第6章　中心力场

Central Field

【内容提要】

1．中心力场中，势场 $V(\vec{r})=V(r)$，$\left[\vec{L},H\right]=0$，角动量 $\vec{L}$ 为守恒量。

2．中心力场中：

$$H=\frac{1}{2\mu}p_r^2+\frac{L^2}{2\mu r^2}+V(r)$$

$$p_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

$$\vec{p}^2=-\hbar^2\nabla^2=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{L^2}{r^2}$$

$$=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{L^2}{r^2}=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{L^2}{r^2}$$

3．薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{L^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\psi=E\psi$$

选$\left(H, L^2, L_z\right)$为体系的守恒量完全集，其共同的本征函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$l=0,1,2,\cdots,\quad m=l,l-1,\cdots,-l$$

4．无限深球方势阱 $V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ \infty, & r>a\end{cases}$

s 态（$l=0$）：$E=E_{n_r 0}=\dfrac{\pi^2\hbar^2(n_r+1)^2}{2\mu a^2}$，$n_r=0,1,2,\cdots$

$$R(r)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{(n_r+1)\pi r}{a}\cdot\dfrac{1}{r}, & 0\le r\le a\\ 0, & \text{其它}\end{cases}$$

$l \neq 0$的态：

$$E_{n_r l} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\chi_{n_r l}^2 , \quad n_r = 0 , 1 , 2 , \cdots$$

$$R_{n_r l}(r) = C_{n_r l} j_l(k_{n_r l} r) \propto j_l(k_{n_r l} r)$$

5. 氢原子

$$E = E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2} , \quad n = 1 , 2 , 3 , \cdots$$

$a = \hbar^2 / \mu e^2$（**Bohr** 半径）

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\xi/2} \xi^l F(-n+l+1 , 2l+2 , \xi) , \xi = \frac{2r}{na}$$

$$N_{nl} = \frac{2}{a^{3/2} n^2 (2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}$$

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

能级简并度 $f_n = n^2$ （未计及电子自旋）

轨道磁矩 $M_z = -\dfrac{e\hbar m}{2\mu c} = -\mu_B m, \quad \mu_B = \dfrac{e\hbar}{2\mu c}$ ——Bohr 磁子

旋磁比 $\dfrac{M_z}{L_z} = \dfrac{M_z}{m\hbar} = -\dfrac{e}{2\mu c}$

类氢离子 $E_n = -\dfrac{\mu e^4}{2\hbar^2}\dfrac{Z^2}{n^2}$

6. 三维各向同性谐振子

势能 $V(r) = \dfrac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$

在球坐标系中求解：

波函数 $R_{n_r l}(r) \sim r^l \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} F\left(-n_r, l+3/2, \alpha^2 r^2\right)$

能级 $E = E_N = (N + 3/2)\hbar\omega$, $N = 0, 1, 2, \cdots$

能级简并度 $f_N = \dfrac{1}{2}(N+1)(N+2)$

在直角坐标系中求解：

能级

$$E_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

【典型习题解答】

6.1 利用

$$\vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2} \tag{1}$$

$$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2 \tag{2}$$

证明下列关系式：

相对动量

$$\vec{p}=\mu\dot{\vec{r}}=\frac{1}{M}(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2) \tag{3}$$

总动量

$$\vec{P}=M\dot{\vec{R}}=\vec{p}_1+\vec{p}_2 \tag{4}$$

总轨道角动量

$$\vec{L}=\vec{L}_1+\vec{L}_2=\vec{r}_1\times\vec{p}_1+\vec{r}_2\times\vec{p}_2=\vec{R}\times\vec{P}+\vec{r}\times\vec{p} \tag{5}$$

总动能

$$T=\frac{\vec{p}_1{}^2}{2m_1}+\frac{\vec{p}_2{}^2}{2m_2}=\frac{\vec{P}^2}{2M}+\frac{\vec{p}^2}{2\mu} \tag{6}$$

反之，有

$$\vec{r}_1=\vec{R}+\frac{\mu}{m_1}\vec{r},\quad \vec{r}_2=\vec{R}-\frac{\mu}{m_2}\vec{r} \tag{7}$$

$$\vec{p}_1=\frac{\mu}{m_2}\vec{P}+\vec{p}，\quad \vec{p}_2=\frac{\mu}{m_1}\vec{P}-\vec{p} \tag{8}$$

以上各式中，$M=m_1+m_2$，$\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$。

证：相对动量

$$\vec{p} = \mu\dot{\vec{r}} = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\left(\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2\right) = \frac{1}{M}\left(m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2\right) \qquad (9)$$

式（3）得证。

总动量

$$\vec{P} = M\dot{\vec{R}} = (m_1+m_2)\frac{m_1\dot{\vec{r}}_1 + m_2\dot{\vec{r}}_2}{m_1+m_2} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \qquad (10)$$

式（4）得证。

由式（1）、式（2）可反解出

$$\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{\mu}{m_1}\vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{\mu}{m_2}\vec{r} \qquad (11)$$

由式（9）、式（10）可反解出

$$\bar{p}_1 = \frac{\mu}{m_2}\bar{P} + \bar{p}, \quad \bar{p}_2 = \frac{\mu}{m_1}\bar{P} - \bar{p} \tag{12}$$

式（7）、式（8）得证。

总轨道角动量

$$\begin{aligned}
\bar{L} &= \bar{L}_1 + \bar{L}_2 = \bar{r}_1 \times \bar{p}_1 + \bar{r}_2 \times \bar{p}_2 \\
&= \left(\bar{R} + \frac{\mu}{m_1}\bar{r}\right) \times \bar{p}_1 + \left(\bar{R} - \frac{\mu}{m_2}\bar{r}\right) \times \bar{p}_2 \\
&= \bar{R} \times (\bar{p}_1 + \bar{p}_2) + \bar{r} \times \frac{1}{M}(m_2\bar{p}_1 - m_1\bar{p}_2) \\
&= \bar{R} \times \bar{P} + \bar{r} \times \bar{p}
\end{aligned} \tag{13}$$

