

黄祖洽文集

北京师范大学出版社

黄祖洽文集

北京师范大学出版社

(京)新登字 160 号

责任编辑：马晓薇

封面设计：李 强

责任印制：贾爱蓉

图书在版编目(CIP)数据

黄祖洽文集/黄祖洽著. —北京:北京师范大学出版社,
1994. 9

ISBN 7-303-03794-2

I. 黄… II. 黄… III. 物理学-文集 IV. 04-53

中国版本图书馆 CIP 数据核字(94)第 11352 号

北京师范大学出版社出版发行

(100875 北京新街口外大街 19 号)

北京师范大学印刷厂印刷 全国新华书店经销

开本: 787×1092 1/16 印张: 21.25 字数: 540 千

1994 年 9 月北京第 1 版 1994 年 9 月北京第 1 次印刷

印数: 1—500 册

定价: 48.00 元



黄祖洽先生近照

序

本集选收了黄祖洽教授各个时期有代表性的研究论文，内容涉及分子物理、中子输运理论和统计物理的其他方面，具体问题则随不同工作岗位的要求而变化。

在新中国建立前后一段时间内，我国先后受外国的野蛮蹂躏和敌意封锁，为了在一穷二白的基础上建立起科学事业，新中国召唤并造就了大批优秀儿女，黄祖洽便是在这时期成长并有所建树的一位理论物理学家，经过高中几年刻苦锻炼，具有很强自学能力的黄祖洽，入大学后受到王竹溪教授的指导和赏识，做研究生时又为钱三强教授所器重。1950年硕士论文答辩后被吸收到中国科学院近代物理研究所，于1954年即首先钻研中子输运理论。而后，随着我国原子能事业的发展，他带领一批青年钻研核反应堆的理论和设计；其中一部分人和黄祖洽本人后来转到核武器的理论探索和设计研究。从1980年起，黄祖洽到北京师范大学低能核物理研究所致力于培养研究生，从多方面提出问题以指导论文。

黄祖洽为人正直，治学严谨，工作中虚心求实，主动认真，细致可靠，判断审慎，不盲从，有创见，并善于启迪后学，发挥众人所长。他的各个时期的研究论文也反映出他的深入实际、开拓进取的风格。所有这些，对他工作之取得优秀成绩和为事业作出的重要贡献，都不无影响。

我和黄祖洽从1949年他在清华大学作研究生时开始，相识和共事二十余年，以后也经常过从和相互切磋。衷心希望，为祖国的繁荣昌盛，黄祖洽教授在教育 and 科学事业上有更大的成就。

彭桓武

1994年4月29日

目 录

1. 关于氟化氢分子的一个计算	
《中国物理学报》8 (1951) 57	黄祖洽 (1)
2. 无限长黑圆柱情形下密恩问题 (Milne) 的近似解	
《物理学报》13 (1957) 257	黄祖洽 (8)
3. 关于中子在两种介质中的慢化问题	
《物理学报》14 (1958) 153	黄祖洽 (22)
4. 研究性重水反应堆的物理计算	
《原子能科学技术》No. 3 (1959) 136	黄祖洽 (32)
5. 中子在轻介质中的慢化问题	
《原子能科学技术文献》，物理 003，中国科委 (1961)	黄祖洽 (71)
6. 关于起反应的粒子混合系统的运动论	
《原子能科学技术文献》，物理 004，中国科委 (1961)	黄祖洽 (81)
7. 关于高温高压热核反应系统中的中子输运方程	
《原子能科学技术文献》，物理 007，中国科委 (1961)	黄祖洽 (93)
8. 关于氢化锂的冷压曲线和米—格林埃森状态方程	
《原子能科学技术文献》，物理 025，中国科委 (1963)	黄祖洽 (103)
9. 关于重水反应堆的若干物理问题	
《中国物理学会学术会议报告文集》，P141，北京 (1963)	黄祖洽 (106)
10. 铀水系统安全质量的简易估算法	
《原子能科学技术》No. 1 (1965) 13	黄祖洽 (112)
11. 中子在铀水介质中的慢化长度	
《原子能》No. 3 (1965) 198	黄祖洽 (118)
12. 高速运动介质中中子输运的新处理方法	
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 3 (1981) 37	黄祖洽 (125)
13. 中子输运对介质流体力学运动的影响	
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 3 (1982) 43	黄祖洽 (133)
14. 两 γ 近似——一维绝热不稳流问题中的一种近似方法	
《理论物理与力学论文集》，P107，科学出版社 (1982)	黄祖洽 (138)
15. 关于热核反应装置中轻核的能谱和有关的问题	
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 3 (1983) 23	黄祖洽 (150)
16. 孤立系统规划的数学分析	
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 1 (1985) 35	何泽庆 黄祖洽 (158)

