第五章、中心力场

§5.1 中心力场中粒子运动的一般性质

自然界中，我们遇到的许多外场都是中心力场。在这一势场中，角动量 $\mathbf{L}$ 是守恒的。一个在这种势场中运动的粒子的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},\,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},\,t)+V(r)\Psi(\mathbf{r},\,t). \tag{1}$$

由于 $V(r)$ 仅与 r 有关，我们可以采用球坐标系。在这一坐标系中，算符 ∇^2 可以写作

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right). \tag{2}$$

代入方程后，我们有

$$\begin{aligned} & i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},\,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\mathbf{r},\,t)\\ -\ & \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi(\mathbf{r},\,t)+V(r)\Psi(\mathbf{r},\,t)\\ =\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\mathbf{r},\,t)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\Psi(\mathbf{r},\,t)+V(r)\Psi(\mathbf{r},\,t). \end{aligned} \tag{3}$$

由于 $V(r)$ 不含时间，这是一个定态问题。我们可以取

$$\Psi(\mathbf{r},\,t)=\Psi(r,\,\theta,\,\varphi)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{4}$$

由此，我们得到定态的 Schrödinger 方程为

$$E\,\Psi(r,\,\theta,\,\varphi)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r,\,\theta,\,\varphi)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\Psi(r,\,\theta,\,\varphi)+V(r)\Psi(r,\,\theta,\,\varphi). \tag{5}$$

又由于 $Y_{LM}(\theta,\,\varphi)$ 为 $\hat{L}^2$ 的本征函数，我们可取

$$\Psi(r,\,\theta,\,\varphi)=R_L(r)Y_{LM}(\theta,\,\varphi). \tag{6}$$

代入方程后，我们有

$$E\,R_L(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}R_L(r)+\frac{L(L+1)\hbar^2}{2mr^2}R_L(r)+V(r)R_L(r). \tag{7}$$

作为一个有用的变换，我们令

$$R_L(r) = \frac{\chi_L(r)}{r}. \tag{8}$$

代入方程后，我们进一步得到

$$\chi_L''(r) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{L(L+1)}{r^2}\right)\chi_L(r) = 0. \tag{9}$$

这是一个向心力场中粒子运动的一般本征方程。它具有如下的特点

(1) 量子数 M 并不出现在这一方程中。因此， E 是 $2L+1$ 重简并的。

(2) 假设

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0. \tag{10}$$

则当 $r \to 0$ 时，上式可退化为

$$\chi_L''(r) - \frac{L(L+1)\hbar^2}{r^2}\chi_L(r) = 0. \tag{11}$$

令 $\chi_L(r) = r^s$ 。我们得到

$$s(s-1) - L(L+1) = 0. \tag{12}$$

它有两个解 $s_1 = L+1$ 和 $s_2 = -L$ 。因此，当 $r \to 0$ 时，我们有

$$R_L^{(1)}(r) \sim r^L, \tag{13}$$

或是

$$R_L^{(2)}(r) \sim r^{-L-1}. \tag{14}$$

为了决定取哪一个解，我们注意到，在一个以 $r = 0$ 为中心，半径为 δ 的小圆球中，粒子出现的几率应该正比于

$$P_\delta \equiv \int_0^\delta R_L^2(r) r^2 dr. \tag{15}$$

我们要求它是一个有限的数。现在若将 $R_L^{(2)}$ 代入，则我们有

$$P_\delta \equiv \int_0^\delta \frac{1}{r^{2(L+1)}} r^2 dr. \tag{16}$$

当 $L\geq 1$ 时，这一积分是发散的。因此，我们必须舍去 $R_L^2(r)$ 。即使当 $L=0$ 时， $R_0^{(2)}(r)\sim r^{-1}$ 也是不可接受的。原因见教科书 193 页。因此， s 只能取值为 $L+1$ 。即我们有

$$\chi_l(r)\sim r^{L+1}, \tag{17}$$

当 $r\to 0$ 时成立。

在我们开始求解一些具体问题之前，需要指出一点的是，在实际中遇到的中心力场问题，常常是两体问题。例如，两个质量分别为 m_1 和 m_2 的粒子之间的相互作用为 $V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$ 。这个体系的 Schrödinger 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_2^2+V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\right)\Psi(\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2)=E\Psi(\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2). \tag{18}$$