式（5）得证。

总动能

$$T=\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1}+\frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2}=\frac{1}{2m_1}\left(\frac{\mu}{m_2}\vec{P}+\vec{p}\right)^2+\frac{1}{2m_2}\left(\frac{\mu}{m_1}\vec{P}-\vec{p}\right)^2$$

$$=\frac{\mu^2}{2m_1m_2^2}\vec{P}^2+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_1}+\frac{\mu\vec{P}\cdot\vec{p}}{m_1m_2}+\frac{\mu^2}{2m_1^2m_2}\vec{P}^2+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_2}-\frac{\mu\vec{P}\cdot\vec{p}}{m_1m_2}$$

$$=\frac{m_1}{2(m_1+m_2)^2}\vec{P}^2+\frac{m_2}{2(m_1+m_2)^2}\vec{P}^2+\frac{1}{2}\vec{p}^{\,2}\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)$$

$$=\frac{\vec{P}^2}{2M}+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu} \tag{14}$$

式（6）得证。

6.2 同上题，求坐标表象中 $\bar{p}$ 、$\bar{P}$ 和 $\bar{L}$ 的算符表示式

$$\bar{p}=-i\hbar\nabla_r,\qquad \bar{P}=-i\hbar\nabla_R,\qquad \bar{L}=\bar{R}\times\bar{P}+\bar{r}\times\bar{p}$$

解：
$$\bar{p}=\frac{1}{M}\left(m_2\bar{p}_1-m_1\bar{p}_2\right)=\frac{-i\hbar}{M}\left(m_2\nabla_{r_1}-m_1\nabla_{r_2}\right) \tag{1}$$

其中
$$\nabla_{r_1}=\vec{i}\frac{\partial}{\partial x_1}+\vec{j}\frac{\partial}{\partial y_1}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z_1}$$

$$\nabla_{r_2}=\vec{i}\frac{\partial}{\partial x_2}+\vec{j}\frac{\partial}{\partial y_2}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z_2}$$

利用上题式（1）、式（2），有

$$\frac{\partial}{\partial x_1}=\frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial x}$$

同理，
$$\frac{\partial}{\partial y_1}=\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial y},\qquad \frac{\partial}{\partial z_1}=\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial Z}+\frac{\partial}{\partial z}$$

由此，
$$\nabla_{r_1}=\frac{m_1}{M}\nabla_R+\nabla_r \tag{2}$$

仿此可得
$$\nabla_{r_2}=\frac{m_2}{M}\nabla_R-\nabla_r \tag{3}$$

式（2）、式（3）代入式（1），得

$$\bar{p}=\frac{-i\hbar}{M}\left(\frac{m_1m_2}{M}\nabla_R+m_2\nabla_r-\frac{m_1m_2}{M}\nabla_R+m_1\nabla_r\right)=-i\hbar\nabla_r \tag{4}$$

$$\bar{P}=\bar{p}_1+\bar{p}_2=-i\hbar\left(\nabla_{r_1}+\nabla_{r_2}\right)=-i\hbar\nabla_R \tag{5}$$

将式（4）、式（5）中的 $\bar{p}$ 、 $\bar{P}$ 以相应的算符代入 $\bar{L}=\bar{R}\times\bar{P}+\bar{r}\times\bar{p}$ ，即可得

$$\bar{L}=-i\hbar\left(\bar{R}\times\nabla_R+\bar{r}\times\nabla_r\right) \tag{6}$$

6.3 利用氢原子能级公式，讨论下列体系的能谱：

① 电子偶素（**positronium**，指 $e^+ - e^-$ 束缚体系）

② μ 原子（**muonic atom**）

③ μ 子偶素（**muonium**，指 $\mu^+ - \mu^-$ 束缚体系）

解：由氢原子光谱理论，能级表达式为：

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

① 电子偶素能级

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{4\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad \left(\mu = \frac{m_e m_e}{m_e + m_e} = \frac{m_e}{2}\right)$$

② μ 原子能级

$$E_n = -\frac{\mu_\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad \left(\mu_\mu = \frac{m_\mu m_p}{m_\mu + m_p}\right)$$

③ μ 子偶素能级

$$E_n = -\frac{m_\mu e^4}{4\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \left(\mu = \frac{m_\mu m_\mu}{m_\mu + m_\mu} = \frac{m_\mu}{2}\right)$$

6.4 对于氢原子基态，求电子处于经典禁区的概率(已知氢原子能级 $E_n = -\dfrac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cdot\dfrac{1}{n^2} = -\dfrac{e^2}{2a}\cdot\dfrac{1}{n^2}$，基态波函数

$\psi_{100} = \left(\dfrac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a}$，$a = \hbar^2/\mu e^2$ 为 **Bohr** 半径，势能 $V = -\dfrac{e^2}{r}$)。

解：氢原子基态波函数为

$$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a},\quad a = \hbar^2/\mu e^2，为 \textbf{Bohr} 半径$$

相应的能量

$$E_1 = -\mu e^4/2\hbar^2 = -e^2/2a$$

动能

$$T(r)=E_1-V=-\frac{e^2}{2a}+\frac{e^2}{r}$$

$T=E-V<0$ 是经典禁区。由上式解出 $r>2a$ 。因此，电子处于经典禁区的概率为

$$P=\frac{1}{\pi a^3}\int_{2a}^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-2r/a} r^2\,\mathrm{d}r\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi \quad (\text{令}\ \xi=2r/a)$$

$$=\frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^3\int_4^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi}\xi^2\,\mathrm{d}\xi=13e^{-4}=0.2381$$

6.5 氢原子处于基态：$\psi(\vec{r})=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a}$，求：