17. 多层介质中激波穿透的最佳条件
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 3 (1985) 32 黄祖洽 (166)
18. On the Normal Solutions of the Boltzmann Equation with Small Knudsen Number
J. Stat. Phys. 45 (1986) 561 E. J. Ding and Z. Q. Huang (172)
19. On the Initial Layer Solution of the Boltzmann Equation with Small Knudsen Number
J. Stat. Phys. 45 (1986) 589 E. J. Ding and Z. Q. Huang (200)
20. 高温轻介质中辐射流体力学的等温近似
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 1 (1987) 25 黄祖洽 (222)
21. 体心立方金属中空位迁移规律
《物理学报》36 (1987) 1122 朱慧琰, 黄祖洽 (232)
22. 硅片氧化过程及其对硅中杂质分布影响的分析
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 3 (1988) 27 黄祖洽 黄雪梅
..... (243)
23. $H_2(X^1\Sigma_g^+) - H_2(E^1\Sigma_g^+)$ 系统的相互作用
《物理学报》, 38 (1989) 1150 吕燕南, 黄祖洽 (252)
24. A Possible Explanation of the Room Temperature Nuclear Fusion
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 2 (1989) 43 Huang Zu-qia ... (257)
25. On the Laser Induced Synthesis of Dense Hydrogen
Commun. Theor. Phys. 15 (1991) 103. Yan-nan Lu, Zu-qia Huang and Huan-wu Peng (260)
26. 相变动力学中的若干问题
《北京师范大学学报》(自然科学版) No. 2 (1991) 169 黄祖洽 (264)
27. 压缩真空态中三能级原子的定态共振荧光
《物理学报》, 40 (1991) 1575 杨国健, 黄祖洽, 胡岗 (268)
28. The wetting transition in binary Sullivan fluid mixtures
J. Phys: Condens. Matter 4 (1992) 6189 Y Song, E J Ding and Z Q Huang (277)
29. Capillary condensation in binary Sullivan fluid mixtures confined between two parallel walls
J. Phys. : Condens. Matter 5 (1993) 3139 Y Song, Z Q Huang and E J Ding (297)
30. On a dynamics approach to wetting transitions
Modern Physics Letters B 7 (1993) 421 Z. Q. Huang, E. J. Ding and J. Y. Chen (309)
31. 读《黄祖洽文集》 何祚庥 (328)
32. 黄祖洽发表的论文和著作目录 (331)

關於氟化氫分子的一個計算*

黃 祖 洽**

(清 華 大 學 物 理 系)

在這篇短文裏,我們根據量子力學,計算氟化氫分子的各個構造常數。計算時採用氟離子被氫離子極化的看法,利用變分法計算;氟離子中各個電子的哈吹氏函數,用了以前布朗氏¹所計算的結果。氟離子所有電子的總的波函數,是一個行列式的形狀,用 ψ_0 代表之。我們假定氟化氫分子中所有電子的總的波函數 ψ , 是如下的簡單形狀:

$$\psi \propto (1 + as) \psi_0$$

式中參變數 a 將由變分法決定,而 s 代表各電子在分子軸方向的座標的總和。加入這個 $1 + as$ 因子,是想粗淺地來表示氟離子所受氫離子的極化影響。茲列表比較所得的計算結果與查到的實驗結果², 如下: (結合能指分解分子為兩離子而計)

	分子距離	結合能	振動波數	電偶矩
計算值	1.11 $\text{\AA}$	10.84 ev	2797 cm^{-1}	2.13 $debves$
實驗值	0.92 $\text{\AA}$	15.66 ev	3962 cm^{-1}	1.91 $debves$

* 本文根據於作者 1950 在清華大學所交入碩士論文。

** 目前在北京中國科學院近代物理研究所工作。

1 Brown, *Phys. Rev.* **44**, (1933), 223.

2 Landolt-Bornstein, *Phys Chem Tabellen*, 1935, Smyth and Hanna, *J. Am. Chem. Soc.* **68**, (1946), 171

A QUANTUM MECHANICAL CALCULATION FOR THE MOLECULE HF*

By HUANG TZU-CHIA**

Department of Physics, Tsing Hua University, Peking

(Received February 22, 1951)

ABSTRACT

A quantum-mechanical variational calculation is made for the molecule HF, based on the ionic model, the fluorine negative ion being polarized on the whole by the proton. Brown's numerical results for the Hartree-Fock functions of the fluorine ion are used. The calculated results do not agree well with the experimental results, which indicates that, even for this most polar molecule, the above model serves only for a very poor representation of the motion of the electrons in the molecule.

