五、中心力场

中心力场（central force field）是自然界中最常见的势场之一，其势能仅与粒子到力心的距离 r 有关（$V=V(r)$）。本章重点讨论粒子在中心力场中的运动特性，包括角动量守恒、径向方程求解及两体问题的约化。
对于中心力场问题,波函数常常可以分离变量

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

$R(r)$为径向波函数，控制距离；$Y_{lm}(\theta,\phi)$为球谐函数，控制角度

5.1 中心力场中粒子运动的一般性质

5.1.1 角动量守恒与径向方程

1. 角动量守恒

在中心力场中，势能 $V(r)$ 仅与 r 有关，与方向无关。因此，**角动量 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 是守恒量**（证明见原书97页）：

$$\frac{d\boldsymbol{l}}{dt}=0 \implies [\boldsymbol{l},H]=0$$

角动量守恒意味着粒子运动限制在**平面**内（垂直于 $\boldsymbol{l}$ 的平面），可采用球坐标系（r,θ,ϕ）描述，其中 θ 为极角，ϕ 为方位角。

2. 径向方程的建立

粒子在球坐标系中的Hamilton量为：

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)$$

利用球坐标系下的Laplace算符 ∇^2，并将波函数分离变量 $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$（$Y_{lm}$ 为球谐函数），可得径向方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R\right]+V(r)R=ER \tag{6}$$

式中 l 为角量子数（$l=0,1,2,\dots$），对应角动量的大小 $|\boldsymbol{l}|=\hbar\sqrt{l(l+1)}$。

> 角动量守恒是中心力场的核心性质。它将三维运动简化为一维径向运动（加上角度部分的已知解 Y_{lm}），极大降低了求解难度。这种“降维”思路是量子力学中处理对称势场的常用方法，体现了“对称性→守恒量→简化方程”的逻辑链。

5.1.2 径向波函数的渐近行为

当 $r \to 0$时，中心力场的势能通常趋于无穷大（如Coulomb势 $V \propto 1/r$ ），此时径向波函数 $R(r)$ 的渐近行为由离心势能（centrifugal potential）决定。

令 $\chi(r) = rR(r)$ ，径向方程可改写为：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi = E\chi \tag{8}$$

当 $r \to 0$ 时，若 $V(r)$ 的奇异性弱于 $1/r^2$（即 $\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$ ），则离心势能主导，方程近似为：

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0$$

其解为 $\chi(r) \propto r^{l+1}$ 或 r^{-l} 。由于 r^{-l} 在 $r = 0$ 处发散（不符合波函数有限性），故物理上可接受的解为：

$$\chi(r) \propto r^{l+1} \implies R(r) \propto r^l \tag{15}$$

> 渐近行为的分析是求解径向方程的第一步。它帮助我们排除不合理的解（如发散解），并为后续数值或解析求解提供边界条件。例如，在氢原子问题中，$l = 0$ （s态）时 $R(r) \propto r^0 = 1$ ，即波函数在原点附近平坦；而 $l = 1$ （p态）时 $R(r) \propto r$ ，波函数在原点处为零，这与角动量的大小密切相关。

5.1.3 两体问题约化为单体问题

实际中，中心力场常涉及两体相互作用（如氢原子中电子与原子核的Coulomb作用）。此时，可将两体问题约化为单体问题，步骤如下：

1. 引入质心坐标与相对坐标

设两粒子质量为 m_1, m_2 ，坐标为 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$，总能量为 E_T ，则能量本征方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)\right]\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E_T\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{16}$$

引入质心坐标 $\boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{M}$ （$M = m_1 + m_2$ 为总质量）和相对坐标 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ ，则：

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \phi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r})$$

其中 $\phi(\boldsymbol{R})$ 描述质心运动（自由粒子，能量 E_c ），$\psi(\boldsymbol{r})$ 描述相对运动（单体问题，能量 E_r ）。总能量 $E_T = E_c + E_r$ 。

2. 相对运动的Schrodinger方程

相对运动的能量本征方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E_r\psi(\boldsymbol{r}) \tag{23}$$

其中 $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ 为约化质量，∇_r^2 为相对坐标的Laplace算符。

> 两体问题的约化是量子力学中处理多体系统的标准方法。它将复杂的相互作用拆分为“质心自由运动”和“相对单体运动”，既保留了物理本质，又将问题简化为已知的单体问题。这种方法在原子物理、核物理等领域广泛应用，是理解复杂体系的基础。

总结

中心力场的研究核心是**角动量守恒**和**径向方程的求解**。通过分离变量和约化两体问题，我们将三维运动简化为一维径向问题，并结合渐近行为分析，为后续具体势场（如Coulomb势、谐振子势）的求解奠定基础。这种“对称性→守恒量→简化方程”的思路，是量子力学解决实际问题的重要工具。