① 势能 $-e^2/r$ 的平均值；

② 最可几半径。

解：①

$$\langle V\rangle=\left\langle -\frac{e^2}{r}\right\rangle=\int\psi^*\left(-\frac{e^2}{r}\right)\psi\,\mathrm{d}\tau=-\frac{e^2}{\pi a^3}\int \mathrm{e}^{-2r/a}\cdot\frac{1}{r}r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\Omega$$

$$=-\frac{4e^2}{a^3}\int_0^{\infty} r\,\mathrm{e}^{-2r/a}\,\mathrm{d}r=-\frac{e^2}{a}$$

② 氢原子基态径向波函数为

$$R_{10}(r)=\sqrt{\frac{4}{a^3}}\,\mathrm{e}^{-r/a}$$

径向概率密度

$$w(r)=R_{10}^2(r)r^2=\frac{4}{a^3}r^2\,\mathrm{e}^{-2r/a}$$

由 $\dfrac{\mathrm{d}\,w(r)}{\mathrm{d}\,r}=0$，得

$$\frac{4}{a^3}\left(2r-\frac{2}{a}r^2\right)\mathrm{e}^{-2r/a}=0$$

解得

$$r=0\,,a\,,\infty$$

$r=0$，∞ 是端点。由

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2\,w(r)}{\mathrm{d}\,r^2}\right|_{r=a}<0$$

知最可几半径为

$$r=a$$

6.6 对于氢原子基态，计算 $\Delta x \cdot \Delta p_x$。

解：在球坐标系中，空间反演：

$$\vec{r} \to -\vec{r}(r \to r, \theta \to \pi - \theta, \varphi \to \varphi + \pi)$$

氢原子基态波函数为

$$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-r/a_0} \qquad (1)$$

宇称为偶。由于 x、p_x 均为奇宇称算符，所以

$$\bar{x} = 0, \qquad \bar{p}_x = 0 \qquad (2)$$

由于 ψ_{100} 各向同性，呈球对称分布，显然有

$$\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2} = \frac{1}{3}\overline{r^2}$$
$$\overline{p_x^2} = \overline{p_y^2} = \overline{p_z^2} = \frac{1}{3}\overline{\bar{p}^2} \qquad (3)$$

容易算出

$$\overline{r^2} = \int r^2 (\psi_{100})^2 \,\mathrm{d}\tau = \int r^2 \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) \mathrm{e}^{-2r/a_0} r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = 3a_0^2 \qquad (4)$$

$$\overline{\bar{p}^2} = -\hbar^2 \int \psi_{100} \nabla^2 \psi_{100} \,\mathrm{d}\tau = -\hbar^2 \int \left[\nabla\cdot(\psi_{100}\nabla\psi_{100}) - \nabla\psi_{100}\cdot\nabla\psi_{100}\right] \mathrm{d}\tau$$

$$= \hbar^2 \int |\nabla\psi_{100}|^2 \,\mathrm{d}\tau = \hbar^2 \int \left(\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right)^2 r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \hbar^2 / a_0^2 \qquad (5)$$

因此
$$\overline{x^2} = a_0^2, \qquad \Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} = a_0 \tag{6}$$

$$\overline{p_x^2} = \frac{\hbar^2}{3a_0^2}, \qquad \Delta p_x = \sqrt{\overline{p_x^2} - \bar{p}_x^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}a_0} \tag{7}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar/\sqrt{3} \tag{8}$$

不确定关系的普遍结论是

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2 \tag{9}$$

显然式（8）和式（9）是不矛盾的，而且$\hbar/\sqrt{3}$很接近式（9）规定的下限$\hbar/2$。

6.7 对于类氢原子（核电荷 Ze）的"圆轨道"（指 $n_r=0, l=n-1$ 的轨道），计算

① 最概然半径 $r_{概}$；

② 平均半径 $\langle r\rangle$；

③ 涨落 $\Delta r=\left[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{1/2}$。

解：类氢原子中电子波函数 ψ_{nlm} 可以表示为

$$\psi_{nlm}=R_{n_r l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u_{n_r l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (1)$$

① 最概然半径由径向几率分布的极值条件

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left|u_{n_r l}(r)\right|^2=0 \qquad (2)$$

决定。$l=n-1$ 时，$n_r=0$。

$$u_{0,n-1}(r)=Cr^{n}\,\mathrm{e}^{-Zr/na_0} \tag{3}$$

代入式（2），容易求得最概然半径

$$r_{概}=n^2a_0/Z \tag{4}$$

这结果和玻尔量子论中圆轨道的半径公式一致。

② 在ψ_{nlm}态下，各$\langle r^{\lambda}\rangle$之间有递推关系（**Kramers** 公式）

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^{\lambda}\rangle-(2\lambda+1)\frac{a_0}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\frac{a_0^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{5}$$

（参钱伯初、曾谨言：《量子力学习题精选与剖析》，第二版，上册 **P128**）

在式（5）中令$\lambda=0$，注意到$\langle r^{0}\rangle=1$，可得

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z}{n^2a_0} \tag{6}$$

依次再取 $\lambda=1,2$，得到

$$\langle r\rangle_{nlm}=\frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]\frac{a_0}{Z}=\left(n^2+\frac{n}{2}\right)\frac{a_0}{Z},\quad (l=n-1) \tag{7}$$

③ $$\langle r^2\rangle_{nlm}=\frac{n^2}{2}\left[1+5n^2-3l(l+1)\right]\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2=n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \tag{8}$$

因此，r 的涨落

$$\Delta r=\left[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{1/2}=\left(\frac{n^3}{2}+\frac{n^2}{4}\right)^{1/2}\frac{a_0}{Z} \tag{9}$$

$$\frac{\Delta r}{\langle r\rangle}=\sqrt{\frac{n}{2}}\Big/\sqrt{n^2+\frac{n}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2n+1}} \tag{10}$$