实际上，此问题是可以化为一个单粒子向心力场问题的。为此，我们引入质心坐标

$$\mathbf{R}=\frac{m_1\mathbf{r}_1+m_2\mathbf{r}_2}{m_1+m_2} \tag{19}$$

和相对坐标

$$\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2. \tag{20}$$

依赖于这两个坐标，我们有

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1}=\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial x}\\
\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\\
&= \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2}{\partial X\partial x}+\frac{\partial^2}{\partial x^2},
\end{aligned} \tag{21}$$

以及

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}-\frac{\partial}{\partial x}\\
\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}-\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\\
&= \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}-\frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial^2}{\partial X\partial x}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}
\end{aligned} \tag{22}$$

代入 Schrödinger 方程后，我们有

$$\begin{aligned}
&-\hbar^2\left(\frac{m_1}{2(m_1+m_2)^2}\nabla_{\mathbf{R}}^2+\frac{1}{2m_1}\nabla_{\mathbf{r}}^2+\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{R}\partial\mathbf{r}}+\frac{m_2}{2(m_1+m_2)^2}\nabla_{\mathbf{R}}^2\right.\\
+&\left.\frac{1}{2m_2}\nabla_{\mathbf{r}}^2-\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{R}\partial\mathbf{r}}\right)\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r})+V(r)\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r})\\
=&\ E\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r}).
\end{aligned}\tag{23}$$

化简后，我们有

$$\begin{aligned}
&-\hbar^2\left(\frac{1}{2(m_1+m_2)}\nabla_{\mathbf{R}}^2+\frac{m_1+m_2}{2m_1m_2}\nabla_{\mathbf{r}}^2\right)\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r})+V(r)\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r})\\
=&\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2+V(r)\right)\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r})\\
=&\ E\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r}).
\end{aligned}\tag{24}$$

这里， $\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ 称为折合质量。若我们令

$$\Psi(\mathbf{R},\,\mathbf{r})=e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}\Phi(\mathbf{r}),\tag{25}$$

则上式可以化为

$$\frac{\hbar^2K^2}{2M}\Phi(\mathbf{r})-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2\Phi(\mathbf{r})+V(r)\Phi(\mathbf{r})=E\Phi(\mathbf{r}),\tag{26}$$

或是

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2\Phi(\mathbf{r})+V(r)\Phi(\mathbf{r})=(E-E_R)\Phi(\mathbf{r}).\tag{27}$$

这是向心力场中一个质量为 μ 的粒子运动所满足的 Schrödinger 方程。

§5.2 无穷深球方势阱

我们要研究的第一个例子是下面形式的势阱

$$U(r)=\begin{cases}0, & r\le R;\\ \infty, & r>R.\end{cases}\tag{28}$$

将它代入 $\chi_L''(r)$ 所满足的方程后，我们有

$$\chi_L''(r)+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E-\frac{L(L+1)}{r^2}\right)\chi_L(r)=0,\tag{29}$$

当 $r < R$ 时成立。

先考虑 $L = 0$ 的情况。此时，我们有

$$\chi_0''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi_0(r) = 0. \tag{30}$$

其解为

$$\chi_0(r) = A e^{ikr} + B e^{-ikr}. \tag{31}$$

这里， $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ 。我们要求满足边条件 $\chi_0(0) = \chi_0(R) = 0$ 的解。这是由于，当 $r > R$ 时，粒子进入该区域的几率为零。而另一方面，在球心 $r = 0$ 附近，粒子是处于近乎自由的状态。此时，若 $\chi(0) \neq 0$ ，则波函数就会在球心处有一个奇点。这显然是不合理的。利用这些边条件，我们可得

$$\chi_0(r) = C \sin(kr). \tag{32}$$

并且，关系式 $kR = n_r \pi,\ n_r = 1, 2, \cdots$ 成立。从此，我们解出

$$E_{n_r,0} = \frac{n_r^2 \pi^2 \hbar^2}{2mR^2}. \tag{33}$$

从波函数的归一化条件，我们又得到

$$C^2 \int_0^R \frac{1}{r^2} \sin^2(k_{n_r} r)\, r^2 dr = 1. \tag{34}$$

解此方程后，我们得到

$$C = \sqrt{\frac{2}{R}}. \tag{35}$$

当 $L \neq 0$ 时，我们有方程

$$\frac{d^2 R_L(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_L(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} E R_L(r) - \frac{L(L+1)}{r^2} R_L(r) = 0. \tag{36}$$

