动力学上,中心力导致二维轨道运动。让我们先尝试在二维中量化这个问题。哈密顿量 $H=rac{P_r^2}{2\ m}+rac{L^2}{2\ m\ r^2}-rac{e}{r}$

没有方向角 ϕ 这一维度,L 是运动常数,具有量子化的值 l, 假设

$$< r|p_r|^2 = -\frac{\hbar^2}{r}\partial_r r\partial_r < r| = (-\hbar^2)(\frac{1}{r}\partial_r + \partial_r|^2) < r|$$

径向薛定谔方程:

$$\left[\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{1}{r} \partial_r + \partial_r^2 \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l^2}{r^2} - \frac{e}{r} - E \right] R(r) = 0$$

当 $r \to \infty$ 时, $P_r^2 R \to 0$, $R \to e^{-\lambda r}$;定义 $\lambda^2 \equiv \frac{-2mE}{\hbar^2}$ (假设 E < 0 为束缚态)

引入物理尺度: $\rho = \lambda r$

用 ρ 表示的径向方程: $(\partial_{\rho}^2 + \frac{1}{\rho}\partial\rho - \frac{l^2}{\rho^2} + \frac{2me}{\hbar^2\lambda}\frac{1}{\rho} - 1)R(\rho) = 0$ 定义 $\gamma = \frac{me}{\hbar^2\lambda}$

假设解的形式为 $\mathcal{R}(\rho)=e^{-\rho}f(\rho)$,代入得到 $f(\rho)$ 的方程: $(f''(\rho)+(\frac{1}{\rho}-2)f'(\rho)+(\frac{2\gamma-1}{\rho}-\frac{l^2}{\rho^2})f(\rho))=0$

假设 $f(\rho)$ 的级数解形式为 $f(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^{s+m}$

代入级数解得到递推关系 (未完全写出): $\sum_m a_m[(s+m)(s+m-1)+(s+m)-l^2]\rho^{s+m-2}-\sum_m a_m[2(s+m)-(2\gamma-1)]\rho^{s+m-1}=0.$ 化简为:

$$a_m = -\frac{2\gamma - (2l+1) - 2(m-1)}{(s+m)^2 - l^2} a_{m-1}$$

分析最低阶的系数: $a_0[s(s-1)+s-l^2]=0 \Rightarrow s^2-l^2=0$ 。为了解在 r=0 处行为良好,取 s=l (假设 l>0)。

假设级数在 $m = m_{max}$ 处截断 (为了得到束缚态解), 即 $a_m = 0$ for $m > m_{max}$.

最高阶(或递推关系)给出截断条件,这要求 $\rho^{s+m_{max}-1}$ 项的系数满足 $2(s+m_{max})-(2\gamma-1)=0$ (假设 $a_{m_{max}}\neq 0$ 且 $a_{m_{max}+1}=0$)。这导致 $\gamma=s+m_{max}+\frac{1}{2}$ 。

能量 $E = \frac{-\hbar^2}{2 m} \lambda^2 = \frac{-\hbar^2}{2 m} (\frac{m e}{\hbar^2} \frac{1}{\gamma})^2 = \frac{-me^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{\gamma^2}$ 。这与实验拟合。 γ 的可能值(对应 s = l 和 $m_{max} = 0, 1, 2, \ldots$): $\gamma = l + m_{max} + 1/2$ 。

1 作图

假设角向波函数已归一化, 所求的级数形式波函数应当有

$$\int_0^\infty R^2(\rho)\rho d\rho = 1$$

表 1: Integration Result of Function $e^{-2x}x^n$

Function	Value
$e^{-2x}x^1$	$\frac{1}{4}$
$e^{-2x}x^2$	$\frac{1}{4}$
$e^{-2x}x^3$	$\frac{3}{8}$
$e^{-2x}x^4$	$\frac{3}{4}$
$e^{-2x}x^5$	$\frac{15}{8}$

1. 基态 $(Y = 1/2, I = 0, m_{-} \max = 0)$ 波函数:

$$R_{1/2}(\rho) = 2e^{-\rho}$$

其中, $\rho=\frac{me}{\hbar^2}\cdot\frac{2}{1}r$,对应能量 $E=-\frac{me^2}{2\hbar^2}\cdot 4=-\frac{2me^2}{\hbar^2}$ 。

2. 第一激发态 $(\gamma = 3/2)$ I = 0, m₋ max = 1 波函数:

$$R_{3/2}^{(0)}(\rho) = \frac{4}{17}e^{-\rho}(1-4\rho)$$

若 $I = 1, m_{-} \max = 0$ 波函数:

$$R_{3/2}^{(1)}(\rho) = \frac{8}{3}e^{-\rho}\rho$$

能量均为 $E = -\frac{me^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{4}{9} = -\frac{2me^2}{9\hbar^2}$ 。

3. 第二激发态 $(\gamma = 5/2)$ $I = 0, m_{-} \max = 2$ 波函数:

$$R_{5/2}^{(0)}(\rho) = \frac{8}{707}e^{-\rho} \left(1 - 6\rho + 9\rho^2\right)$$

 $I = 1, m_{-} \max = 1$ 波函数:

$$R_{5/2}^{(1)}(\rho) = \frac{24}{5}e^{-\rho}\rho\left(1 - \frac{2}{3}\rho\right)$$

 $I = 2, m_{-} \max = 0$ 波函数:

$$R_{5/2}^{(2)}(\rho) = \frac{8}{15}e^{-\rho}\rho^2$$

能量均为 $E = -\frac{me^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{4}{25} = -\frac{2me^2}{25\hbar^2}$ 。