可见，n 越大，$\Delta r/\langle r\rangle$ 越小，量子力学的结果和玻尔量子化轨道的图像越加接近。

6.8 设电荷为 Ze 的原子核突然发生 β^- 衰变，核电荷变成 $(Z+1)e$，求衰变前原子 Z 中一个 K 电子（1s 轨迹上的电子）在衰变后仍然保持在新的原子 $(Z+1)$ 的 K 轨道的几率。

解：由于原子核的 β^- 衰变是突然发生的，可以认为核外的电子状态还来不及变化。对于原来的 K 电子，其波函数仍为

$$\psi_{100}(Z,r)=\left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-Zr/a} \qquad (1)$$

而新原子中 K 电子的波函数应为

$$\psi_{100}(Z+1,r)=\left[\frac{(Z+1)^3}{\pi a^3}\right]^{1/2}\mathrm{e}^{-(Z+1)r/a} \qquad (2)$$

将 $\psi_{100}(Z,r)$ 按新原子的能量本征态作线性展开：

$$\psi_{100}(Z,r)=\sum_{nlm}C_{nlm}\psi_{nlm}(Z+1,r) \tag{3}$$

则衰变前的1s电子在衰变后处于新原子的$\psi_{nlm}(Z+1,r)$态的几率为

$$P_{nlm}=\left|C_{nlm}\right|^2=\left|\left\langle\psi_{nlm}(Z+1)\middle|\psi_{100}(Z)\right\rangle\right|^2 \tag{4}$$

因此，本题所求的几率为

$$P_{100}=\left|\left\langle\psi_{100}(Z+1)\middle|\psi_{100}(Z)\right\rangle\right|^2=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\pi^2a^6}(4\pi)^2\left|\int e^{-(2Z+1)r/a}r^2\,dr\right|^2$$

$$=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\left(Z+\frac{1}{2}\right)^6}=\left(1+\frac{1}{Z}\right)^3\left(1+\frac{1}{2Z}\right)^{-6} \tag{5}$$

当$Z>>1$，上式可近似取成 $$P_{100}\approx1-\frac{3}{4Z^2} \tag{6}$$

例如， $Z=10$， $P_{100}\approx0.9932$； $Z=30$， $P_{100}\approx0.9992$

6.9 氢原子处于状态

$$\psi(\vec{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} R_{21} Y_{11} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} R_{21} Y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

① 求轨道角动量的 z 分量 L_z 的平均值；

② 求自旋角动量的 z 分量 s_z 的平均值；

③ 求总磁矩 $\vec{M} = -\frac{e}{2\mu}\vec{L} - \frac{e}{\mu}\vec{s}$ 的 z 分量 M_z 的平均值。

解：①

$$\bar{L}_z = \left(\frac{1}{2}\right)^2 \hbar + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 \times 0 = \frac{1}{4}\hbar$$

② $$\bar{s}_z = \left(\frac{1}{2}\right)^2 \times \frac{\hbar}{2} + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 \times \left(-\frac{\hbar}{2}\right) = -\frac{\hbar}{4}$$

③ $$\bar{M}_z = -\frac{e}{2\mu}\bar{L}_z - \frac{e}{\mu}\bar{s}_z = \left(-\frac{e}{2\mu}\right) \times \left(\frac{\hbar}{4}\right) + \left(-\frac{e}{\mu}\right) \times \left(-\frac{\hbar}{4}\right) = \frac{e\hbar}{8\mu} = \frac{1}{4}M_B$$

$M_B = e\hbar/2\mu$ — **Bohr磁子**

6.10 氢原子处于状态

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)+\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{1-1}(\theta,\varphi)$$ 。试求：

① 能量算符 H 、角动量平方算符 L^2 和角动量 z 分量 L_z 的可能取值；

② 上述三个量取各可能值的概率；

③ 上述三个量的平均值。

解：氢原子波函数为 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$，能量 $E_n=-\dfrac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$， L^2 的本征值为 $l(l+1)\hbar^2$ ，L_z 的本征值为 $m\hbar$ 。本题中，氢原子所处的状态为 ψ_{210} 和 ψ_{21-1} 二本征态的叠加。在这二本征态中， $n=2,l=1,m=0$ 或 -1 。

所以 H 只可能取值 $E_2=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2\cdot 2^2}=-\frac{\mu e^4}{8\hbar^2}$，出现的概率为 1（因二本征态对应的能量同为 E_2），平均值 $\overline{H}=E_2=-\frac{\mu e^4}{8\hbar^2}$；

L^2 只可能取值 $1(1+1)\hbar^2=2\hbar^2$，出现的概率为 1，平均值 $\overline{L^2}=2\hbar^2$；

L_z 的可能取值有两个：0、$-\hbar$，出现 0 的概率为 $\left(\frac{1}{2}\right)^2=\frac{1}{4}$，出现 $-\hbar$ 的概率为 $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2=\frac{3}{4}$，平均值 $\overline{L_z}=0\times\frac{1}{4}+(-\hbar)\times\frac{3}{4}=-\frac{3}{4}\hbar$。

6.11 对于中心力场$V(r)$的任何一个束缚态，证明

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\vec{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(0)|^2 \qquad (1)$$

证：中心力场中，

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \qquad (2)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}, H\right] = \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\mu r^3} + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \qquad (3)$$

在任何一个束缚态下计算上式的平均值，左端贡献为 0，所以

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{L^2}{\mu r^3} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \psi^* \frac{1}{r^2}\frac{\partial \psi}{\partial r} r^2 \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\Omega$$

$$= -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \mathrm{d}\Omega \int_0^\infty \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r}\mathrm{d}r \qquad (4)$$

上式左端的平均值为实数，则右端亦为实数，因此

$$\int_0^\infty \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} \mathrm{d}r = \int_0^\infty \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \mathrm{d}r = \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r}(\psi^* \psi)\mathrm{d}r$$

$$= \frac{1}{2}\psi^* \psi \Big|_{r=0}^{r\to\infty} = -\frac{1}{2}|\psi(0)|^2 \qquad (5)$$