解此方程，我们可得

$$R_L(r) = C j_L(kr). \tag{37}$$

这里 $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ 。而 $j_L(kr)$ 则为 L 阶球 Bessel 函数。本征值 E 由条件

$$j_L(kR) = 0 \tag{38}$$

来决定。其中的一些能级在教科书 198 页上给出。

在教科书 200 至 201 页上，还讨论了有限深方势阱的解。其中一个重要的结论是，只有当势阱足够深的时候，才可能存在粒子的束缚态。

§5.3 三维各向同性谐振子

另外一个可以严格求解的例子是三维各向同性谐振子势

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega_0^2r^2. \tag{39}$$

此时的 Schrödinger 方程为

$$R''_L(r)+\frac{2}{r}R'_L(r)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\omega_0^2r^2\right)-\frac{L(L+1)}{r^2}\right]R_L(r)=0. \tag{40}$$

这一微分方程有两个奇异点。一个是 $r=0$ ，另一个为 $r=\infty$ 。

当 $r\to\infty$ 时，我们有

$$R''_L(r)-\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}r^2R_L(r)\cong 0. \tag{41}$$

若取 $R_L(r)=e^{\alpha r^2}$ ，我们有

$$R'_L(r)=2\alpha r^2e^{\alpha r^2},\quad R''_L(r)=2\alpha e^{\alpha r^2}+4\alpha^2r^2e^{\alpha r^2}. \tag{42}$$

从而有

$$\begin{aligned} R''_L(r)-\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}r^2R_L(r) &= 2\alpha e^{\alpha r^2}+\left(4\alpha^2-\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}\right)r^2e^{\alpha r^2} \\ &\cong \left(4\alpha^2-\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}\right)r^2e^{\alpha r^2}, \end{aligned} \tag{43}$$

若取 $\alpha^2=\frac{m^2\omega_0^2}{4\hbar^2}$ ，则上式的右边为零。因此，当 $r\to\infty$ 时，我们得到渐进解

$$R_L(r)\cong\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right). \tag{44}$$

而当 $r\to 0$ 时，我们有

$$R''_L(r)+\frac{2}{r}R'_L(r)-\frac{L(L+1)}{r^2}R_L(r)\cong 0. \tag{45}$$

如前所述，在 $r=0$ 领域有意义的解为

$$R_L(r) = r^L. \tag{46}$$

现在，我们令

$$R_L(r) = r^L \exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right) u_L(r). \tag{47}$$

由此，我们得到

$$\begin{aligned}
R'_L(r) &= Lr^{L-1}\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u_L(r) + r^L\left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}r\right)\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u_L(r) \\
&+ r^L\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u'_L(r) \\
R''_L(r) &= L(L-1)r^{L-2}\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u_L(r) + 2Lr^{L-1}\left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}r\right)\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u_L(r) \\
&+ 2Lr^{L-1}\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u'_L(r) + r^L\left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u_L(r) \\
&+ r^L\left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}r\right)^2\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u_L(r) + 2r^L\left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}r\right)\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u'_L(r) \\
&+ r^L\exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}r^2\right)u''_L(r).
\end{aligned} \tag{48}$$

代入方程 (40) 后，我们有

$$\begin{aligned}
& r^L u''_L(r) - \frac{2m\omega_0}{\hbar}r^{L+1}u'_L(r) + \frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}r^{L+2}u_L(r) + \left(-\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)r^L u_L(r) \\
+ \; & 2Lr^{L-1}u'_L(r) - \frac{2Lm\omega_0}{\hbar}r^L u_L(r) + L(L-1)r^{L-2}u_L(r) \\
+ \; & 2Lr^{L-2}u_L(r) - \frac{2m\omega_0}{\hbar}r^L u_L(r) + 2r^{L-1}u'_L(r) \\
+ \; & \frac{2mE}{\hbar^2}r^L u_L(r) - \frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}r^{L+2}u_L(r) - L(L+1)r^{L-2}u_L(r) = 0,
\end{aligned} \tag{49}$$

或是

$$\begin{aligned}
& r^L u''_L(r) + \left(2Lr^{L-1} - \frac{2m\omega_0}{\hbar}r^{L+1} + 2r^{L-1}\right)u'_L(r) \\
+ \; & \left(\frac{2mE}{\hbar^2}r^L - \frac{3m\omega_0}{\hbar}r^L - \frac{2Lm\omega_0}{\hbar}r^L\right)u_L(r) = 0.
\end{aligned} \tag{50}$$

