Wilson-Sommerfeld Quantization Rule的描述

霧 裡 人

時代的巨輪一轉入廿世紀，一切有了令人驚奇的改變，尤其以物理為然，剛進入世紀門頗俱智慧的Planck先生大膽地假設(1901)年任何物理體系只要它是簡諧振盪 (Simple harmonic oscillation) 它所能俱有的能量是某一定能量的整數倍，此一定能量為$h\nu$，h是Planck常數，ν是此振盪的頻率，用數學符號表示即 $E=nh\nu$，n 是任何正整數。這一假設成功地解釋了古典理論解釋不通的熱輻射（thermal radiation）的能譜（energy spectrum)，且打開了近代量子理論的大門。緊跟着愛因斯坦於1905年假設光子俱有 $h\nu$ 的能量，且若光子打在物體上其被電子吸收的能量是以整體性的，由此解釋了光電效應。再後就是 Bohr 假設電子的軌道是繞着原子核在庫倫吸力下作圓周運動，其所能俱有的角動量是$\frac{h}{2\pi}$的整數倍，再加上電子從一層軌道跳到另一層其能量損失只變得是量子化而非連續性的，同時放出或吸收頻率為ν的電磁波。這樣解釋了原子光譜一些複雜的特性。以後再經過deBroglie，Schroedinger 和 Heisenberg諸位着名物理學家的努力創出一套比古典理論更為完美的量子學說—與相對論同在近代物理上佔有最重要的地位，這篇只是淺談一段在量子理論發展史上的插曲。

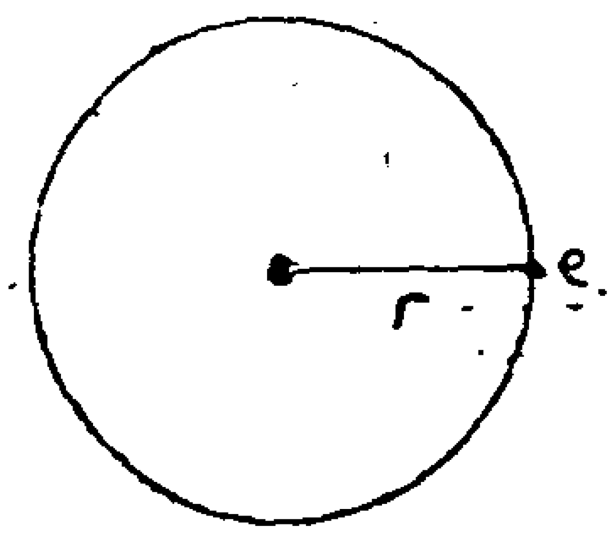
鑒於Bohr與Planck的成功，Wilson 與 Sommerfeld兩位物理學家不甘寂寞，希冀能從Bohr與Planck 所討論的題材去尋求較普遍的規則，終於皇天不負苦心人，他們於1916年宣佈：任何 f 自由度（degree of freedom）的物理體系若它的一般坐標（Generalized Coordinate）是時間的週期函數，並ERA它要適合如下之條件：

$$\oint p_i dq_i = n_i h \qquad i=1\cdots\cdots f\cdots\cdots \text{(A)}$$

這裡 p_i 表示第 i 個一般動量（generalized momentum) q_i表是第 i 個一般坐標（generaized coordinate），$\oint$表示積分一週期。在物理術語上稱為相積分（plase integral），而 $p\,q$ 所形成的空間我們稱為相空間（phase space）。現在讓我們欣賞一下此公式有何妙用。

首先要看看它是否包含Bohr與Planck的假設

1.Bohr 的：為簡單起見考慮氫原子，其電子繞着原子核作半徑為 r 的圓周運動。則其Lagrangian為 $L=\frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2+\frac{e^2}{r}$



$$p_\theta=\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}=mr^2\dot{\theta}$$

$\dot{\theta}$是一常數，p_θ亦為一常數再由 Wilson-Sommerfeld quantization rule知。

$$\int_0^{2\pi} p_\theta\, d\theta = mr^2\dot{\theta}\,2\pi = n_\theta h$$

$n_\theta=1，\cdots\cdots，n$　即 $p_\theta=n_\theta\hbar$　此即Bohr的假設。

其總能量 $E=\frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2-\frac{e^2}{r}=-\frac{me^4}{2n_\theta^2\hbar^2}$