代入式（4），并计及$\int \mathrm{d}\Omega = 4\pi$，即得式（1）。

*中心力场，多数取(H, L^2, L_z)表象，波函数

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad (6)$$

这时，式（1）中L^2用$l(l+1)\hbar^2$代替，由于只有s态$(l=0)$ $\psi(0)$才不等于零，因此式（1）等价于

$$\left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(0)|^2, \quad l=0 \qquad (7a)$$

$$\left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle = \left\langle \frac{L^2}{\mu r^3} \right\rangle = l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad l \neq 0 \qquad (7b)$$

讨论：

① $l=0$, $|\psi(0)|^2 = \dfrac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left\langle \dfrac{dV}{dr} \right\rangle$, $\left\langle \dfrac{dV}{dr} \right\rangle$是向心力，此力越大，粒子运动越靠近中心，在中心处找到粒子的几率 $|\psi(0)|^2$ 越大。

② 若粒子处在线性势$V=kr$下的s态，粒子在原点出现的概率可求得如下：

对s态， $\left\langle \dfrac{L^2}{\mu r^3} \right\rangle = 0$, $\left\langle \dfrac{dV}{dr} \right\rangle = k$, $|\psi(0)|^2 = \dfrac{k\mu}{2\pi\hbar^2}$

6.12 类氢离子（核电荷 Ze）中电子处于束缚态 ψ_{nlm}，计算 $\langle r^{\lambda} \rangle, \lambda = -1, -2, -3$。

解：类氢离子能级

$$E_{nlm} = E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 e^2}{2an^2}$$

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \qquad n = n_r + l + 1 \tag{1}$$

据 **Virial** 定理，

$$\left\langle \frac{\bar{p}^2}{2\mu} \right\rangle_{nlm} = \left\langle \frac{r}{2} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle_{nlm} = \frac{Ze^2}{2} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{nlm} \tag{2}$$

所以

$$E_n = \frac{1}{2}\langle V\rangle_{nlm} = -\frac{Ze^2}{2}\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm} = -\frac{2E_n}{Ze^2} = \frac{Z}{n^2 a}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3}$$

其次，

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{4}$$

满足本征方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\psi_{nlm} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} \tag{5}$$

总能量算符等价于

$$H \to -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{6}$$

视l为参变量，式（6）对l求导，利用 **F-H** 定理，得

$$\frac{\partial E_n}{\partial l}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial l}\right\rangle_{nlm}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm} \tag{7}$$

由于$n=n_r+l+1$ ，所以

$$\frac{\partial E_n}{\partial l}=\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{Z^2e^2}{n^3a} \tag{8}$$

代入式（7），并利用$a=\hbar^2/\mu e^2$，得

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3}\cdot\frac{Z^2}{a^2} \tag{9}$$

*最后，计算$\langle r^{-3}\rangle$。

对于s态（$l=0$），$r\to 0$处$\psi\to C$(常数)，所以

$$\langle r^{-3}\rangle_{n00}\to\infty \tag{10}$$

当$l\neq 0$时，利用前题（7b）式，即得

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z}{l(l+1)a}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm} \tag{11}$$

将式（9）代入，得

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 \tag{12}$$

当$l\to 0$，上式右端$\to\infty$，所以上式实际上实用于一切l值。

6.13 在半径为 a 的硬钢球内，有一质量为 m 的粒子处于基态。现突然将这硬钢球扩展到原来半径的两倍，求扩展后系统中粒子处在基态的概率是多少？

（公式 $\sin\alpha\sin\beta = \frac{1}{2}[\cos(\alpha-\beta)-\cos(\alpha+\beta)]$）

解： 粒子束缚在半径为 a 的硬钢球内，容易解出基态波函数

$$\psi_{100} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\,\frac{\sin\frac{\pi r}{a}}{r}Y_{00}, & r < a \\ 0, & r \ge a \end{cases}$$

当钢球半径突然扩展到原来的 2 倍，粒子所处势场突然改变为

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < 2a \\ \infty, & r \ge 2a \end{cases}$$

在此新势场中的基态波函数为

$$\varphi_{100}=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{a}}\ \dfrac{\sin\dfrac{\pi r}{2a}}{r}Y_{00}\ , & r<2a\\ 0\ , & r\geq 2a\end{cases}$$

由于势场改变极其迅速，粒子原来所处状态还来不及发生变化，因此这时粒子处于基态 φ_{100} 的概率为

$$P=\left|\left\langle\varphi_{100}\middle|\psi_{100}\right\rangle\right|^2=\left|\int_0^a r^2\,\mathrm{d}r\iint\mathrm{d}\Omega\cdot\varphi_{100}^*\psi_{100}\right|^2$$

$$=\left|\int_0^a\frac{\sqrt{2}}{a}\cdot\frac{1}{r^2}\sin\frac{\pi r}{a}\sin\frac{\pi r}{2a}\cdot r^2\,\mathrm{d}r\right|^2=\frac{32}{9\pi^2}$$

6.14 在 $t=0$ 时刻，氢原子处于状态

$$\Psi(\vec{r},0)=C\left[\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1(\vec{r})+\sqrt{\frac{1}{3}}\psi_2(\vec{r})+\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_3(\vec{r})\right]$$

式中，$\psi_n(\vec{r})$ 为氢原子的第 n 个能量本征态。计算 $t=0$ 时能量取各值的概率与平均值，写出 $t>0$ 时的波函数。

解：氢原子的本征解为 $E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$

$$\psi_{nlm}(\vec{r})=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中，量子数的取值范围是

$$n=1,2,3,\cdots;\quad l=0,1,2,\cdots,n-1;\quad m=-l,-l+1,\cdots,0,\cdots,l-1,l$$

由波函数归一化条件可知归一化常数为

$$C=\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+\frac{1}{2}\right)^{-1/2}=\frac{\sqrt{3}}{2}$$