两边同除于 r^L 后，我们有

$$u''_L(r) + \frac{2}{r}\left(L+1-\frac{m\omega_0}{\hbar}r^2\right)u'_L(r) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{3m\omega_0}{\hbar} - \frac{2Lm\omega_0}{\hbar}\right)u_L(r) = 0. \tag{51}$$

若令 $\xi=\frac{m\omega_0}{\hbar}r^2$，则我们有

$$u_L'(r)=\frac{du_L}{dr}=\frac{d\xi}{dr}\frac{du_L}{d\xi}=\frac{2m\omega_0}{\hbar}r\frac{du_L}{d\xi}, \tag{52}$$

及

$$\begin{aligned} u_L''(r) &= \frac{d}{dr}\left(\frac{du_L}{d\xi}\frac{d\xi}{dr}\right)=\frac{d}{dr}\left(\frac{2m\omega_0}{\hbar}r\frac{du_L}{d\xi}\right)=\frac{2m\omega_0}{\hbar}\frac{du_L}{d\xi}+\frac{2m\omega_0}{\hbar}r\frac{d}{dr}\frac{du_L}{d\xi} \\ &= \frac{2m\omega_0}{\hbar}\frac{du_L}{d\xi}+\left(\frac{2m\omega_0}{\hbar}\right)^2 r^2\frac{d^2u_L}{d\xi^2}=\frac{2m\omega_0}{\hbar}\frac{du_L}{d\xi}+\frac{4m\omega_0}{\hbar}\xi\frac{d^2u_L}{d\xi^2}. \end{aligned} \tag{53}$$

代入方程 (51) 后，我们有

$$\frac{2m\omega_0}{\hbar}\frac{du_L}{d\xi}+\frac{4m\omega_0}{\hbar}\xi\frac{d^2u_L}{d\xi^2}+\frac{4m\omega_0}{\hbar}\frac{du_L}{d\xi}(L+1-\xi)+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{3m\omega_0}{\hbar}-\frac{2Lm\omega_0}{\hbar}\right)u_L(\xi)=0. \tag{54}$$

两边同除 $\frac{4m\omega_0}{\hbar}$ 后，我们得到

$$\xi\frac{d^2u_L}{d\xi^2}+\left(L+\frac{3}{2}-\xi\right)\frac{du_L}{d\xi}-\frac{1}{2}\left(L+\frac{3}{2}-\frac{E}{\hbar\omega_0}\right)u_L(\xi)=0. \tag{55}$$

和标准的合流超几何方程

$$\xi\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2}+(\gamma-\xi)\frac{du(\xi)}{d\xi}-\alpha u(\xi)=0 \tag{56}$$

相比较，我们得到

$$\gamma=L+\frac{3}{2},\quad \alpha=\frac{1}{2}\left(L+\frac{3}{2}-\frac{E}{\hbar\omega_0}\right). \tag{57}$$

这一方程的解为合流超几何级数

$$F(\alpha,\,\gamma,\,\xi)=1+\frac{\alpha}{\gamma}\xi+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{\xi^2}{2!}+\cdots\cdots. \tag{58}$$

当

$$\xi=\frac{m\omega_0}{\hbar}r^2\to\infty \tag{59}$$

时，

$$F(\alpha,\,\gamma,\,\xi)\to e^{\xi}=\exp\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}r^2\right). \tag{60}$$

这样一来，当 $r \to \infty$ 时，我们有

$$\begin{aligned} R_L(r) &= r^L \exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar} r^2\right) u_L(r) \sim r^L \exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar} r^2\right) \exp\left(\frac{m\omega_0}{\hbar} r^2\right) \\ &= r^L \exp\left(\frac{m\omega_0}{2\hbar} r^2\right) \to \infty. \end{aligned} \tag{61}$$

这并不是我们所要找的解。为此，我们必须要求 $F(\alpha, \gamma, \xi)$ 在某一级截断，退化成一个多项式。即我们要求

$$\alpha + n_r = \frac{1}{2}\left(L + \frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega_0}\right) + n_r = 0 \tag{62}$$

对于某一个正整数 $n_r = 0,\, 1,\, 2 \cdots$ 成立。由此，我们解出来本征值

$$\left(L + 2n_r + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0 = E_{n_r, L}. \tag{63}$$

令 $L + 2n_r = N$ 。我们可以进一步将其写作

$$E_{n_r, L} = N\hbar\omega_0 + \frac{3}{2}\hbar\omega_0, \quad N = 0,\, 1,\, 2 \cdots\cdots. \tag{64}$$

