

CH 13 氢原子

- 由上一章可知, $\psi_{lm} = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, 其中 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 部分与 r 无关, $R_l(r)$ 由 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 决定
- 氢原子是质子 p 和电子 e 的两体束缚态, Hilbert 空间为 $V_p \times V_e$, 利用质心坐标和相对坐标, 可以分解为

$$V_p \times V_e = V_{cm} \otimes V_{rel}$$

在质心坐标系中, 问题简化为一个单体问题

$$H = \frac{\vec{p}_{rel}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

其中 $\vec{p}_{rel} = \vec{p}_e - \vec{p}_p$ 为电子和质子的相对动量,

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

为电子的约化质量.

r 为到质心的距离

由于 $m_p \approx 938 \text{ MeV} \gg m_e \approx 0.511 \text{ MeV}$, 所以质心几乎和质子的位置相同, 质心系约等于质子的静止系.

$$m \approx m_e$$

r 约为到质子的距离.

- 利用 $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$ 和 $[\hat{H}, \hat{L}_3] = 0$ 可知 $|l, m\rangle$ 也是 \hat{H} 的本征态, 用 $|E, l, m\rangle$ 标记这个本征态, 满足

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}|E, l, m\rangle &= E|E, l, m\rangle \\ \hat{L}^2|E, l, m\rangle &= l(l+1)\hbar^2|E, l, m\rangle \\ \hat{L}_3|E, l, m\rangle &= m\hbar|E, l, m\rangle \end{aligned} \right\} \text{--- (*1)}$$

由上一节推导可知

$$\langle x, y, z | E, l, m \rangle = R_{EL}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{--- (x2)}$$

$$\text{其中 } \int dr r^2 |R_{EL}(r)|^2 = 1$$

Ex 13.1 从 (x1) 和 (x2) 式出发, 在球坐标系下推导出 $R_{EL}(r)$ 满足的微分方程

Ex 13.2 将 R_{EL} 的微分方程无量纲化.

Ex 13.3 仿照求谐振子本征态波函数的方法, 求解 Ex 13.2 得到的微分方程 (只考虑 $E < 0$ 的情况)

Ex 13.4 (1) 仿照上例计算 $\psi_{210}(\vec{r})$, $\psi_{211}(\vec{r})$ 和 $\psi_{21,-1}(\vec{r})$
 (2) 计算 $\psi_{100}(\vec{r})$, $\psi_{200}(\vec{r})$, $\psi_{210}(\vec{r})$, $\psi_{211}(\vec{r})$ 和 $\psi_{21,-1}(\vec{r})$ 的 \bar{r} , Δr , (用 a_0 表示)

(3) 用程序画出 $R_{10}(r)$, $R_{20}(r)$ 和 $R_{21}(r)$ 的曲线, 并和上面计算的 Δr 相比较.

(4) 在经典物理中, 若吸引势能为 $\frac{1}{r}$ 的形式, 则最低能量的粒子会集聚在 $r \sim 0$ 处. 在量子物理中, 若测量最低能量的电子的位置, 其最可能出现在哪里? 解释和经典物理的异同

(5) 比较 $R_{20}(r)$ 和 $R_{21}(r)$ 的曲线, 解释角动量 l 对波函数极值位置的影响.

(6) $R_{10}(r)$, $R_{20}(r)$ 和 $R_{21}(r)$ 和 r 轴有多少个交点? 对此你能得到什么样的猜测

- Ex 13.5 (1) 将本征能量用玻尔半径 a_0 表示
 (2) 给定 $n > 1$, 计算本征能量为 E_n 的态的个数 (简并度)

- Ex 13.6 (1) 计算氢原子的 a_0 (单位 nm) 和能级 E_n (单位 eV)
 (2) 证明 $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ 是无量纲的量, 并求其数值.

总结:

在这一章中我们推导了氢原子电子的径向波函数 $R_{nl}(r)$

波函数由 n, l, m 三个量子数描述

n : 主量子数 $n > 1$

l : 角动量量子数 $0 \leq l \leq n-1$

m : 磁量子数 $|m| \leq l$

波函数 $|nlm\rangle$ 的坐标表象为

$$\langle x, y, z | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

能量本征值只与 n 有关

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

对于给定 n , 简并度为 n^2

延伸阅读, 对于 E_n 只依赖于 n 而不依赖 l , 有更深层次的原因, 感兴趣的同學請自行學習 Shankar §13.2