5.2 无限深球方势阱

无限深球方势阱（infinite spherical well）是中心力场的一种理想模型，其势能为:

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

该模型描述粒子被限制在半径为 a 的球内运动，外部势能为无穷大，因此粒子只能在球内（ $r\leq a$ ）存在束缚态。

5.2.1 径向方程与边界条件

1. 径向方程的分离

在球坐标系下，波函数分离为 $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ ，其中 Y_{lm} 为球谐函数（角度部分已知）。径向方程为（见5.1节式(6)）：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R\right]+V(r)R=ER$$

令 $\chi_l(r)=rR(r)$ ，方程简化为:

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0 \tag{2}$$

2. 边界条件

由于 $V(r)=\infty$当$r>a$ ，波函数在 $r=a$ 处必须为零（否则积分发散）：

$$\chi_l(a)=0 \tag{3b}$$

此外，波函数在 r = 0 处必须有限（避免奇点），故:

$$\chi_l(0)=0 \tag{3a}$$

5.2.2 束缚态的能量本征值

1. $l=0$ 态（s态）

当 $l=0$ 时，离心势能项消失，径向方程为：

$$\frac{d^2\chi_0}{dr^2}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\chi_0=0 \tag{4}$$

令 $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$ （ $E>0$ ），方程变为：

$$\frac{d^2\chi_0}{dr^2}+k^2\chi_0=0$$

其通解为 $\chi_0(r)=A\sin kr+B\cos kr$ 。利用边界条件 $\chi_0(0)=0$ ，得 $B=0$，故 $\chi_0(r)=A\sin kr$ 。再由 $\chi_0(a)=0$ ，得：

$$\sin ka=0 \implies ka=n\pi, \quad n=1,2,3,\ldots$$

因此，能量本征值为：

$$E_{n,0}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, \quad n=1,2,3,\ldots \tag{7}$$

对应的归一化径向波函数为：

$$\chi_{n,0}(r)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right), \quad 0\le r\le a \tag{8}$$

2. $l\neq 0$ 态（p, d, ...态）

当 $l\neq 0$ 时，离心势能项 $\frac{l(l+1)}{r^2}$ 不可忽略，径向方程为：

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l=0 \tag{10}$$

令 $\rho=kr$ ，方程化为球Bessel方程：

$$\rho^2\frac{d^2R_l}{d\rho^2}+2\rho\frac{dR_l}{d\rho}+\left[\rho^2-l(l+1)\right]R_l=0$$

其解为球Bessel函数 $j_l(\rho)$ 和球Neumann函数 $n_l(\rho)$ 。由于 $n_l(\rho)$ 在 $\rho=0$ 处发散（不符合波函数有限性），故物理解为 $j_l(\rho)$ 。

利用边界条件 $R_l(a)=0$ ，得：

$$j_l(ka)=0$$

设 $j_l(x)=0$ 的第 n 个根为 ξ_{ln} （ $n=1,2,3,\ldots$ ），则：

$$ka=\xi_{ln} \implies E_{ln}=\frac{\hbar^2\xi_{ln}^2}{2\mu a^2} \tag{16}$$

对应的径向波函数为：

$$R_{ln}(r)=C_{ln}j_l\left(\frac{\xi_{ln}r}{a}\right)$$

5.2.3 物理讨论

1. 能级结构与节点数

- **s态（$l=0$）**：能量 $E_{n,0}\propto n^2$，与一维无限深方势阱相似，节点数为 $n-1$（如 $n=1$ 无节点，$n=2$ 有1个节点）。
- **p, d态（$l\geq 1$）**：能量由球Bessel函数的根 ξ_{ln} 决定，节点数等于 n（如 $l=1,n=1$ 无节点，$l=1,n=2$ 有1个节点）。

2. 极限情况：自由粒子

当 $a\to\infty$ 时，势阱消失，粒子成为自由粒子。此时，球Bessel函数的渐近行为为：

$$
j_l(\rho)\to\frac{\rho^l}{(2l+1)!!}
$$

能量本征值 $E_{ln}\to\infty$，对应自由粒子的连续谱，符合预期。

> 无限深球方势阱是理解三维受限系统的基础模型。它与一维无限深方势阱的核心区别在于**离心势能的影响**——对于 $l\neq 0$ 态，离心势能会导致能级分裂（相同 n 下，l 越大，能级越高），这反映了角动量对能量的贡献。这种“径向+角度”的分离，是量子力学处理中心力场的典型思路，也为后续学习氢原子等问题奠定了基础。