Since we shall confine ourselves to internuclear distances large in comparison with the 1s orbit of the fluorine atoms, the two 1s electrons can be grouped together with the fluorine nucleus. We split the Hamiltonian for the remaining eight electrons of the molecule HF into the following two parts, in accordance with the ionic model:

$$H = H_0 + v. \quad (1)$$

Here H_0 represents the Hamiltonian for the fluorine ion, while v denotes the interaction of this ion with the proton. If we denote the distance of the j -th electron from the proton by r'_j , and denote the internuclear distance by R , we have, using atomic units throughout.

$$v = \frac{7}{R} - \sum_{j=1}^8 \frac{1}{r'_j}. \quad (2)$$

For the free fluorine ion the Hartree-Fock functions have been obtained approximately by Brown¹, the radial functions for 1s, 2s and 2p are denoted

*Based on an M. Sc. Thesis, Tsing Hua University, 1950.

**Now at the Institute of Modern Physics, Academia Sinica, Peking.

1. *Phys. Rev.* **44** (1933), 223.

by f_1 , f_2 and f_3 . Regarded as an eight-electron system we simply take for the wave function of the free fluorine ion the following determinant

$$\psi_0 = (8!)^{-\frac{1}{2}} \det |u_1, u_2, u_3, \dots, u_8|, \quad (3)$$

with

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= \frac{f_2}{r} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cdot \alpha, & u_2 &= \frac{f_2}{r} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cdot \beta, \\ u_3 &= \frac{f_3}{r} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cos \varphi \cdot \alpha, & \dots, u_8 &= \frac{f_3}{r} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta \cdot \beta. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Here the spin functions are denoted by α and β as usual. The various one-electron functions are normalized and are mutually orthogonal, so the wave function (3) is normalized to unity.

For the molecule HF we shall use the variational method and try to take into account the polarization of the fluorine ion by the proton by using a variational function of the following form:

$$\psi = S \psi_0, \quad S = \frac{1 + a s}{\sqrt{1 + a^2 s^2}}, \quad s = \sum_j z_j = \sum_j r_j \cos \theta_j. \quad (5)$$

Here the parameter a is to be determined by minimizing the energy. The polar axis for the spherical coordinate is directed from the origin at the fluorine nucleus to the proton. The bar on the top of a letter denotes the average with the weight ψ_0^2 . Hence by symmetry s vanishes, so the ψ of (5) is correctly normalized to unity.

We shall refer the energy of the molecule to that of free ions at infinite distance of separation. This is given by the minimum of the following quantity

$$\begin{aligned} \varepsilon(a) \equiv & \int \psi H \psi d\tau - \int \psi_0 H_0 \psi_0 d\tau = \int v S^2 \psi_0^2 d\tau \\ & + \int \psi_0 S (H_0 S - S H_0) \psi_0 d\tau + \int \psi_0 S^2 H_0 \psi_0 d\tau - \int \psi_0 H_0 \psi_0 d\tau. \end{aligned} \quad (6)$$

Here the last two terms will cancel each other exactly if ψ_0 is an exact eigenfunction for H_0 . Now ψ_0 is obtained only approximately by the Hartree-Fock

method, these terms will not cancel exactly, leaving a difference which we shall neglect in what follows. The integral containing the commutator between H_0 and S can be transformed by means of Green's theorem, and we get

$$\begin{aligned} \int \psi_0 S (H_0 S - S H_0) \psi_0 d\tau &= \frac{a^2}{1 + a^2 \bar{s}^2} \int \psi_0 s \frac{1}{2} \sum_j (z_j \nabla_j^2 - \nabla_j^2 z_j) \psi_0 d\tau \\ &= - \frac{a^2}{1 + a^2 \bar{s}^2} \int s \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial z_j} (\psi_0^2) d\tau = \frac{4 a^2}{1 + a^2 \bar{s}^2} \end{aligned} \quad (7)$$