能量取各值的概率为 $W(E_1)=W(E_3)=\dfrac{3}{8}$；　$W(E_2)=\dfrac{1}{4}$

能量平均值为

$$\overline{E}=\frac{3}{8}(E_1+E_3)+\frac{1}{4}E_2=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\left[\frac{3}{8}\left(1+\frac{1}{9}\right)+\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{4}\right]$$

$$=\frac{23}{48}\left(-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\right)=\frac{23}{48}E_1=\frac{23}{48}(-13.6\,\mathrm{eV})=-6.52\,\mathrm{eV}$$

当 $t>0$ 时，波函数为

$$\Psi(\vec{r},t)=\sqrt{\frac{3}{8}}\psi_1(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1t\right)+\frac{1}{2}\psi_2(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2t\right)$$

$$+\sqrt{\frac{3}{8}}\psi_3(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_3t\right)$$

6.15 有一种关于基本粒子的非常简单的“袋”模型，将介子描述成限制在弹性口袋中的夸克（**quark**）——反夸克模型。袋为球形，半径 R（可变），表面张力系数 $\sigma = 50\,\mathrm{MeV}/(\mathrm{fm})^2$。夸克和反夸克均作非相对论粒子处理，静质量取为 $200\,\mathrm{MeV}/c^2$。不考虑相互作用。

① 当 R 固定，估算夸克——反夸克体系基态能量（不包括静止质量）；

② 允许 R 变化，计算基态的“袋”半径，并和公认的 π 介子大小作比较。

解：① 当 R 固定时，夸克和反夸克（质量均为 m）可以认为是在无限深球形势阱中运动，基态（$l=0$）能级为

$$E_1 = \pi^2\hbar^2/2mR^2 \tag{1}$$

因此体系的基态能量为

$$E_0 = 2E_1 = \pi^2\hbar^2 / mR^2 \qquad (2)$$

② 当 R 可变，还应该考虑弹性袋的表面能

$$E_\sigma(R) = \sigma \cdot 4\pi R^2 \qquad (3)$$

R 的取值应使 $E_0(R) + E_\sigma(R)$ 为极小。由极值条件

$$\frac{\partial}{\partial R}(E_0 + E_\sigma) = 0 \qquad (4)$$

求得

$$R = \left(\frac{\pi\hbar^2}{4m\sigma}\right)^{1/4} = \left(\frac{\pi\hbar^2 c^2}{4mc^2\sigma}\right)^{1/4}$$

$$= \left[\frac{\pi}{4} \times \frac{(197\,\mathrm{MeV \cdot fm})^2}{200\,\mathrm{MeV} \times 50\,\mathrm{MeV}/(\mathrm{fm})^2}\right]^{1/4} \approx 1.3(\mathrm{fm})$$

公认的基本粒子的线度正是这个数量级。

***6.16** 质量为 μ 的粒子在球壳 δ 势阱

$$V(r) = -V_0\delta(r-a), \qquad V_0, \ a > 0 \tag{1}$$

中运动，求存在束缚态所需的最小 V_0 值。

解：基态为 s 态（$l=0$），波函数可以写成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{2}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u'' + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{3a}$$

由于 $r\to\infty$ 处 $V(r)\to 0$，所以束缚态 $E<0$。令

$$\beta = \sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{4}$$

式（3）可以改写成

$$u'' - \beta^2 u + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{3b}$$

边界条件为　　$r \to 0$、∞ 处 $u \to 0$。

在 $r \sim a$ 附近对式（3b）积分，可得 u' 的跃变条件

$$u'(a+0) - u'(a-0) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}u(a) \tag{5a}$$

即

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{r=a-0}^{r=a+0} = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{5b}$$

在 $r \neq a$ 处，式（3b）即

$$u'' - \beta^2 u = 0 \tag{3c}$$

在 $r > a$ 区域，满足无限远处边界条件的解为

$$u = c\,\mathrm{e}^{-\beta r}, \qquad r > a \tag{6}$$

因此

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a+0} = -\beta \tag{7a}$$

如 V_0 之值刚够形成第一个束缚态，能级必为 $E = 0^-$，这时 $\beta = 0$，式（3c）成为

$$u'' = 0 \qquad (E \to 0^-) \tag{8}$$

式（7a）成为

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a+0}=0 \qquad (E\to 0^-) \tag{7b}$$

$E\to 0^-$时，式（8）[满足边界条件$u(0)=0$的]在$r<a$区域的解为

$$u=Ar,\quad r<a,\quad (E\to 0^-) \tag{9}$$

因此

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a-0}=\frac{1}{a},\quad (E\to 0^-) \tag{10}$$

将式（7b）、式（10）代入式（5b），得

$$V_0=\frac{\hbar^2}{2\mu a} \tag{11}$$

此即存在束缚态所需最小V_0值，相应能级$E=0^-$ 。

*6.17　三维各向同性谐振子，各$\langle r^{\lambda}\rangle$之间有递推关

$$(\lambda+2)\alpha^4\langle r^{\lambda+2}\rangle-(\lambda+1)(2N+3)\alpha^2\langle r^{\lambda}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \quad (1)$$

其中$\alpha^2=\mu\omega/\hbar$　。上式适用条件为

$$\lambda>-(2l+1) \quad (2)$$

试计算$\langle r^2\rangle$，$\langle r^4\rangle$。

解：取$\lambda=0$，得（注意　$\langle r^0\rangle=1$）

$$\langle r^2\rangle_{n_r lm}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\alpha^{-2}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega} \quad (3)$$

此结果易由维里定理得出：$\langle T\rangle=\langle V\rangle=\frac{1}{2}E$

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2\langle r^2\rangle=\frac{1}{2}\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

所以

$$\langle r^2\rangle=\left(N+\frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

取 $\lambda=2$，利用式（3），得

$$\langle r^4\rangle_{n_r l m}=\frac{1}{8}\left[3(2N+3)^2-(2l-1)(2l+3)\right]\alpha^{-4} \quad (4)$$

