一维氢原子的束缚态

兰州大学　钱伯初

摘要：一维氢原子虽是一种理想情况，但量子力学中经常讨论到．本文对于 Loudon 给出的解法加以改进，化为一个数学上较容易的问题，且突出了问题的物理内容．

一维氢原子问题是指粒子在一维库仑势场

$$V(x) = -\frac{\lambda}{|x|}, \quad \lambda > 0 \tag{1}$$

作用下的定态问题．能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi'' - \frac{\lambda}{|x|}\psi = E\psi \tag{2}$$

对于束缚态，$E<0$．R．Loudon 曾有专文[1]讨论过这个问题，惜乎该文数学处理较复杂（用到了 Whittaker 函数），掩盖了某些物理内容．本文将以国内读者较易接受的形式重新论证，所得结论则与 Loudon 一文相同．

由于 $V(x) = V(-x)$，所以能量本征函数总可以表示成具有明确宇称性的函数，即偶函数或奇函数．这样，由 $x>0$ 区域的解即可确定能量本征值．

$V(x)$ 是 x 的 (-1) 次函数，根据位力定理，能量本征值和势能平均值之间有下列关系

$$E = \frac{1}{2}\langle V\rangle = -\frac{\lambda}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\frac{\mathrm{d}x}{|x|}$$

$$= -\lambda\int_0^{\infty}\psi^2\frac{\mathrm{d}x}{x} \tag{3}$$

容易看出，如 $x\to 0$ 处 $\psi(0)\neq 0$，则上式中积分在 $x\sim 0$ 处发散，因此 $E=-\infty$．反之，如 E 取有限值，则 ψ 必须满足边界条件

$$x\to 0, \quad \psi\to 0 \tag{4}$$

方程(2)及边界条件(4)完全类似于三维氢原子 $[V(r) = -\frac{\lambda}{r}]$ 的 s 态 $(l=0)$ 径向方程及边界条件，后者为[2]

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u(r)}{r} \tag{5}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}u - \frac{\lambda}{r}u = Eu \tag{6}$$

$$r\to 0, \ u\to 0. \tag{7}$$

众所周知，三维氢原子的 s 态能级［即由式(6)、(7)决定的能量本征值］已经包含了全部束缚态能级，它们是

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{\mu\lambda^2}{\hbar^2} \qquad n=1,2,3\cdots \tag{8}$$

能量本征函数（略去归一化常数）是

$$u_n(r) = rF\left(1-n, 2, \frac{2r}{na}\right)e^{-r/na} \tag{9}$$

其中

$$a = \hbar^2/\mu\lambda \tag{10}$$

是特征长度（如 $\lambda=e^2$，e 为基本电荷，则 a 就是玻尔半径）．式(9)中函数 F 是退化成 $(n-1)$ 次多项式的合流超几何级数[3]．

由于 $x>0$ 区域式(2)类似式(6)，边界条件式(4)类似式(7)，所以式(8)也是式(2)、(4)决定的能级，亦即一维氢原子的束缚态能级（但基态能级不在内）．式(9)中 r 换成 x，即得一维氢原子束缚态波函数 $\psi_n(x)$ 在 $x>0$ 区域的表示式，再按照偶函数或奇函数的定义构造出 $x<0$ 区域的表示式，就得到整个波函数．由于 $x\to 0$ 处积分 $\int V(x)dx$ 发散，$x\to 0$ 处 ψ 可以不连续，显然相应于每一个能级 E_n，可以构造出偶宇称波函数和奇宇称波函数各一个，它们是

$$\psi_{n+}(x) = \begin{cases} xF\left(1-n, 2, \frac{2x}{na}\right)e^{-x/na}, & x>0 \\ -xF\left(1-n, 2, -\frac{2x}{na}\right)e^{x/na}, & x<0 \end{cases} \tag{11}$$

$$\psi_{n-}(x) = \begin{cases} \psi_{n+}(x), & x>0 \\ -\psi_{n+}(x), & x<0 \end{cases} \tag{12}$$

注意它们都满足边界条件(4),具体说就是

$$x\to 0,\ \psi_{n\pm}\to \mp x \tag{13}$$

它们的微商则是

$$\psi'_{n+}(0^+)=1,\quad \psi'_{n+}(0^-)=-1 \tag{14}$$
$$\psi'_{n-}(0^+)=1,\quad \psi'_{n-}(0^-)=1$$

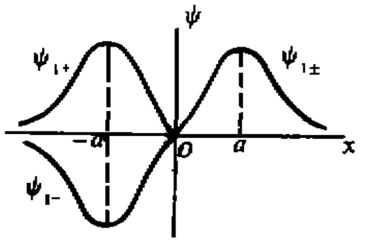

图1

亦即在 $x\to 0$ 处 ψ'_{n-} 连续,ψ'_{n+} 不连续.$n=1$ 时,$\psi_{1\pm}$ 的波形如图 1 所示,$x=0$ 是 ψ_{1-} 的唯一波节,也是 ψ_{1+} 的双重波节.(普遍说,$x=0$ 是 ψ_{n-} 的波节,也是 ψ_{n+} 的双重波节.)[4]