Thus we get for (6) the simple expression

$$\epsilon(a) = \bar{v} + \frac{A a + B a^2}{1 + C a^2}, \quad (8)$$

with the abbreviation

$$A = 2 \bar{v} s, \quad B = \bar{v} \bar{s}^2 - \bar{v} \cdot \bar{s}^2 + 4, \quad C = \bar{s}^2. \quad (9)$$

The expression (8) reaches its minimum

$$\epsilon = \bar{v} + \frac{1}{2} A a = \bar{v} + \frac{B - \sqrt{B^2 + C A^2}}{2 C} \quad (10)$$

at

$$a = \frac{B - \sqrt{B^2 + C A^2}}{C A}. \quad (11)$$

The value of this parameter is needed for the evaluation of the dipole moment of the molecule, for which we have

$$\mu = \int \psi (R - \sum_j z_j) \psi d\tau = R - \frac{2 a C}{1 + C a^2} \quad (12)$$

because s and s^3 vanish by symmetry.

We note the following simple rules for expressing the average values

of a symmetrical sum with the weight ψ_o^2 in terms of matrix elements involving the one-electron functions u_n :

$$\overline{\sum_j a_j} = \sum_n (n | \alpha | n), \quad (13)$$

$$\overline{\sum_{j \neq k} \sum a_j \beta_k} = \sum_m \sum_n \left\{ (m | \alpha | m) (n | \beta | n) - (n | \alpha | m) (m | \beta | n) \right\}, \quad (14)$$

$$\overline{\sum_{i \neq j \neq k \neq i} \sum a_i \beta_j \gamma_k} = \sum_l \sum_m \sum_n \sum \pm (l' | \alpha | l) (m' | \beta | m) (n' | \gamma | n). \quad (15)$$

The last summation in (15) includes the six permutations of l , m and n for l' , m' and n' , with plus or minus sign for even or odd permutation. Furthermore, for evaluating the one-electron matrix elements of $1/r'$, we use the following expansion into Legendre's polynomials

$$\frac{1}{r'} = \sum_{l=0}^{\infty} \delta_l(r, R) P_l(\cos \theta), \quad \delta_l(r, R) = \begin{cases} r^l / R^{l+1} & \text{for } r < R, \\ R^l / r^{l+1} & \text{for } r > R, \end{cases} \quad (16)$$

In this way we get, after some calculation,

$$v = \frac{7}{R} - \int_0^{\infty} (2f_2^2 + 6f_3^2) \delta_0 dr, \quad (17)$$

$$C = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} (2f_2^2 + 6f_3^2) r^2 dr - \frac{4}{3} \left\{ \int_0^{\infty} f_2 f_3 r dr \right\}^2, \quad (18)$$

$$A = -\frac{2}{3} \int_0^{\infty} (2f_2^2 + 6f_3^2) r \delta_1 dr + \frac{8}{3} \int_0^{\infty} f_2 f_3 r dr \int_0^{\infty} f_2 f_3 \delta_1 dr, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} B = & 4 - \frac{1}{3} \int_0^{\infty} (2f_2^2 + 6f_3^2) r^2 (\delta_0 + \frac{2}{5} \delta_2) dr \\ & + \frac{2}{3} \int_0^{\infty} f_2^2 r^2 dr \int_0^{\infty} f_3^2 \delta_0 dr + 2 \int_0^{\infty} f_3^2 r^2 dr \int_0^{\infty} f_3^2 (\delta_0 + \frac{4}{25} \delta_2) dr \\ & + \frac{8}{3} \int_0^{\infty} f_2 f_3 r dr \int_0^{\infty} f_2 f_3 r (\delta_0 + \frac{2}{5} \delta_2) dr \\ & - \frac{4}{3} \left\{ \int_0^{\infty} f_2 f_3 r dr \right\}^2 \int_0^{\infty} \left\{ f_2^2 \delta_0 + f_3^2 (\delta_0 + \frac{2}{5} \delta_2) \right\} dr. \end{aligned} \quad (20)$$

Here integrals of the following types occur:

$$I_l = R^{-l-1} \int_0^R (2f_2^2 + 6f_3^2) r^l dr, \quad I'_l = R^{-l-1} \int_R^\infty (2f_2^2 + 6f_3^2) r^l dr;$$

$$J_l = R^{-l-1} \int_0^R f_2 f_3 r^l dr, \quad J'_l = R^{-l-1} \int_R^\infty f_2 f_3 r^l dr;$$

$$L_l = R^{-l-1} \int_0^R f_3^2 r^l dr, \quad L'_l = R^{-l-1} \int_R^\infty f_3^2 r^l dr.$$