例如 $N=0$（基态，$l=n_r=0$）

$$\langle r^2\rangle=\frac{3}{2}\alpha^{-2},\qquad \langle r^4\rangle=\frac{15}{4}\alpha^{-4} \quad (5)$$

$N=1$（第一激发能级，$l=1$，$n_r=0$）

$$\langle r^2\rangle=\frac{5}{2}\alpha^{-2},\qquad \langle r^4\rangle=\frac{35}{4}\alpha^{-4} \quad (6)$$

对于给定的能级E_N，l 可取 $N,N-2,\cdots,1$（或 0）。式（3）表明，$\langle r^2\rangle$只与N直接有关，与 l 无关。式（4）则表明 $\langle r^4\rangle$与 N、l 都有关，N给定后，l 越大，$\langle r^4\rangle$ 越小。

***6.18** 一个电子被约束在半径为 a 的球内，作用在球面上的压强是多少？

① 若电子处于最低的 s 态；

② 若电子处在最低的 p 态。

分析：通过求解定态 **S.eq**（无限深球方势阱），求出 E，假设球体均匀膨胀一小量，所做的功是

$$\mathrm{d}W = p\,\mathrm{d}V = 4\pi a^2 p\,\mathrm{d}a = -\mathrm{d}E(a)$$

$$p = -\frac{1}{4\pi a^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}a} \tag{1}$$

$$E = E_{n_r l} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\chi_{n_r l}^2 \tag{2}$$

解：① 由最低 s 态能量 $E_s = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，代入上式，求得

$$p = \frac{\pi^2\hbar^2}{4ma^5} \tag{3}$$

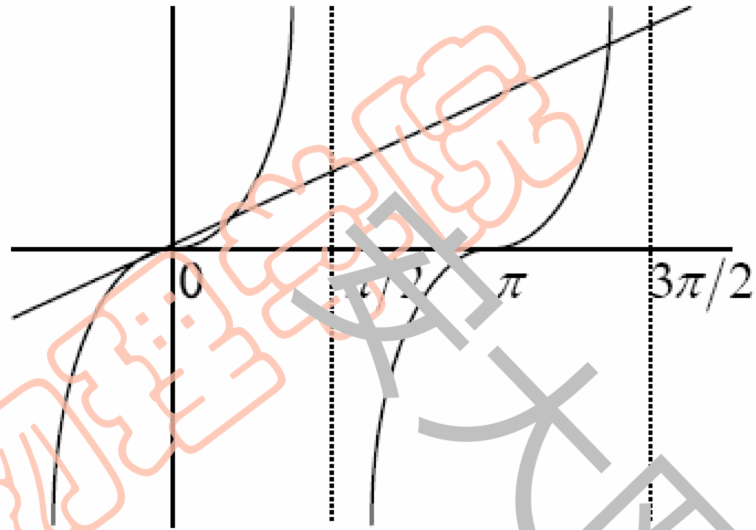
② 最低的 p 态径向波函数为

$$R(r) = A\cdot\left[\frac{\cos kr}{kr} - \frac{\sin kr}{(kr)^2}\right], \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \tag{4}$$

由边界条件 $R(a)=0$，可得确定最低 p 态能量 E_p 的超越方程：

$$\tan ka = ka \tag{5}$$

令 $y=ka$，有 $y=\tan y$，参考右图，设 $y_0=3\pi/2$，代入式（5）求出 y_1，反复迭代逐步逼近精确值，求得最小非零正值 $ka\approx 4.5$，所以最低 p 态电子对球面的压强



$$p=\frac{(4.5)^2\hbar^2}{4\pi m a^5} \tag{6}$$

若可查表，则 $\chi_{n_r l}$：$\chi_{00}=\pi$，$\chi_{01}=4.5$，直接代入式（2）、式（1），即可求得式（3）、式（6）。

***6.19**　设碱金属原子中的价电子所受原子实（原子核+满壳电子）的作用近似表为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a}{r^2} \quad (0 < \lambda \ll 1) \qquad (1)$$

a 为 **Bohr** 半径，求价电子的能级。

提示：令 $l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1)$，解出

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2}$$

解：取守恒量完全集为 (H, L^2, L_z)，其共同本征函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (2)$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a}{r^2}\right]u = Eu \qquad (3a)$$

令
$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) \qquad (4)$$

注意到 $a = \hbar^2/\mu e^2$，式（3a）可化为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]u = Eu \qquad (3b)$$

相当于氢原子径向方程中 l 换成 l'，由此可得与（3a）对应的能级

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2an'^2}, \qquad n' = n_r + l' + 1 \qquad (5)$$

通常令
$$l' = l + \Delta l \qquad (6)$$

$$n' = n_r + l + \Delta l + 1 = n + \Delta l \qquad (7)$$

Δl 称为量子数 l 和 n 的“修正数”。由于 $\lambda << 1$，可对式（4）作如下近似处理：

$$l(l+1)-2\lambda = l'(l'+1) = (l+\Delta l)(l+\Delta l+1)$$

$$= l(l+1)+(2l+1)\Delta l+(\Delta l)$$

略去 $(\Delta l)^2$，即得

$$\Delta l \approx -\frac{\lambda}{l+\frac{1}{2}} \tag{8}$$

$\lambda << 1$，所以 $|\Delta l| << 1$。因此，本题所得能级 E_{nl} 和氢原子能级仅有较小的差别，但能级的“l 简并”已经消除。

