中用曲线坐标表示的) Dirac 方程，可以用Γ矩阵方法[1,2]，也可以用旋量零标架方法[3,4]. 我们认为，旋量零标架方法好一些. 这表现在，这种方法不明显地使用任何对易关系，只要构造的零标架合适，就能自动化地使 Dirac 方程退耦和分离变量.

对于比较复杂的弯曲时空中的 Dirac 方程，用Γ矩阵方法很难求解，但用旋量零标架方法却比较容易求解.

为了显示旋量零标架方法的特点，本文用该方法计算 Minkowski 时空氢原子的(包括相对论效应的)能级.

二、Dirac 方程的退耦和分离变量

用球坐标表示的平直 Minkowski 时空的线元为

$$ds^2 = dt^2 - dr^2 - r^2 d\theta^2 - r^2 \sin^2\theta d\phi^2. \tag{1}$$

本文采用 $c = \hbar = 1$ 的单位制.

由 (1) 式可以构造下面的零标架:

$$l_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1,0,0),\ n_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0,0),$$

$$m_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,r,ir\sin\theta),\ \bar{m}_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,r,-ir\sin\theta). \tag{2}$$

由 (2) 式可以计算 l^μ, n^μ, m^μ, $\bar{m}^\mu$. 不难证明，我们构造的零标架满足伪正交关系和度规条件.

类氢原子核的电磁四维矢势为

$$A_\mu = \frac{Q}{r}(1,0,0,0), \tag{3}$$

其中 $Q = ze$, z 为电荷数.

由 (2) 式按 Newman 和 Penrose[5] 的 (4.1 a) 式求得下面的旋系数：

$$K=\pi=\epsilon=\lambda=\sigma=\nu=\tau=\gamma=0,$$

$$\rho=\mu=\frac{1}{\sqrt{2}\,r},\quad \beta=-\alpha=-\frac{1}{\sqrt{2}\,r}\cot\theta. \tag{4}$$

用旋坐标表示的 Dirac 方程为[3,6]

$$\begin{aligned}&\sqrt{2}\,(\nabla_{A\dot{B}}+ieA_{A\dot{B}})P^{A}+i\mu\bar{Q}_{\dot{B}}=0,\\&\sqrt{2}\,(\nabla_{A\dot{B}}-ieA_{A\dot{B}})Q^{A}+i\mu\bar{P}_{\dot{B}}=0,\end{aligned} \tag{5}$$

式中 μ 为 Dirac 粒子的质量. 由 (5) 式可得

$$\begin{aligned}&\sqrt{2}\,(D+\epsilon-\rho+ieA_{\mu}l^{\mu})F_1+\sqrt{2}\,(\bar{\delta}+\pi-\alpha+ieA_{\mu}\bar{m}^{\mu})F_2-i\mu G_1=0,\\&\sqrt{2}\,(\Delta+\mu-\gamma+ieA_{\mu}n^{\mu})F_2+\sqrt{2}\,(\delta+\beta-\tau+ieA_{\mu}\bar{m}^{\mu})F_1-i\mu G_2=0,\\&\sqrt{2}\,(D+\epsilon^*-\rho^*+ieA_{\mu}l^{\mu})G_2-\sqrt{2}\,(\delta+\pi^*-\alpha^*+ieA_{\mu}m^{\mu})G_1-i\mu F_2=0,\\&\sqrt{2}\,(\Delta+\mu^*-\gamma^*+ieA_{\mu}n^{\mu})G_1-\sqrt{2}\,(\bar{\delta}+\beta^*-\tau^*+ieA_{\mu}m^{\mu})G_2-i\mu F_1=0.\end{aligned} \tag{6}$$

将微分算子

$$D=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial r}\right),\quad \Delta=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}\right),$$

$$\delta=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{i}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\quad \bar{\delta}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{7}$$

及旋系数 (4) 式，电磁四维矢势 (3) 式代入 (6) 式，可得

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}+\frac{iQe}{r}\right)F_1+\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{2r}\cot\theta\right)F_2-i\mu G_1=0,\\&\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}+\frac{iQe}{r}\right)F_2+\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{i}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{2r}\cot\theta\right)F_1-i\mu G_2=0,\\&\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}+\frac{iQe}{r}\right)G_2-\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{i}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{2r}\cot\theta\right)G_1-i\mu F_2=0,\\&\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}+\frac{iQe}{r}\right)G_1-\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{1}{2r}\cot\theta\right)G_2-i\mu F_1=0.\end{aligned} \tag{8}$$