說明能量是量子化的。

2.考慮三度空間的簡諧運動：

$$L=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)-\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2)$$

$$p_x=\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}=m\dot{x}，p_y=\frac{\partial L}{\partial\dot{y}}=m\dot{y}，p_z=\frac{\partial L}{\partial\dot{z}}=m\dot{z}$$

由$\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}=0$知其運動為$m\ddot{x}+kx=0$

即簡諧運動為簡單起見設初始條件（initial condition）在$t=0$時在原點則$x=x_0\sin\omega t$，x_0表示x方向的振幅，$\omega=2\pi\sqrt{\frac{k}{m}}$是角頻率，則

$p_x=m\omega x_0\cos\omega t$（由(A)得：

$$n_x h=\oint p_x dx=\oint m\omega x_0 \cos\omega t\, dx$$

$$=\oint m\omega x_0(\cos\omega t)x_0(\cos\omega t)\omega dt$$

$$=m\omega^2x_0^2\int_0^{\frac{2\pi}{\omega}}\frac{\cos 2\omega t\cdot 1}{2}dt=mx_0^2\pi\omega$$

i.e $mx_0^2\pi\omega=n_xh$ $\quad x_0^2=\frac{n_xh}{m\pi\omega}$ ………①

同理 $my_0^2\pi\omega=n_yh$ $\quad y_0^2=\frac{n_yh}{m\pi\omega}$ ………②

$mz_0^2\pi\omega=n_zh$ $\quad z_0^2=\frac{n_zh}{m\pi\omega}$ ………③

當 $x=0\ y=0\ z=0$ 時總能量全是動能

$$E=\frac{1}{2}m\left[\left(\frac{dx}{dt}\right)^2_{t=0}+\left(\frac{dy}{dt}\right)^2_{t=0}+\left(\frac{dz}{dt}\right)^2_{t=0}\right]$$

$$=\frac{1}{2}m\left[(x_0\omega\cos\omega t)^2_{t=0}+(y_0\omega\cos\omega t)^2_{t=0}+(z_0\omega\cos\omega t)^2_{t=0}\right]$$

$$=\frac{1}{2}m(x_0^2+y_0^2+z_0^2)\omega^2$$

$$=\frac{1}{2}m\left(\frac{h}{m\pi\omega}\right)(n_x+n_y+n_z)\omega^2$$

$$=\frac{h}{2\pi}(n_x+n_y+n_z)\omega$$

$$=(n_x+n_y+n_z)h\nu \qquad \because \omega=2\pi\nu$$

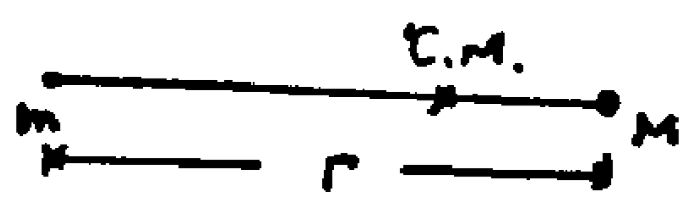
$$=nh\nu \qquad 定\ n_x+n_y+n_z=n$$

這便是Planck的假設

若進一步考慮氫原子中電子繞着質量中心作橢圓運動在極坐標上Lagrangian $L=\frac{1}{2}\mu(\dot r^2+r^2\dot\phi^2)+\frac{e^2}{r}$，$\mu=\frac{mM}{m+M}$，$p_r=\frac{\partial L}{\partial \dot r}=\mu\dot r$

$p_\phi=\frac{\partial L}{\partial\dot\phi}=\mu r^2\dot\phi=$常數，因爲$\frac{\partial L}{\partial\phi}=0$

或由克朴勒（Kepler's law）定律知$p_\phi=$常數



由(A) $\oint p_\phi d\phi=kh$ $\quad p_\phi=\frac{kh}{2\pi}$ 且 $\dot\phi=\frac{p_\phi}{\mu r^2}$

由古典力學知在庫倫力場中一般運動皆爲橢圓運動，因此可設：$\frac{1}{r}=\frac{1+\epsilon\cos\phi}{a(1-\epsilon)^2}$，$\epsilon$表離心率