Those which we need are calculated by numerical integration, using the numerical values for f_2 and f_3 given by Brown. The results are shown in the Table below:

TABLE 1. Values for various integrals

R	I_0	I_2	I_4	I'_{-1}	J_0	J_1
1.0	3.567	1.756	1.111	2.795	-.4301	-.3117
1.2	3.771	1.685	1.012	1.912	-.4653	-.3210
1.4	3.776	1.527	.8716	1.324	-.4698	-.3015
1.6	3.671	1.345	.7305	.9301	-.4575	-.2704
1.8	3.514	1.167	.6036	.6640	-.4366	-.2418
2.0	3.334	1.005	.4960	.4827	-.4123	-.2142
2.2	3.151	.8640	.4071	.3568	-.3873	-.1889
2.5	2.890	.6907	.3049	.2326	-.3521	-.1567
3.0	2.510	.4852	.1922	.1210	-.3009	-.1153
3.5	2.201	.3465	.1252	.0667	-.2607	-.0875
4.0	1.952	.2549	.0842	.0380	-.2291	-.0680
R	J_2	J'_{-2}	L_0	L_1	L'_{-1}	L'_{-2}
1.0	-.1840	-.2464	.4205	.2007	.3516	.1783
1.2	-.1708	-.1664	.4417	.1927	.2504	.1352
1.4	-.1488	-.1108	.4430	.1766	.1881	.1021
1.6	-.1252	-.0730	.4332	.1582	.1319	.0771
1.8	-.1032	-.0481	.4176	.1401	.0974	.0583
2.0	-.0842	-.0319	.3991	.1231	.0728	.0448
2.2	-.0683	-.0213	.3798	.1078	.0551	.0344
2.5	-.0501	-.0113	.3513	.0885	.0369	.0238
3.0	-.0299	-.0043	.3087	.0641	.0197	.0126
3.5	-.0182	-.0015	.2722	.0471	.0110	.0073
4.0	-.0115	-.0005	.2425	.0353	.0063	.0032

$$\text{As } R \rightarrow \infty, \text{ we have } I_2 \rightarrow 21.422 R^{-3}, \quad J_1 \rightarrow -1.101 R^{-2}, \\ J_0 \rightarrow -0.9196 R^{-1}, \quad L_2 \rightarrow 3.110 R^{-3}.$$

From the numerical values given in Table 1 for the various integrals we get, by (17)–(20) and (10)–(12), the following results for the energy of the

molecule and its dipole moment as a function of the internuclear distance R , as shown in Table 2:

TABLE 2. *Energy and dipole moment for the molecule HF*

R	$\bar{v}$	A	B	$Aa/2$	ϵ	μ
1.0	.638	-1.395	6.061	-.0751	.563	-.117
1.2	.150	-1.445	5.653	-.0852	.065	-.009
1.4	-.100	-1.450	5.278	-.0910	-.191	.125
1.6	-.226	-1.419	4.952	-.0923	-.318	.286
1.8	-.291	-1.346	4.708	-.0876	-.379	.485
2.0	-.317	-1.261	4.518	-.0801	-.397	.711
2.2	-.326	-1.174	4.369	-.0722	-.398	.946
2.5	-.323	-1.046	4.204	-.0603	-.383	1.313
3.0	-.298	-0.862	4.031	-.0435	-.342	1.946
3.5	-.267	-0.703	3.954	-.0300	-.297	2.595
4.0	-.240	-0.580	3.917	-.0208	-.261	3.229

$$C = 5.524$$

By interpolation from the values given in Table 2, we get the following calculated values for the molecular constants shown in Table 3, where comparison with the experimental values is also made.

TABLE 3. *Constants for the molecule HF*

	R_0	ϵ_0	μ_0	$\tilde{\nu}_e$
Calculated values in atomic units	2.11	-.399	.843	(.2755)
Calculated values in usual units	1.11 Å	-10.84 eV	2.13 debyes	2797 cm^{-1}
Experimental values ²	0.92 Å	-15.66 eV	1.91 debyes	3962 cm^{-1}

In Table 3, $\tilde{\nu}_e$ denotes the vibrational frequency of the molecule, but the calculated value in atomic units refers to the curvature at the equilibrium distance, i.e. $(d^2\epsilon/dR^2)$ at $R=R_0$ where $d\epsilon/dR$ vanishes. Finally I wish to thank Professor H. W. Peng for suggesting the problem and for his guidance throughout the work.