(8) 式可以改写成矩阵形式

$$\left(\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+\gamma^1\frac{\partial}{\partial r}+\gamma^2\frac{\partial}{\partial\theta}+\gamma^3\frac{\partial}{\partial\phi}+\gamma^1\frac{1}{r}+\gamma^2\frac{1}{2}\cot\theta+\gamma^0\frac{iQe}{r}-i\mu I\right)\phi=0, \tag{9}$$

式中

$$\gamma^0=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix},\quad \gamma^1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\-1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix},$$

$$\gamma^2=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&-1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix},\quad \gamma^3=\frac{1}{r\sin\theta}\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&i&0&0\\-i&0&0&0\end{pmatrix}, \tag{10}$$

I 为 4×4 的单位矩阵，ϕ 为四分量波函数，

$$\phi=(F_1,F_2,G_1,G_2)^T, \tag{11}$$

T 为转置算子．令

$$\phi=\frac{1}{r(\sin\theta)^{\frac{1}{2}}}\hat{\phi}, \tag{12}$$

将 (12) 式代入 (9) 式，则 (9) 式化简为

$$\left(\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+\gamma^1\frac{\partial}{\partial r}+\gamma^2\frac{\partial}{\partial\theta}+\gamma^3\frac{\partial}{\partial\phi}+\gamma^0\frac{iQe}{r}-i\mu I\right)\hat{\phi}=0, \tag{13}$$

式中

$$\hat{\phi}=(\hat{F}_1,\hat{F}_2,\hat{G}_1,\hat{G}_2)^T, \tag{14}$$

(13) 式也可以写成

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)\hat{F}_1-\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\hat{F}_2-i\mu\hat{G}_1=0,\\
&\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)\hat{F}_2-\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\hat{F}_1-i\mu\hat{G}_2=0,\\
&\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)\hat{G}_1+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\hat{G}_2-i\mu\hat{F}_1=0,\\
&\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)G_2+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\hat{G}_1-i\mu\hat{F}_2=0.
\end{aligned} \tag{15}$$

由于联立偏微分方程 (15) 的系数不含 t 和 ϕ，可设

$$\begin{aligned}
&\hat{F}_j=e^{-iEt+im\phi}f_j(r,\theta),\\
&\hat{G}_j=e^{-iEt+im\phi}g_j(r,\theta)\quad j=1,2.
\end{aligned} \tag{16}$$

将 (16) 式代入 (15) 式，则 (15) 式变为

$$\begin{aligned}
&\left(-iE-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)f_1-\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)f_2-i\mu g_1=0,\\
&\left(-iE+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)f_2-\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)f_1-i\mu g_2=0,\\
&\left(-iE+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)g_1+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)g_2-i\mu f_1=0,\\
&\left(-iE-\frac{\partial}{\partial r}+\frac{iQe}{r}\right)g_2+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)g_1-i\mu f_2=0.
\end{aligned} \tag{17}$$

为了进一步分离变量，令

$$\begin{aligned}
&f_1(r,\theta)=X_{+\frac{1}{2}}(r)P_{+\frac{1}{2}}(\theta),\quad f_2(r,\theta)=X_{-\frac{1}{2}}(r)P_{-\frac{1}{2}}(\theta),\\
&g_1(r,\theta)=X_{-\frac{1}{2}}(r)P_{+\frac{1}{2}}(\theta),\quad g_2(r,\theta)=X_{+\frac{1}{2}}(r)P_{-\frac{1}{2}}(\theta).
\end{aligned} \tag{18}$$

将 (18) 式代入 (17) 式，得到

$$\begin{aligned}
&r\left[\left(iE+\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{+\frac{1}{2}}+i\mu X_{-\frac{1}{2}}\right]P_{+\frac{1}{2}}+\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)X_{-\frac{1}{2}}P_{-\frac{1}{2}}=0,\\
&r\left[\left(iE-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{-\frac{1}{2}}+i\mu X_{+\frac{1}{2}}\right]P_{-\frac{1}{2}}+\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)X_{+\frac{1}{2}}P_{+\frac{1}{2}}=0,\\
&r\left[\left(iE-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{-\frac{1}{2}}+i\mu X_{+\frac{1}{2}}\right]P_{+\frac{1}{2}}-\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)X_{+\frac{1}{2}}P_{-\frac{1}{2}}=0,
\end{aligned}$$

$$r\left[\left(iE+\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{+\frac{1}{2}}+i\mu X_{-\frac{1}{2}}\right]P_{-\frac{1}{2}}-\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)X_{-\frac{1}{2}}P_{+\frac{1}{2}}=0. \quad (19)$$