5.3 三维各向同性谐振子

各向同性谐振子（isotropic harmonic oscillator）是中心力场的一种重要模型，其势能为：

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

该模型描述粒子在三维空间中受恢复力 $F=-\mu\omega^2r$ 作用的振动，广泛应用于固体物理、原子分子物理等领域。

5.3.1 径向方程与渐近行为

1. 径向方程的建立

在球坐标系下，波函数分离为 $\psi(r,\theta,\phi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$，径向方程为（见5.1节式(6)）：

$$
-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R\right]+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2R=ER
$$

令 $\chi_l(r)=rR_l(r)$，方程简化为：

$$
\frac{d^2\chi_l}{dr^2}+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}\right]\chi_l=0 \tag{2}
$$

2. 渐近行为分析

（1） $r \to 0$ 时

离心势能项 $\frac{l(l+1)}{r^2}$ 主导，方程近似为：

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi_l = 0$$

其解为 $\chi_l(r) \propto r^{l+1}$ 或 r^{-l} 。由于 r^{-l} 在 r=0 处发散（不符合波函数有限性），故物理上可接受的解为：

$$\chi_l(r) \propto r^{l+1} \implies R_l(r) \propto r^l \tag{4}$$

（2） $r \to \infty$ 时

谐振子势能项 $\frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}$ 主导，方程近似为：

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} - \frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}\chi_l = 0$$

其解为 $\chi_l(r) \propto e^{\pm\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}}$。由于$e^{+\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}}$ 不满足束缚态条件（波函数平方不可积），故物理上可接受的解为：

$$\chi_l(r) \propto e^{-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}} \tag{5}$$

5.3.2 径向波函数与能量本征值

1. 变量替换与合流超几何方程

为了求解径向方程，做变量替换 $\xi = r^2$ ，并令 $u(\xi) = \chi_l(r)$ ，方程化为合流超几何方程：

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2} + (\gamma - \xi)\frac{du}{d\xi} - \alpha u = 0 \tag{8}$$

其中参数定义为：

$$\alpha = \frac{1}{4}\left(l + \frac{3}{2} - E\right), \quad \gamma = l + \frac{3}{2} \tag{9}$$

2. 束缚态条件与能量本征值

合流超几何函数 $F(\alpha,\gamma;\xi)$ 在 $\xi \to \infty$ 时的渐近行为为 $F(\alpha,\gamma;\xi) \sim e^{\xi}$ ，不满足束缚态条件。因此，必须要求 $\alpha = -n$ （ $n = 0, 1, 2, \ldots$ 为非负整数），此时解为多项式，满足束缚态条件。

由此得能量本征值：

$$E = \left(2n + l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{13}$$

对应的径向波函数为：

$$R_{ln}(r) = \alpha^{-3/2}e^{-\xi/2}F(-n, l + \frac{3}{2}; \xi) \tag{17}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ ， $\xi=\alpha^2r^2$ 。

5.3.3 物理讨论

1. 能级结构与简并度

- **能级结构**：能量本征值 $E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$ ，其中 $N=2n+l$ （ $n=0,1,2,\ldots$; $l=0,1,2,\ldots$ ）。
- **简并度**：对于给定 N ， l 可取 $0,1,2,\ldots,N$ ，每个 l 对应 $2l+1$ 个磁量子数 m （ $m=-l,-l+1,\ldots,l$ ）。因此，简并度为：

$$f_N=\sum_{l=0}^{N}(2l+1)=\frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{19}$$

例如：

- $N=0$ （基态）： $l=0$ ，简并度 $f_0=1$ ；
- $N=1$ ： $l=1$ ，简并度 $f_1=3$ ；
- $N=2$ ： $l=0,2$ ，简并度 $f_2=6$ 。

2. Cartesian 坐标系下的解耦

三维各向同性谐振子可在直角坐标系下解耦为三个独立的一维谐振子（频率均为 \omega ），Hamilton量为：

$$H=H_x+H_y+H_z$$

其中 $H_x=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$ ，同理 H_y,H_z 。

本征函数为三个一维谐振子本征函数的乘积：

$$\Phi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$$

能量本征值为：

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

其中 $N=n_x+n_y+n_z$ ，简并度与球坐标系下一致（均为 $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$ ）。

> 三维各向同性谐振子的能级结构是“简并对称性”的典型案例。其能级简并源于体系的**SO(3)对称性**（空间旋转不变性），而简并度随 N 增加的原因是“角动量量子数的组合增多”。这种对称性导致的简并，是理解原子光谱、分子振动等问题的关键——例如，氢原子的能级简并（除相对论修正外）也源于类似的旋转对称性。