則 $p_r=\mu\dot r=\mu\frac{dr}{d\phi}\frac{d\phi}{dt}=\mu\frac{dr}{d\phi}\dot\phi=\frac{p_\phi}{r^2}\frac{dr}{d\phi}$

$$=\frac{p_\phi}{r}\frac{\epsilon\sin\phi}{1+\epsilon\cos\phi}$$

由(A)知 $n_rh=\oint p_rdr=\oint\frac{p_\phi}{r}\frac{\epsilon\sin\phi}{1+\epsilon\cos\phi}\frac{dr}{d\phi}\frac{dr}{d\phi}d\phi$

$=\epsilon^2p_\phi\int_0^{2\pi}\frac{\sin^2\phi\, d\phi}{(1+\epsilon\cos\phi)^2}$ 積分後再將p_ϕ

值代入得 $n_r=k\left(\frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}}-1\right)$ ie $1-\epsilon^2=\frac{k^2}{(k+n_r)^2}$

$$E=T+V=\frac{1}{2}(m\dot r^2+mr^2\dot\phi^2)-\frac{e^2}{r}=\frac{p_\phi^2}{2\mu r^2}$$

$$\left[\left(\frac{1}{r}\frac{dr}{d\phi}\right)^2+1\right]-\frac{e^2}{r}=\frac{p_\phi^2}{\mu a^2}\frac{1}{(1-\epsilon^2)^2}$$

$$\left[\frac{1+\epsilon^2}{2}+\epsilon\cos\phi\right]-\frac{e^2}{a}\frac{1+\epsilon\cos\phi}{1-\epsilon^2}$$

因爲總能量是常數所以$\frac{\partial}{\partial\phi}E=0$

即 $\frac{p_\phi^2}{\mu a^2(1-\epsilon^2)^2}\epsilon\sin\phi+\frac{e^2}{a}\frac{\epsilon\sin\phi}{1-\epsilon^2}=0$

解 $a=\frac{p_\phi^2}{\mu e^2(1-\epsilon^2)}=\frac{h^2(k+n_r)^2}{4\pi^2\mu e^2}$

則 $E=T+V=-\frac{e^2}{2a}=-\frac{2\pi^2\mu e^4}{h^2}\times\frac{1}{(k+n_r)^2}$

$$=-\frac{2\pi^2\mu e^4}{h^2n^2}$$

定 $n=n_r+k$，n：總量子數，k：azimuthal量子數n_r：radial量子數，這與Bohr用圓的軌跡所求相同，其總能量只與總量子數有關，ie E對k是 degenerate 這種結果並非偶然，只因庫倫場（coulomb field）俱有下列特殊的性質：

1. 力是向心的，且與方向無關。
2. 位能與$\frac{1}{r}$成比例。

如果我們加上一些位能不具有以上兩種性質，那就不會有 degenerate 的結果，例如在波動力學（wave mechanics）把 Spin-orbit interaction 考慮進去則可移開一些 degeneate 的情形，超過本篇闡述的範圍，在此不浪費篇幅。

其次在氫原子光譜中我們發現有fine structure這要如何解釋呢？讓我們考慮氫原子，再加上特殊相對論來研究，$L=m_oc^2(1-\sqrt{1-\beta^2})-\frac{e^2}{r}$

m_o爲電子的靜止質量。

$v^2=\dot r^2+(r\dot\phi)^2$……④ $\beta=\frac{v}{c}$，v電子速度

$$m=\frac{m_o}{\sqrt{1-\beta^2}}\text{……………⑤}$$

$$p_r=\frac{\partial L}{\partial\dot r}=m_oc^2\frac{\frac{1}{c^2}2\dot r}{2\sqrt{1-\beta^2}}=\frac{m_o\dot r}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$$=mr^{\cdot} \cdots\cdots ⑥$$

$$p_\phi=\frac{\partial L}{\partial \phi^{\cdot}}=mr^2\phi^{\cdot} \cdots\cdots ⑦$$