下面讨论基态.基态波函数应该没有波节,因此 $x\to 0$ 处 $\psi(0)\neq 0$,根据式(3)后面的讨论,可知基态能级为 $E_0=-\infty$.为了充分论证这一点,也为了求出基态波函数,我们可以在 $x\sim 0$ 附近将一维库仑势(1)和 δ 势阱作一比较,后者为

$$V_\Omega(x)=-\Omega\delta(x),\ \Omega>0 \tag{15}$$

δ函数的基本性质是

$$\delta(kx)=\delta(x)/|k| \tag{16}$$

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)\mathrm{d}x=1,\ \epsilon>0 \tag{17}$$

式(16)表明 $V_\Omega(x)$是 x 的(-1)次函数,这一点和一维库仑势相同.粒子在 δ 势阱 $V_\Omega(x)$中运动时,唯一的束缚态能级和波函数为[5]

$$E=-\mu\Omega^2/2\hbar^2 \tag{18}$$

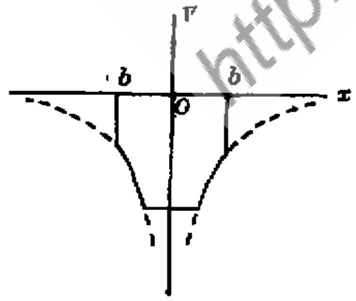

图2

$$\psi_\Omega(x)=\frac{\sqrt{\mu\Omega}}{\hbar}\mathrm{e}^{-\mu\Omega|x|/\hbar^2} \tag{19}$$

ψ_Ω 已经归一化.注意 ψ_Ω是偶宇称.

现在考虑另一种势场

$$V(b,N,x)=\begin{cases}0, & |x|>b\\ -\dfrac{\lambda}{|x|}, & \dfrac{b}{N}<|x|<b\\ -\dfrac{N\lambda}{b}, & |x|<\dfrac{b}{N}\end{cases} \tag{20}$$

其中 $b\ll a$,$N\gg 1$.势场(20)和一维库仑势(1)的关系如图 2 所示,图中实线为 $V(b,N,x)$,虚线为库仑势(1)式.显然,对于所有 x,均有关系

$$V(b,N,x)\geqslant V(x)=-\frac{\lambda}{|x|} \tag{21}$$

因此$V(b,N,x)$场的基态能级应该高于一维库仑场的基态能级.[6] 由于$b\ll a$,而 $V(b,N,x)$仅在$|x|<b$的范围内才不为 0,所以 $V(b,N,x)$可以当做 δ 势阱.对于式(15)

$$\int_{-\infty}^{\infty}V_\Omega(x)\mathrm{d}x=-\Omega\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\mathrm{d}x=-\Omega \tag{22}$$

对于式(20)

$$\int_{-\infty}^{\infty}V(b,N,x)\mathrm{d}x=\frac{N\lambda}{b}\ \frac{2b}{N}-2\lambda\int_{b/N}^{b}\frac{\mathrm{d}x}{x}$$
$$=-2\lambda(1+\ln N) \tag{23}$$

因此 $V(b,N,x)\approx -2\lambda(1+\ln N)\delta(x)$ (24)

相当于式(15)中 $\Omega=2\lambda(1+\ln N)$.因此 $V(b,N,x)$场的基态能级为

$$E\approx -\frac{\mu\Omega^2}{2\hbar^2}=\frac{2\mu\lambda^2}{\hbar^2}(1+\ln N)^2 \tag{25}$$

就 $x\sim 0$ 附近的性质而言,$N\to\infty$ 时 $V(b,N,x)$就是一维库仑场.由此可知一维库仑场的基态能级为

$$E_0=\lim_{N\to\infty}-\frac{2\mu\lambda^2}{\hbar^2}(1+\ln N)^2=-\infty \tag{26}$$

$N\to\infty$ 时,式(24)中 δ 势阱的强度 $\Omega\to\infty$,亦即,就 $x\sim 0$ 附近的性质而言,一维库仑场相当于强度(Ω)为无限大的 δ 势阱.由式(19)

$$|\psi_\Omega(x)|^2=\frac{\mu\Omega}{\hbar^2}\mathrm{e}^{-2\mu\Omega|x|/\hbar^2} \tag{27}$$

其分布宽度为

$$\langle x^2\rangle^{1/2}=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2}\,\mu\Omega}=\frac{\hbar}{2\sqrt{-\mu E}} \tag{28}$$

当$\Omega\to\infty$,$E\to-\infty$,分布宽度趋于零,几率分布集中在 $x\sim 0$ 附近,亦即

(下转封底)