式（5）和碱金属光谱的实际资料大体一致，尤其是，修正数$|\Delta l|$随l之升高而减小，这一点和实际符合得极好。

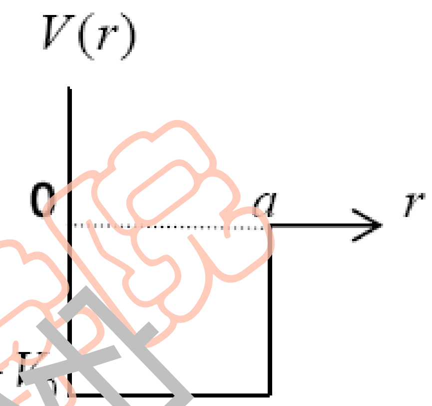
式（4）的精确解为

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2} \qquad (9)$$

如对上式作二项式展开，保留λ项，略去λ^2以上各项，即可得式（8）。

***6.20** 设有一中心位势

$$V(r)=\begin{cases}V_0, & r<a\\ 0, & r\ge a\end{cases} \qquad (1)$$



求粒子在该位势中的最低能态的本征能量。

解：最低能态，$l=0$。考虑 $-V_0<E<0$（束缚态）情况，令

$$k=\sqrt{2\mu(E+V_0)}/\hbar, \qquad k'=\sqrt{-2\mu E}/\hbar \qquad (2)$$

则径向方程为

$$\begin{cases}R''+\dfrac{2}{r}R'+\left[k^2-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 & (r<a)\\[2ex] R''+\dfrac{2}{r}R'+\left[(ik')^2-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 & (r>a)\end{cases} \qquad (3)$$

即球 Bessel 方程。

在 $r<a$ 区域中，物理上允许的解只能取

$$R(r)=A_{kl}\,j_l(kr) \tag{4}$$

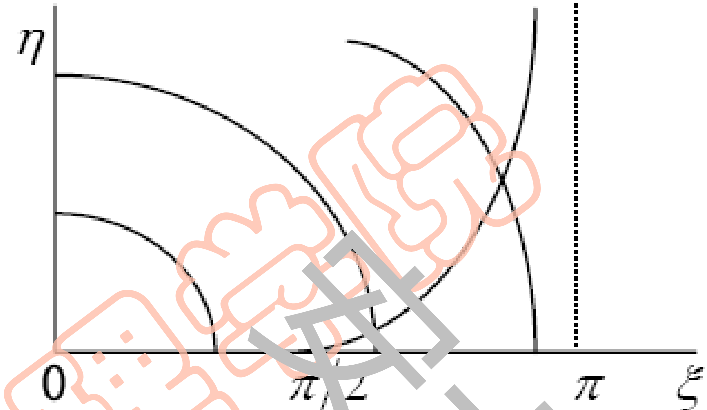
在 $r>a$ 区域，满足束缚态边条件的解只能取虚宗量 Hankel 函数：

$$R(r)=B_{k'l}\,h_l(ik'r) \tag{5}$$

根据在 $r=a$ 处 R 及 R' 连续条件以及归一化条件，可求出 E（即 k 与 k'，见式（2））及 A_{kl}、$B_{k'l}$ 。如只对能谱感兴趣，则可用 $(\ln R)'$ 在 $r=a$ 点连续的条件来确定 E。

$l=0$，利用 $j_0(\rho)=\frac{1}{\rho}\sin\rho$ ， $h_0(\rho)=-\frac{i}{\rho}e^{i\rho}$，按照 $(\ln(rR))'$ 在 $r=a$ 点连续的条件可求出

$$k\cot ka = -k'$$



令 $\xi = ka$， $\eta = k'a$，有

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \dfrac{2\mu}{\hbar^2} V_0 a^2 \\ \xi \cot \xi = -\eta \end{cases}$$

束缚态个数 n 由下式决定：

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu} < V_0 a^2 < \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}$$

求氘核阱深：当 $n = 1$，即一个束缚态，

$$V_0 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2} = \frac{10\times 10^{-54}}{8\times 4\times 10^{-50}} = 3.2\times 10^{-5} \text{ 尔格} \approx 20\,\text{MeV}$$

***6.21** 对类氢离子（核电荷 Ze）的$\left(H,\vec{L}^2,L_z\right)$的共同本征态$\psi_{nlm}$，按递推关系

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\left\langle r^{\lambda}\right\rangle-(2\lambda+1)\frac{a}{Z}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\frac{a^2}{Z^2}\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle=0 \qquad (1)$$

计算各$\left\langle r^{\lambda}\right\rangle$。

解：在式（1）中，如取$\lambda=0$并注意到$\left\langle r^{0}\right\rangle=1$，立即得到

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z}{n^2a} \qquad (2)$$

依次取$\lambda=1,2$，可得

$$\left\langle r\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]\frac{a}{Z} \qquad (3)$$

$$\left\langle r^2\right\rangle_{nlm}=\frac{n^2}{2}\left[5n^2+3l(L+1)+1\right]\left(\frac{a}{Z}\right)^2 \qquad (4)$$

例如　1s态（基态），　$\langle r \rangle_{100} = \frac{3}{2}$，　$\langle r^2 \rangle_{100} = 3$

$$\begin{aligned} &2s\text{态}, && \langle r \rangle_{200} = 6, && \langle r^2 \rangle_{200} = 42 \\ &2p\text{态}, && \langle r \rangle_{21m} = 5, && \langle r^2 \rangle_{21m} = 30 \end{aligned} \tag{5}$$

式（5）中，$\langle r \rangle$以(a/Z)为单位，$\langle r^2 \rangle$以(a^2/Z^2)为单位。

注意，利用式（1）不能计算$\langle r^{-2} \rangle$，但如利用6.12题关于$\langle r^{-2} \rangle$的计算结果，则只要在式（1）中取$\lambda=-1$，即可算出$\langle r^{-3} \rangle$，结果和6.12题相同。如再取$\lambda=-2(l\geq 1)$，就可算出

$$\langle r^{-4} \rangle = \left(\frac{Z}{a}\right)^4 \cdot \frac{3n^2 - l(l+1)}{2n^5\left(l-\frac{1}{2}\right)l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\left(l+\frac{3}{2}\right)} \tag{6}$$

计算其他$\langle r^{\lambda} \rangle$可依此类推。

END