由④⑤⑥⑦得 $1+\frac{1}{m_o^2c^2}(p_r^2+\frac{1}{r^2}p_\phi^2)$

$$=1+\frac{1}{m_o^2c^2}(m^2r^{\cdot 2}+m^2r^2\phi^{\cdot 2})$$

$$=1+\frac{\beta^2}{1-\beta^2}=\frac{1}{1-\beta^2} \cdots\cdots ⑧$$

則能量 $E=T+V=m_oc^2(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}-1)$

$-\frac{e^2}{r}$ 以(8)式代入得 $p_r^2+\frac{1}{r^2}p_\phi^2=2m_oE+\frac{2m_oe^2}{r}+\frac{1}{c^2}(E+\frac{e^2}{r})^2 \cdots\cdots ⑨$

$p_\phi=\mu r^2\phi^{\cdot}=$ 常數 $p\phi=\frac{kh}{2\pi}$

定 $s=\frac{1}{r}$ 則 $\frac{p_r}{p\phi}=\frac{1}{r^2}\cdot\frac{dr}{d\phi}=-\frac{ds}{d\phi}$ 代入⑨

得 $p_\phi^2\left[s^2+\left(\frac{ds}{d\phi}\right)^2\right]=2m_o(E+e^2s)+\frac{2}{c^2}(E+e^2s)-e\frac{ds}{d\phi}$

$\frac{ds}{d\phi}\neq 0$ 得 $\frac{d^2s}{d\phi^2}+s(1-\frac{e^4}{c^2p_\phi^2})$

$$=\frac{m_oe^2}{p_\phi^2}(1+\frac{E}{m_oc^2})$$

其解為 $s=A\cos\gamma\phi+B\sin\gamma\phi+C^1$

$\gamma=1-\frac{e^4}{c^2p_\phi^2}=1-\alpha^2\frac{1}{k^2}$ $\alpha=\frac{2\pi e^2}{kc}=\frac{1}{137}$

$C^1=\frac{m_oe^2}{r^2p_\phi^2}(1+\frac{E}{m_oc^2})$

固若光速趨近無限大時此結論應與古典的相同

現與kepler problem相較

$$s=\frac{1}{r}=\frac{1+\epsilon\cos\gamma\phi}{a(1-\epsilon^2)}$$

$$\frac{n_rh}{2\pi}=\oint p_rdr=p_\phi^2\epsilon^2\gamma^2\int\frac{\sin\gamma\phi}{(1+\epsilon\cos\gamma\phi)^2}d\phi$$

積分得 $1-\epsilon^2=\frac{k^2\gamma^2}{(n_r+k\gamma)^2}=\frac{k^2-\alpha^2}{(n_r+\sqrt{k^2-\alpha^2})^2}$

因此 $1+\frac{E}{m_oc^2}=\left[1+\frac{\alpha^2}{(n_r+\sqrt{k^2-\alpha^2})^2}\right]^{-\frac{1}{2}}$

得 $E=-Rhc\left[\frac{1}{(n_r+k)^2}+\frac{\alpha^2}{(n_r+k)^4}(\frac{n_r}{k}+\frac{1}{4})+\frac{\alpha^4}{(n_r+k)^6}\{\frac{1}{4}\left(\frac{n_r}{k}\right)^2+\frac{3}{2}\left(\frac{n_r}{k}\right)^2+\frac{3}{4}\frac{n_r}{k}+\frac{1}{8}\}+\frac{\alpha^6z^6}{(n_r+k)^8}\{\cdots\cdots\}+\cdots\cdots\right.$

$R=\frac{2\pi^2m_oe^4}{h^3}$ Rydberg Constant

定 $n=n_r+k$

則 $E=-\frac{Rhc}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}(\frac{n}{k}-\frac{3}{4})+\frac{\alpha^4}{n^4}\{\frac{1}{4}(\frac{n}{k})^3+\frac{3}{4}(\frac{n}{k})^2-\frac{3}{2}(\frac{n}{k})+\frac{5}{8}\}+\cdots\right]$

由此可見E除了和總量子數有關外，並與k有關。即第n個State又分為n層，對應到 $k=1,2\cdots n$。這種fine Structure在實驗上早已觀測。以後還有許多較細微的修改，譬如Spin-orbit interaction，Dirac theory，近代的量子電動力學等。如再將核子的Spin與電子軌道所產生的磁場的作用，以及核子的Spin與電子的Spin的作用考慮進去，而加以研究的結構稱為hyperfine Structure。

