4.3 球形势阱

我们现在研究一个特殊的中心势，即球形无限深势阱:

$$V(r) = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & r < a; \\ \infty, & r \geq a \end{array} \right. \tag{4.55}$$

a为球形空腔的半径. 粒子在其中自由运动，但不能穿透势阱. 因此$\psi(r,\theta,\phi)=0$, 当$r\geq a$. 能量本征函数仍然可以写为$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_{lm}$.

在阱内$r<a$, 粒子满足的径向方程为

$$-\frac{\hbar^2 \mathrm{d}^2\chi}{2\mu \mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\chi = E\chi \tag{4.56}$$

其中$\chi \equiv rR(r)$.

如果$l=0$, 即s波情况, 方程简化为

$$\chi_0'' + \beta\chi_0 = 0, \tag{4.57}$$

其中$\beta=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}$, 注意本问题虽然讨论束缚态，但总能量$E>0$, 因为阱外势能无穷大, 阱内势能为零.

此方程的解为

$$\chi_0 = A\sin(\beta r) + B\cos(\beta r). \tag{4.58}$$

考虑边界条件. $r\to 0$时, 应该满足$\chi_0(0)=0$. 因此我们舍弃第二项.

再考虑$r=a$时波函数为零, 因此$\beta a=(n_r+1)\pi, n_r=0,1,2,\cdots$. 即粒子能级为

$$E_{n_r,0} = \frac{\pi^2\hbar^2(n_r+1)^2}{2\mu a^2}. \tag{4.59}$$

下面考虑$l\neq 0$的情形. 将径向方程可以写为

$$rR'' + 2R' + (\beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})rR = 0 \tag{4.60}$$

即

$$R_l'' + \frac{2}{r}R_l' + (\beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})R_l = 0 \tag{4.61}$$

这里我们将R写为R_l, 因为此解依赖于角动量量子数l.

引入$\rho=\beta r$, 方程改写为

$$\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}\rho} + (1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2})R_l = 0 \tag{4.62}$$

此为球Besssel方程. 其解为Bessel函数$j_l(\rho)$和诺伊曼函数$n_l(\rho)$.

在$\rho\to 0$的极限下,

$$j_l(\rho) \to \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \tag{4.63}$$

$$n_l(\rho) \to -(2l-1)!!\rho^{-l-1}. \tag{4.64}$$

而物理边界条件是$r\to 0$时，$\chi\propto r^{l+1}$, 即$R_l\propto r^l$, 所以$R_l\propto j_l(\beta r)$，舍去$n_l(\beta r)$.

在$r=a$处波函数等于零，因此

$$j_l(\beta a) = 0. \tag{4.65}$$

而$j_l(x)=0$的'根'是$x_{n_r,l}$, 可以查到, 其中$n_r=0,1,2,\cdots$是根的序号. 此方程非常类似$\sin(x)=0$, $x_{n_r,l}$ 类似于$n\pi$. 特别是$j_0(x)=\sin(x)/x$, 对应前面讨论过的$l=0$的情况.

这些根给出β值，也就给出能量本征值

$$E_{n_r,l} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}x^2_{n_r,l} \tag{4.66}$$

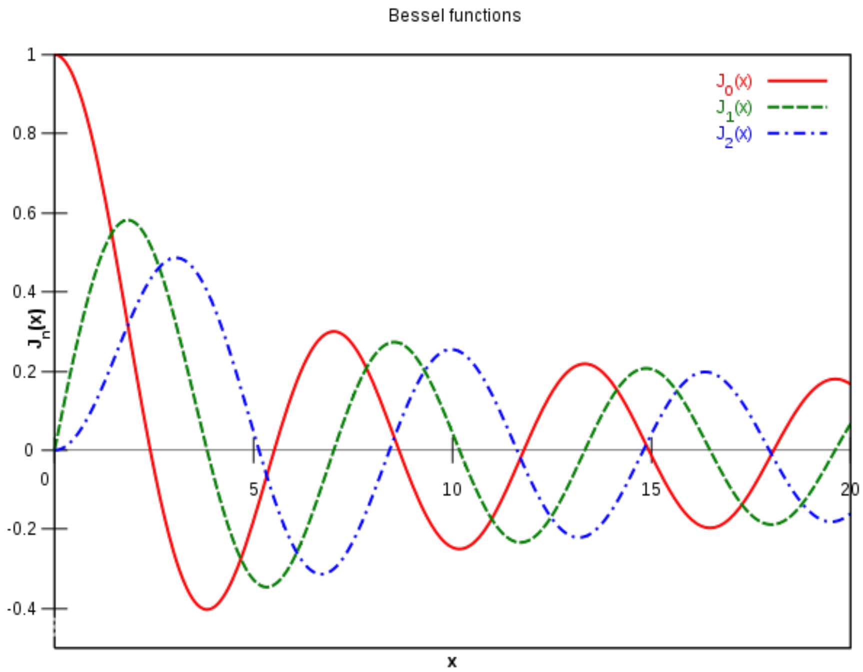

Figure 4.5: Bessel函数的根.