（上接24页）

这样，(2)式中的Φ_m为

$$\Phi_m=\int_S \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{S}=\int_S \boldsymbol{B}(x,y,z)\cdot d\boldsymbol{S}$$

$\boldsymbol{B}(x,y,z)$是曲面S上任一点的磁感应强度．将上式变换到$O'-x'y'z'$坐标系中成为

$$\Phi_m=\int_{S'} \boldsymbol{B}(x_c+x',\ y_c+y',\ z_c+z')\cdot d\boldsymbol{S}'$$

$$=\Phi_m(x_c,y_c,z_c)$$

$d\boldsymbol{S}'$为$O'-x'y'z'$坐标系下的面元矢量．这样，线圈取不同空间位置时磁通量Φ_m的不同就体现在Φ_m随$\boldsymbol{r}_c$即随(x_c,y_c,z_c)的变化上．

现在我们用虚位移方法来求线圈受的合力．设线圈在合力作用下沿x轴有一微小位移δx_c，则合力的功为

$$\delta A=F_x\,\delta x_c$$

而此功应等于线圈在外磁场中能量的变化，即

$$F_x\delta x_c=\delta W=I\delta\Phi_m(x_c,y_c,z_c)=I\delta\Phi_m$$

则有 $$F_x=I\frac{\partial\Phi_m}{\partial x_c}$$

同理 $$F_y=I\frac{\partial\Phi_m}{\partial y_c}\qquad F_z=I\frac{\partial\Phi_m}{\partial z_c}$$

所以 $$\boldsymbol{F}=F_x\hat{i}+F_y\hat{j}+F_z\hat{k}=I\nabla\Phi_m(x_c,y_c,z_c)$$

计算中我们假定电流I是不变的，因此，载有恒定电流的任意线圈在磁场中受的合力为

$$\boldsymbol{F}=I\nabla\Phi_m$$

此即(1)式．由此看出，任意载流线圈所受磁场合力大小与线圈中的电流强度成正比，与通过线圈磁通量梯度的大小成正比，且力的方向和磁通量梯度方向一致．在磁场中，磁场强的地方磁感应线较密，在这样的地方线圈的磁通量较大．而磁通量梯度方向为磁通量增加的方向，所以线圈所受磁场合力的方向指向磁场较强的地方．

参考文献

[1] 郭硕鸿，《电动力学》．人民教育出版社，1979年第一版，p.111(8.41)式．

[2] 《大学物理》，1987.3，p.13－14.

（上接6页）

$$|\psi_\Omega(x)|^2\xrightarrow{\Omega\to\infty}\delta(x)$$

一维库仑场的基态几率分布应该比式(27)更加集[中在]$x\sim0$附近．由此可知一维库仑场的基态波函数为

$$\psi_0(x)=[\delta(x)]^{1/2}$$

粒子只出现于$x\sim0$附近．按照位力定理，基态[动]能平均值为

$$\langle T\rangle_0=\langle\frac{p^2}{2\mu}\rangle_0=-E_0=\infty$$

最后，附带讨论一下一维幂函数型势阱

$$V(x)=-\lambda|x|^\nu,\quad \lambda>0,\quad \nu<0$$

的基态能级．注意$x=0$为$V(x)$的奇点．势场(3[3])特征长度为

$$b_0=\left(\frac{\hbar^2}{\mu\lambda}\right)^{\frac{1}{2+\nu}}$$

任取$b\ll b_0$，易见

$$\int_{-b}^{b}V(x)dx=-2\lambda\int_0^b x^\nu dx$$

当$\nu\leqslant-1$，上式右端$\to-\infty$，$V(x)$在$x\sim0$[附近]的性质相当于强度为无限大的δ势阱，故基态能[量为]负无限大．当$\nu>-1$，式(34)给出

$$\int_{-b}^{b}V(x)dx=\frac{2\lambda}{1+\nu}b^{1+\nu}\xrightarrow{b\to0}0$$

这时$V(x)$在$x\sim0$附近的性质相当于强度趋于[零的]δ势阱，所以基态能量取有限值．

参考文献

[1] R. Loudon, *Am. J. Phys*, 27(1959)649.

[2] 曾谨言，《量子力学》§6.3（科学出版社）

[3] 同[2]，§6.3 及附录五．

[4] 同[1]．

[5] 同[2]，§3.1 例2．

[6] 钱伯初等，《大学物理》86年第3期，p.4

大学物理

编辑者：中国物理学会《大学物理》编辑部（北京师范大学院内）

出版社：高等教育出版社 北京沙滩后街55号

一九八九年七月出版

印刷者：北京印刷三厂

发行者：全国各地邮局

零星订购处：高等教育出版社函购

帐号：北京东四分理处 661720

定价：1.10元

国内统一刊号 CN 11－1910

本刊代号 82－320