2. See Landolt-Bornstein, *Physikalisch-Chemische Tabellen* (1935), and Smyth and Hannay, *J. Am. Chem. Soc.* **68** (1946), 171.

無限長黑圓柱情形下密恩 (Milne) 問題的近似解 (球諧函數展開法)*

黃 祖 洽

(中國科學院物理研究所)

提 要

本文探討當一無限長黑圓柱放在一滿足密恩問題中諸條件的無限介質中時，介質中的中子分佈。

計算採用球諧函數展開法，把中子分佈函數對球諧函數展開，保留展開式的起首若干項，從而求得近似解。具體計算作到 P_3 近似為止。

表 2 及附圖示各次近似中對於圓柱半徑 a 的不同值求出的外推長度 λ 之值。作為長度單位的是中子在介質中的平均自由路程 l 。

為比較起見，我們在圖中也畫出了達維遜 (Davison) 給出的曲線 (曲線 D)。他的曲線是根據 $a \ll 1$ 及 $a \gg 1$ 二極限情形下派耳斯 (Peierls) 積分方程的近似解，中間參照 P_3 近似的結果畫出的。由圖可見， a 大時 P_3 近似的結果已很接近於曲線 D ，而在 $a = 1$ 附近，則曲線 D 似乎還應該略低一些，才更符合曲線 P_3 的趨勢 (例如，像圖中虛線所表示的那樣)。

一. 引 言

本文考慮當一無限長黑圓柱放在一滿足密恩問題中諸條件的無限介質中時，介質中的中子分佈。這些條件是：

- (1) 介質中在有限遠處沒有中子源，但在無限遠處有一定的中子流沿着徑向向黑圓柱流來；
- (2) 中子在介質中的吸收截面為零，散射截面與能量無關，且為各向同性；
- (3) 中子在散射時不損耗能量。

* 1957年2月23日收到。

本文基本上於 1955 年 6 月已完成。同年 8 月，在日內瓦和平利用原子能國際會議上，捷克的物理學家 Ладислав Трифай^[1] 發表了同樣題目的文章；但該文只算出 P_3 近似，故本文仍發表——作者。

在黑圓柱表面處的邊界條件爲：射入其中的中子均被吸收，因此沒有中子由其中射出。

我們採用球諧函數展開法，把中子分佈函數對球諧函數展開，保留展開式的起首若干項，從而求得近似解，具體計算作到 P_5 近似爲止。

二. 輸運方程及邊界條件

選擇長度單位，使中子在介質中的平均散射自由路程 $l = 1$ ；選擇時間單位，使中子在介質中的速度 $v = 1$ 。

命 a 爲黑圓柱的半徑。取黑圓柱的軸爲圓柱坐標 z, ρ, θ 的 z -軸。根據上述條件 (1)，在無限遠處，介質中有一沿 $(-\rho)$ 方向的中子流 j 。

設 $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ 爲中子在介質中的分佈函數，其中 $\mathbf{r}$ 爲表示中子位置的徑矢量： $\mathbf{r} = (\rho, z, \theta)$ ，而 $\mathbf{\Omega}$ 爲在中子運動速度方向的單位矢量。

由問題的圓柱對稱性知， $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ 與 z 及 θ 無關，而且在 $\mathbf{\Omega}_z$ 換成 $-\mathbf{\Omega}_z$ 或 $\mathbf{\Omega}_\theta$ 換成 $-\mathbf{\Omega}_\theta$ 時不變，故中子在介質中運動所服從的玻耳茲曼輸運方程在我們的情形下可寫成：

$$\left[\mathbf{\Omega}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} (1 - \mathbf{\Omega}_\rho^2 - \mathbf{\Omega}_z^2) \frac{\partial}{\partial \mathbf{\Omega}_\rho} + 1 \right] \psi(\rho; \mathbf{\Omega}_\rho, \mathbf{\Omega}_z^2) = \frac{1}{4\pi} \int \psi(\rho; \mathbf{\Omega}'_\rho, \mathbf{\Omega}'_z^2) d\mathbf{\Omega}', \quad (\rho > a). \quad (1)$$