最後讓我們談談空間量子化(Space Quantization—)的情形。若電子繞着原子核在三度空間中運轉，因其角動量不變，故一定在三度空間中一平面上運動在此平面上用 (r, φ) 坐標表示。在三度空間中用球坐標來描述得。

$$L=\frac{\mu}{2}(r^{\cdot 2}+r^2\theta^{\cdot 2}+r^2\sin^2\theta\psi^{\cdot 2})+\frac{e^2}{r}$$

$$T=\frac{1}{2}(p_rr^{\cdot}+p_\theta\theta^{\cdot}+p_\varphi\psi^{\cdot})$$

$$L=\frac{1}{2}(p_rr^{\cdot}+p_\theta\theta^{\cdot}+p_\varphi\psi^{\cdot})+\frac{e^2}{r} \cdots\cdots ⑩$$

$$\because p_r=\frac{\partial L}{\partial r^{\cdot}}=\mu r^{\cdot} \quad p_\theta=\frac{\partial L}{\partial \theta^{\cdot}}=\mu r^2\theta^{\cdot}$$

$$p\varphi=\frac{\partial L}{\partial \psi^{\cdot}}=\mu r^2\sin^2\theta\psi^{\cdot}$$

由Wilson-Sommerfeld quantization rule可得

$\oint p_rdr=n_rh$

$\oint p_\theta d\theta=n_\theta h$

$\oint p_\varphi d\psi=mh$

且動能 $T=\frac{1}{2}(p_rr^{\cdot}+p_\varphi\varphi^{\cdot})$ (因在其運動平面上用 r, φ 表示)

由⑩知 $p_\varphi\varphi^{\cdot}=p_\theta\theta^{\cdot}+p_\varphi\psi^{\cdot}$

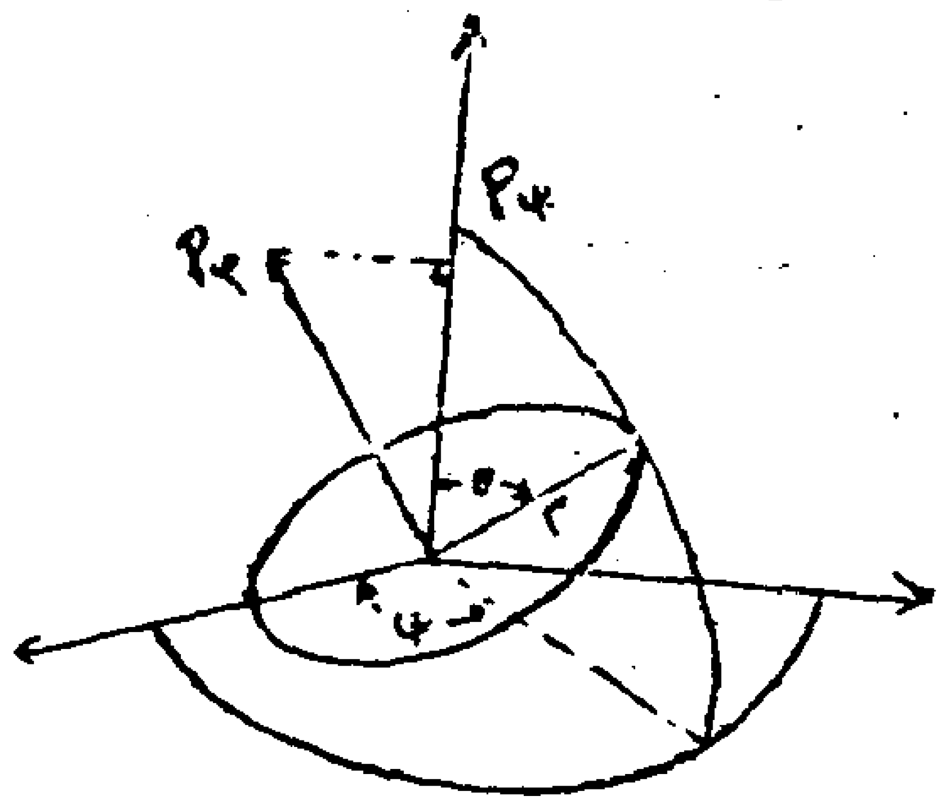
兩邊積分一週期得

$\oint p_\varphi d\varphi=\oint p_\theta d\theta+\oint p_\varphi d\psi$

即 $k=n_\theta+m$

$\mathrm{Cos}\,\alpha$（如圖＝）$\dfrac{\text{在Z方向的角動量}}{\text{總角動量}}=\dfrac{p_\varphi}{p\varphi}=\dfrac{m}{k}$