显然， $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$ 是谐振子的零点能。而相应的本征函数为

$$R_{n_r, L}(r) \sim r^L \exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar} r^2\right) F\left(-n_r,\, L + \frac{3}{2},\, \frac{m\omega_0}{\hbar} r^2\right). \tag{65}$$

有关的细节可以见教科书 204 页的内容。

最后，我们看一下每条能级的简并度。按照定义， $N = 2n_r + L$ 。因此，当 N 为偶数时，我们有

$$\begin{aligned} f_N &= \sum_{L=0,\, 2, \cdots N} \sum_{m=-L}^{L} 1 = \sum_{L=0,\, 2, \cdots N} (2L+1) \\ &= 2 \sum_{L=0,\, 2, \cdots N} L + \sum_{L=0,\, 2, \cdots N} 1 \\ &= 2 \times 2 \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} k + \left(\frac{N}{2} + 1\right) = 4 \times \frac{\frac{N}{2}\left(\frac{N}{2} + 1\right)}{2} + \left(\frac{N}{2} + 1\right) \\ &= \frac{N(N+2)}{2} + \frac{N+2}{2} = \frac{1}{2}(N+1)(N+2). \end{aligned} \tag{66}$$

当 N 为奇数时，我们有

$$\begin{aligned}
f_N &= \sum_{L=1,\,3,\cdots N}(2L+1) = 2\sum_{L=1,3,\cdots N} L + \sum_{L=1,\,3,\cdots N} 1 \\
&= 2\sum_{L=1,\,3,\cdots N}(L-1) + 2\sum_{L=1,3,\cdots N} 1 + \sum_{L=1,3,\cdots N} 1 \\
&= 2\sum_{L=1,\,3,\cdots N}(L-1) + 3\sum_{L=1,3,\cdots N} 1 \\
&= 2\sum_{\widetilde{L}=0,\,2,\cdots N-1}\widetilde{L} + 3\,\frac{N+1}{2} \\
&= 2\times 2\,\frac{\frac{N-1}{2}\left(\frac{N-1}{2}+1\right)}{2} + \frac{3(N+1)}{2} = \frac{(N-1)(N-1+2)}{2} + 3\,\frac{N+1}{2} \\
&= \frac{(N-1)(N+1)}{2} + 3\,\frac{N+1}{2} = \frac{(N+1)(N+2)}{2}.
\end{aligned} \tag{67}$$

因此，对于这两种情况，我们都得到

$$f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2). \tag{68}$$

§5.4 氢原子

有关氢原子的本征值问题，我们已经在前面求解。氢原子的能级由下式给出

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a_B}\frac{1}{n^2}. \tag{69}$$

这里 $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ 称为玻尔半径。相应的波函数则可以写作

$$\begin{aligned}
&\Psi_{nLM}(r,\,\theta,\,\varphi) = R_{nL}(r)Y_{LM}(\theta,\varphi) \\
= &\frac{2}{a_B^{\frac{3}{2}}n^2(2L+1)!}\sqrt{\frac{(n+L)!}{(n-L-1)!}}e^{-\beta r}(2\beta r)^L F(-n+L+1,\,2L+2,\,2\beta r)Y_{LM}(\theta,\varphi)
\end{aligned} \tag{70}$$

这里

$$\beta = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E_n}. \tag{71}$$

例如，当 $n=2$ 时，我们有

$$\begin{aligned}
R_{20}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2}a_B^{\frac{3}{2}}}(1-\frac{r}{2a_B})e^{-\frac{r}{2a_B}} \\
R_{21}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}a_B^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_B}e^{-\frac{r}{2a_B}}.
\end{aligned} \tag{72}$$

对于一条给定能级 E_n ，按照定义 $n = n_r + L + 1$ ，我们有

$$L = n - n_r - 1. \tag{73}$$

因此，L 可以从 0 取值到 $n-1$ 。而对于一个给定的 L，函数 $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ 是 $2L+1$ 重简并的。因此， E_N 的简并度为

$$f_N = \sum_{L=0}^{N-1} (2L+1) = N^2. \tag{74}$$

当 $L \neq 0$ 时，因子 $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ 是非常各向异性的。其中一些几率分布如教科书 216 页上图 6.8 所示。

练习：习题集 5.1， 5.7， 5.21， 5.24 题。
阅读教科书 218 到 225 页上关于 Feynman-Hellman 定理的应用。