5.4 氢原子

氢原子由质子（核电荷 $+e$）和电子（电荷 $-e$）组成，其$Coulomb$吸引势为：

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \tag{1}$$

本节基于中心力场理论，求解氢原子的能级和波函数，核心是**径向方程的求解**与**能量本征值分析。**

5.4.1 径向方程的建立

在球坐标系下，波函数分离为 $\psi(r,\theta,\phi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$，其中 Y_{lm} 为球谐函数（角度部分已知）。径向方程由中心力场一般形式（5.1节式(6)）代入 $V(r) = -e^2/r$ 得：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R\right] - \frac{e^2}{r}R = ER \tag{2}$$

令 $\chi_l(r) = rR_l(r)$，方程化简为：

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l = 0 \tag{2'}$$

5.4.2 变量替换与合流超几何方程

为求解方程(2')，引入**无量纲变量**：

$$\rho = \sqrt{-\frac{8\mu E}{\hbar^2}}\,r, \quad \epsilon = \sqrt{-\frac{8\mu E}{\hbar^2}}\,a \tag{3}$$

其中 $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 为**Bohr半径**（长度量纲）。代入方程(2')，得：

$$\frac{d^2\chi_l}{d\rho^2} + \left[\frac{\epsilon}{2} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi_l = 0 \tag{4}$$

进一步令 $\xi = \rho/2$，方程化为**合流超几何方程**（Confluent Hypergeometric Equation）：

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2} + (2l+2-2\xi)\frac{du}{d\xi} - 2(l+1)u = 0 \tag{9}$$

其中 $u(\xi) = \chi_l(r)$。

5.4.3 束缚态条件与能量本征值

合流超几何函数 $F(\alpha,\beta;\xi)$ 在 $\xi \to \infty$ 时渐近行为为 $F \sim e^{\xi}$，不满足束缚态条件（波函数平方不可积）。因此，必须要求 $\alpha = -n$（$n = 0, 1, 2, \ldots$ 为非负整数），此时解为多项式，满足束

缚态条件。

由 $\alpha = -n$，得:

$$-n = \frac{1}{2}\left(l + 1 - \frac{2\mu E a}{\hbar^2}\right) \implies E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \tag{18}$$

此即**氢原子能级公式**，对应能量本征值 $E_n = -13.6\,\mathrm{eV}/n^2$（$n = 1, 2, 3, \dots$）。

5.4.4 径向波函数与归一化

径向波函数形式为:

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\rho^{l+1}e^{-\rho/2}F(-n, 2l+2; \rho) \tag{21}$$

其中:

- $\rho = \frac{2r}{na}$（无量纲径向坐标）;
- N_{nl} 为归一化常数，由 $\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$ 确定;
- $F(-n, 2l+2; \rho)$ 为合流超几何函数（多项式，次数为 n）。

归一化常数计算

利用合流超几何函数的正交性和积分公式，归一化常数为:

$$N_{nl} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(n+l+1)!}} \tag{22}$$

5.4.5 具体波函数例子

1. 基态（1s 态：$n = 1, l = 0$）

- 径向波函数:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}}e^{-r/a} \tag{23}$$

（因 $F(0, 2; \rho) = 1$，归一化常数 $N_{10} = 2/a^{3/2}$）。
- 能量：$E_1 = -13.6\,\mathrm{eV}$。

2. 第一激发态（2s 态：$n = 2, l = 0$）

- 径向波函数:

$$R_{20}(r)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a}\right)e^{-r/(2a)} \tag{24}$$

（因 $F(-1,2;\rho)=1-\rho$，归一化常数 $N_{20}=1/(\sqrt{2}a^{3/2})$）。

- 能量：$E_2=-3.4\,\mathrm{eV}$。

3. 2p 态（$n=2,l=1$）

- 径向波函数：

$$R_{21}(r)=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a}\right)^{5/2}\frac{r}{a}e^{-r/(2a)} \tag{25}$$

（因 $F(-1,4;\rho)=\rho$，归一化常数 $N_{21}=1/(\sqrt{6}a^{5/2})$）。

- 能量：$E_2=-3.4\,\mathrm{eV}$（与2s态简并）。

5.4.6 能级简并与选择定则

1. 简并度

对于主量子数 n，角量子数 l 取值范围为 $0\leq l\leq n-1$，每个 l 对应 $2l+1$ 个磁量子数 m（$m=-l,-l+1,\ldots,l$）。因此，能级简并度为：

$$f_n=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2 \tag{26}$$

例如：

- $n=1$（基态）：$f_1=1$（仅$1s$态）；
- $n=2$：$f_2=4$（$2s,2p_x,2p_y,2pz$）；
- $n=3$：$f_3=9$（$3s,3p,3d$）。

2. 选择定则

电子跃迁需满足**电偶极辐射选择定则**：

$$\Delta l=\pm1,\quad \Delta m=0,\pm1 \tag{27}$$

（$\Delta l=\pm1$ 保证角动量守恒，Δm 保证磁量子数守恒）。