α 係 p_φ 與 p_θ 之間的夾角



k是整數

所以m可爲從-k到+k之間的整數並非古典中m是連續的此稱爲Space Quantization。

若場力是向心的，當然對各方向都有同樣的偏好，在這種情形下，空間的量子化不具有任何意義。但如果原子處在一外在磁場或電場中那麼電子的軌道面就是量子化的，也就是說只限制在（2k+1）個面上。這可由Stern及Gerlach的實驗證實。

最後談一談Stern-Gerlach的實驗：

整個過程是將一束原子通過 inhomorgeneous 的磁場中因爲原子中電子繞原子核轉有 $\vec{\mu}=\dfrac{eh}{4\pi mc}\vec{k}=\mu_\beta\vec{k}$ 的磁矩（megnetic moment）因此在通過不規則的磁場時就受了 $F_z=(\vec{\mu}\cdot\dfrac{\partial\vec{H}}{\partial z})=\mu_z\left(\dfrac{\partial\vec{H}}{\partial z}\right)_z$ 的力原子就會偏向再用detector來測

$$\mu=\mu_\beta k$$

$$\mu_z=\mu_\beta k\,\mathrm{Cos}(\vec{k},\vec{H})=\mu_\beta k\frac{m}{k}=m\mu_\beta$$

所以對k＝1，m有三種可能情形即－1，0，1原子束在通過磁場就分爲三。此證實了Space Quantization的存在。

附註：

$$\frac{d\theta}{dt}=\theta^{\cdot}\quad\frac{d\phi}{dt}=\phi^{\cdot}\quad\frac{d\varphi}{dt}=\varphi^{\cdot}\quad\frac{dx}{dt}=x^{\cdot}$$

$$\frac{dy}{dt}=y^{\cdot}\quad\frac{dz}{dt}=z^{\cdot}\quad\frac{d^2x}{dt^2}=x^{\cdot\cdot}\quad\frac{dr}{dt}=r^{\cdot}$$

上接45頁 物理底理論是什麼

這就是爲什麼一個理論的有效範圍通常是無法知道的（除了少數特殊實驗底徵示），直到我們了解了它底涵蓋理論。微粒光學和波動光學之間的長期爭執，在一個很大的程度上，就是因爲缺乏適當的有效極限底認識。

我們可看到理論存在着好幾個層次，一個理論各爲其下一個底涵蓋理論。最高層理論是最爲廣含的。物理理論的發展因此造就了一個理論的分階（a hierarchy of theories）：牛頓力學——特殊相對論——廣義相對論，非相對論的古典力學——非相對論的量子力學——相對論的量子力學——相對論的量子場論。

3. 理論分階底另一意義

人類研究周遭世界是有其先天限制的，從這個觀點來看，理論底分階更有其特殊意義。我們被限制在一個巨觀的、非相對論的、古典的世界底小範圍之內，我們行爲在其中。所有自然底觀察必須歸結到這個自然底「近似化」以便我能能去領受它：譬如，核子結構底最複雜的研究必歸結於量度儀器操作底巨觀運動，歸於人類可聞的滴答聲，或歸於我們看得到的光譜上微弱的光亮。爲了能從微觀的、相對論的、或量子力學的世界「轉移」到人類「巨觀」的世界裡，我們必須有上述理論各階層底交互關係。

量子力學是一個特殊重要的例子。除非它能付諸觀察和量度，這個理論是無意義的。但是任何量度都牽涉到量子力學系統與古典系統（我們的量度工具）間的交互作用。換言之，我們處在一個系統底古典的、非相對論的限度之內，而這個系統必須「部分地」用量子力學、「部分地」用古典力學來描述。這種情況使得量子力學若無它的古典近似值便不完備：低層理論必須包含在較高層理論中作爲適當的近似值，以便使我們能執行對高層理論的量度。

恰恰是這種情況，容許我們人類去研究自然，儘管我們只是自然的一部分。

～節譯自 F. Rohrlich 之 Classical Charged Particle, Ch.I～