(19) 式意味着

$$\begin{aligned}
&r\left[\left(iE+\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{+\frac{1}{2}}+i\mu X_{-\frac{1}{2}}\right]=\lambda_1 X_{-\frac{1}{2}},\\
&\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)P_{-\frac{1}{2}}=-\lambda_1 P_{+\frac{1}{2}};\\
&r\left[\left(iE-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{-\frac{1}{2}}+i\mu X_{+\frac{1}{2}}\right]=\lambda_2 X_{+\frac{1}{2}},\\
&\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)P_{+\frac{1}{2}}=-\lambda_2 P_{-\frac{1}{2}};\\
&r\left[\left(iE-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{-\frac{1}{2}}+i\mu X_{+\frac{1}{2}}\right]=\lambda_3 X_{+\frac{1}{2}},\\
&\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)P_{-\frac{1}{2}}=\lambda_3 P_{+\frac{1}{2}};\\
&r\left[\left(iE+\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{+\frac{1}{2}}+i\mu X_{-\frac{1}{2}}\right]=\lambda_4 X_{-\frac{1}{2}},\\
&\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)P_{+\frac{1}{2}}=\lambda_4 P_{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \quad (20)$$

为了使 (20) 式的各式自洽，必须

$$\lambda_1=-\lambda_2=-\lambda_3=\lambda_4\equiv\lambda. \quad (21)$$

将 (21) 式代入 (20) 式，则 (20) 式的四对方程只有以下两对独立：

$$r\left[\left(iE+\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{+\frac{1}{2}}+i\mu X_{-\frac{1}{2}}\right]=\lambda X_{-\frac{1}{2}}, \quad (22a)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)P_{-\frac{1}{2}}=-\lambda P_{+\frac{1}{2}}; \quad (22b)$$

$$r\left[\left(iE-\frac{\partial}{\partial r}-\frac{iQe}{r}\right)X_{-\frac{1}{2}}+i\mu X_{+\frac{1}{2}}\right]=-\lambda X_{+\frac{1}{2}}, \quad (22c)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m}{\sin\theta}\right)P_{+\frac{1}{2}}=\lambda P_{-\frac{1}{2}}. \quad (22d)$$

(22)式就是我们所要求的分离变量和部分退耦的方程。

三、能 级 公 式

由 (22b)，(22d) 式可得

$$\left(\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{m\cos\theta}{\sin^2\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}+\lambda^2\right)P_{+\frac{1}{2}}=0, \quad (23a)$$

$$\left(\frac{d^2}{d\theta^2}-\frac{m\cos\theta}{\sin^2\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}+\lambda^2\right)P_{-\frac{1}{2}}=0. \quad (23b)$$

令

$$z = \frac{1}{2}(1 + \cos\theta), \tag{24}$$

则 (23b) 式变为

$$\left\{z^2(1-z)^2\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{1}{2} - z\right)(1-z)z\frac{d}{dz} + \left[-\lambda^2 z^2 + \left(\lambda^2 + \frac{1}{2}m\right)z - \frac{1}{4}m(m+1)\right]\right\}P_{+\frac{1}{2}} = 0. \tag{25}$$

(25) 式的一个解为

$$y = z^{-\frac{1}{2}m}(1-z)^{\frac{1}{2}m}F\left(\lambda, -\lambda, \frac{1}{2} - m, z\right). \tag{26}$$

为了使超几何级数在某一项截断,成为一多项式. λ 必须取整数值.