爲便於計算起見，我們引進代替變數 $\mathbf{\Omega}_\rho$ 及 $\mathbf{\Omega}_z$ 的新變數 α 及 β ：

$$\mathbf{\Omega}_\rho = \cos \alpha, \quad \mathbf{\Omega}_z = \sin \alpha \cos \beta \quad (\mathbf{\Omega}_\theta = \sin \alpha \sin \beta). \quad (2)$$

於是方程 (1) 可寫爲：

$$\left[\cos \alpha \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \left(\sin \alpha \sin^2 \beta \frac{\partial}{\partial \alpha} + \cos \alpha \cos \beta \sin \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \right) + 1 \right] \psi(\rho; \alpha, \beta) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\beta' \int_0^\pi \psi(\rho; \alpha', \beta') \sin \alpha' d\alpha' \quad (\rho > a) \quad (3)$$

注意，若以 $\sin \alpha d\alpha d\beta$ 乘上式兩邊，再對 α 及 β 積分，使得

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left[\int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \cos \alpha \cdot \psi \sin \alpha d\alpha \right] + \frac{1}{\rho} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \cos \alpha \cdot \psi \sin \alpha d\alpha = 0 \quad (\rho > a),$$

或

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left[\rho \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \cos \alpha \cdot \psi \sin \alpha d\alpha \right] &= 0 \quad (\rho > a), \\ 2\pi \rho \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \cos \alpha \cdot \psi(\rho; \alpha, \beta) \sin \alpha d\alpha &= \text{常數} \quad (\rho > a) \end{aligned}$$

這就是中子運動的連續方程，它是我們假設介質不吸收中子及介質中無中子源的後果。由無限遠處的條件，上式中的常數應該等於 $-j$ ，即

$$2\pi\rho \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \cos \alpha \cdot \psi(\rho; \alpha, \beta) \sin \alpha d\alpha = -j \quad (\rho > a). \quad (4)$$

在黑圓柱表面 ($\rho=a$) 處，沒有中子由圓柱內部射至外部介質中，故 $\psi(\rho; \alpha, \beta)$ 應滿足下列條件：

$$\psi\left(a; \alpha < \frac{\pi}{2}, \beta\right) = 0 \quad (5)$$

三. 對球諧函數的展開

球諧函數：

$$Y_{lm}(\alpha, \beta) = P_l^m(\cos \alpha) \cdot \begin{cases} \cos m\beta \\ \sin m\beta \end{cases} \quad (l=0, 1, 2, \dots; |m| \leq l),$$

在單位球面上組成一組完整系，故可將 $\psi(\rho; \alpha, \beta)$ 對這些函數展開。今由對稱性知：

$$\psi(\rho; \alpha, -\beta) = \psi(\rho; \alpha, \pi - \beta) = \psi(\rho; \alpha, \beta), \quad (6)$$

故在 $\psi(\rho; \alpha, \beta)$ 對球諧函數的展開式中，只會出現包含 $P_l^m(\cos \alpha) \cos m\beta$ ($m =$ 正偶數) 的各項，即展開式具有下列形狀：

$$\psi(\rho; \alpha, \beta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0, \text{偶} \geq 0} \psi_{lm}(\rho) P_l^m(\cos \alpha) \cos m\beta, \quad (7)$$

式中

$$\psi_{lm}(\rho) = \frac{2l+1}{2\lambda_m} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \int \psi(\rho; \alpha, \beta) P_l^m(\cos \alpha) \cos m\beta dQ_{\alpha\beta}, \quad (8)$$

式中引進了記號：

$$\lambda_m = \int_0^{2\pi} \cos^2 m\beta d\beta = (1 + \delta_{m0}) \pi, \quad (9)$$

$$\delta_{m0} = \begin{cases} 1, & \text{若 } m=0, \\ 0, & \text{若 } m \neq 0, \end{cases}$$

$$\int \dots dQ_{\alpha\beta} = \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \dots \sin \alpha d\alpha.$$

為書寫方便起見，我們定義 l 或 m 為負時或 $l < m$ 時的 $\psi_{lm}(\rho) \equiv 0$ 。

由 (8) 知， $4\pi\psi_{00}(\rho)$ 為中子密度，而 $\frac{4\pi}{3} \psi_{10}$ 為合成中子流密度。

用 $P_n^m(\cos \alpha) \cos m\beta$ 乘方程 (3) 中各項，並對 $dQ_{\alpha\beta}$ 積分。應用通常的球諧函數