令

$$X_{+\frac{1}{2}} = e^{-\alpha r}R_{+\frac{1}{2}}, \quad X_{-\frac{1}{2}} = e^{-\alpha r}R_{-\frac{1}{2}}, \tag{27}$$

式中 $\alpha = (\mu^2 - E^2)^{\frac{1}{2}}$. 将 (27) 式代入 (22a), (22c) 式可得

$$\left(\frac{d}{dr} - \alpha + iE - \frac{iQe}{r}\right)R_{+\frac{1}{2}} + i\mu R_{-\frac{1}{2}} = \frac{\lambda}{r}R_{-\frac{1}{2}},$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \alpha - iE - \frac{iQe}{r}\right)R_{-\frac{1}{2}} - i\mu R_{+\frac{1}{2}} = \frac{\lambda}{r}R_{+\frac{1}{2}}. \tag{28}$$

令

$$R_{+\frac{1}{2}} = \sum b_\nu r^{s+\nu}, \quad R_{-\frac{1}{2}} = \sum d_\nu r^{s+\nu}, \tag{29}$$

式中 $S = (\lambda^2 - Q^2e^2)^{\frac{1}{2}}$.

将 (29) 式代入 (28) 式比较级数中 $r^{s+\nu-1}$ 项的系数,可得

$$(s+\nu)b_\nu - (\alpha - iE)b_{\nu-1} - iQeb_\nu + i\mu d_{\nu-1} - \lambda d_\nu = 0,$$

$$(s+\nu)d_\nu - (\alpha + iE)d_{\nu-1} + iQed_\nu - i\mu b_{\nu-1} - \lambda b_\nu = 0. \tag{30}$$

利用熟知的级数求解方法,由 (30) 式可以导出

$$\alpha(n+s) + EQe = 0, \tag{31}$$

其中 n 为正整数. 由 (31) 式可得

$$E^2 = \mu^2\left[1 + \frac{Q^2e^2}{(n+s)^2}\right]^{-1}. \tag{32}$$

正能解为

$$E = \mu\left[1 + \frac{Q^2e^2}{(n+s)^2}\right]^{-\frac{1}{2}} = \mu\left[1 + \frac{Q^2e^2}{(n+\sqrt{\lambda^2 - Q^2e^2})^2}\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{33}$$

恢复使用 CGS 单位制. 令 $\alpha = e^2/c\hbar$ 并注意 $Q = ze$. 于是 (33) 式可以写成

$$E = \mu c^2\left[1 + \frac{z^2\alpha^2}{(n+\sqrt{\lambda^2 - z^2\alpha^2})^2}\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{34}$$

(34) 式就是计入相对论效应类氢原子的能级公式.

四、讨 论

从上面的计算可以清楚地看到旋量零标架方法的特点. 这个方法对 Minkowski 时空

类氢原子的 Dirac 方程的求解，不需要计算任何对易关系，只要构造的零标架合适，就能自动化地求解.

打个比喻，对于球对称的物理问题，最好选用球坐标. 对于球对称的物理问题，直角坐标不是好坐标. 对于旋量粒子最好选用旋量零标架. 从（10）式的 γ 矩阵我们可以看出，由旋量零标架方法导出的 γ 矩阵和一般教科书上通常使用的 γ 矩阵不同.（10）式的 γ 矩阵有利于使 Dirac 方程退耦和分离变量.

再者，旋量零标架方法不是不使用对易关系，而是在计算旋系数的过程中自动地计入了对易关系.

通常总是把旋量零标架方法和静止质量为零的粒子（比如：光子，引力子等）的辐射和传播等一类的问题联系在一起. 本文的结果指出，旋量零标架方法可以用于计算静止质量不为零的粒子的束缚态能级.

参　考　文　献

[1] W. G. Unruh. *Phys. Rev. D*, **10**(1974), 3194.
[2] 李光仪、郭汉英，物理学报，**31**(1982)，1501。
[3] 许殿彦，物理学报，**32**(1983)，225。
[4] 许殿彦，科学通报，**28**(1983)，651。
[5] E. Newman and R. Penrose. *J. Math. Phys.*, **3**(1962), 566.
[6] D. N. Page. *Phys. Rev. D*, **14**(1976), 1509.

CALCULATION OF RELATIVISTIC ENERGY LEVELS OF HYDROGEN ATOM BY SPINOR METHOD

XU DIAN-YAN

(Department of Computer Science and Technology, Peking University)

ABSTRACT

In this paper, the relativistic wave equation of hydrogen atom is studied in spinor formalism. The energy formula derived is the same as that derived by Γ-matrix method, but the commutation relation is not explicitly used in the calculation.