КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №10: Движение в центральном поле

А.Г. Семенов

I. РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ

На предыдущих лекциях мы подробно рассмотрели собственные состояния оператора углового момента. При этом в качестве примера мы упомянули частицу в центральном поле, гамильтониан которой в координатном представлении имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2}{2m} + V(\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}). \tag{1}$$

Для разделения переменных в данной задаче удобно перейти к сферическим координатам

$$x = r\sin(\theta)\cos(\varphi), \qquad y = r\sin(\theta)\sin(\varphi), \qquad z = r\cos(\theta). \tag{2}$$

При этом алгебра операторов момента импульса реализуется через дифференциальные операторы, действующие не угловые переменные. Они будут иметь следующий вид

$$\hat{l}_x = i\left(\sin(\varphi)\partial_\theta + \cot(\theta)\cos(\varphi)\partial_\varphi\right) \tag{3}$$

$$\hat{l}_y = i\left(-\cos(\varphi)\partial_\theta + \cot(\theta)\sin(\varphi)\partial_\varphi\right) \tag{4}$$

$$\hat{l}_z = -i\partial_\varphi \tag{5}$$

$$\hat{l}^2 = -\partial_\theta^2 - \cot(\theta)\partial_\theta - \frac{1}{\sin^2(\theta)}\partial_\varphi^2 \tag{6}$$

Гамильтониан системы в сферических координатах имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\partial_r^2}{2m} - \frac{\partial_r}{mr} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{7}$$

Будем искать собственные состояния данного Гамильтониана в виде

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{8}$$

где радиальная часть $R_{nl}(r)$ волновой функции собственного состояния удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\partial_r^2 R_{nl}(r)}{2m} - \frac{\partial_r R_{nl}(r)}{mr} + \left(\frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right)R_{nl}(r) = E_{nl}R_{nl}(r). \tag{9}$$

Потенциал $\frac{l(l+1)}{2mr^2}$, возникший из-за ненулевого значения углового момента называется центробежным потенциалом. Отметим, что в уравнение не входит значение проекции момента импульса на ось квантования, что означает тот факт, что состояния отвечающие некоторому значению l заведомо $(2l+1)$-кратно вырождены. Таким образом в результате разделения переменных мы пришли к исследованию задачи на собственные значения на функциях, заданных на полуоси со скалярным произведением

$$\langle R_1|R_2\rangle = \int\limits_0^\infty drr^2 R_1^*(r)R_2(r). \tag{10}$$

При этом уравнение на собственные значения имеет вид:

$$-\frac{1}{2mr^2}\partial_r(r^2\partial_r R_{nl}(r)) + \left(\frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right) R_{nl}(r) = E_{nl}R_{nl}(r). \tag{11}$$

Для исследования задачи удобнее перейти к функциям $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$. При этом уравнение преобразуется к виду

$$-\partial_r^2 u_{nl}(r) + \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right) u_{nl}(r) = 2mE_{nl}u_{nl}(r), \tag{12}$$

а скалярное произведение будет иметь вид

$$\langle u_1|u_2\rangle = \int\limits_0^\infty dru_1^*(r)u_2(r). \tag{13}$$

II. КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЙ ПОТЕНЦИАЛ И АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

В качестве первого примера мы разберем ситуацию при которой потенциал не имеет сингулярностей и является короткодействующим, или, иными словами, достаточно быстро затухает при $r \to \infty$. Исследуем поведение волновой функции собственного состояния в различных предельных случаях. В частности, при $r \to 0$ в силу сингулярного поведения центробежного потенциала он играет определяющую роль и, следовательно, для определения асимптотического поведения при $l > 0$ достаточно знать решения уравнения

$$-\partial_r^2 u_l(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}u_l(r) = 0. \tag{14}$$

Данное уравнение является уравнением Эйлера и имеет степенное решение $u_{nl}(r) = r^\gamma$. При этом $\gamma(\gamma-1) = l(l+1)$, а значит возможно два решения $\gamma = l+1$ или $\gamma = -l$. Первое значение определяет регулярное в нуле решение

$$u_l^{reg}(r) \sim r^{l+1} \qquad\qquad r \to 0, \tag{15}$$

а второе значение - сингулярное решение

$$u_l^{sing}(r) \sim \frac{1}{r^l} \qquad\qquad r \to 0. \tag{16}$$

Поскольку потенциал не имеет нигде сингулярности, то и все решения для радиальной волновой функции имеющие физический смысл не должны содержать сингулярности. Это означает, что они должны вести себя также как и регулярное решение. Таким образом, в нуле граничное условие имеет вид $u_{nl}(r) \sim r^{l+1}$. В обратном пределе $r \to \infty$ и внешний потенциал и центробежный потенциалы обращаются в ноль и, поэтому. асимптотическое поведение определяется значением энергии. Из вида уравнения следует, что если энергия положительна, то возможны только состояния непрерывного спектра и $u(r) \sim e^{\pm i\sqrt{2mE}r}$. В случае, когда энергия отрицательна возможно существование связанного состояния, для которого $u(r) \sim e^{-\sqrt{2m|E|}r}$ при больших r. Таким образом, для того, чтобы существовало связанное состояние с энергией E_{nl} и угловым моментом l необходимо, чтобы уравнение

$$-\partial_r^2 u_{nl}(r) + \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right) u_{nl}(r) = 2mE_{nl}u_{nl}(r), \tag{17}$$

имело бы решение, которое ведет себя как $u_{nl}(r) \sim r^{l+1}$ при $r \to 0$ и $u_{nl}(r) \sim e^{-\sqrt{2m|E_{nl}|}r}$ при $r \to \infty$. В целом исследование данных задач производится совершенно аналогично тому, как это делалось в одномерном случае с тем лишь отличием, что граничные условия немного иные. Тем ни менее, ряд утверждений, таких как, например, осцилляторная теорема справедливы и в этом случае.

III. АТОМ ВОДОРОДА

Случаем, отличным от предыдущего является задача об атоме водорода. Это задача о движении электрона в кулоновском поле ядра. Потенциал в этом случае имеет вид $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$. Как и ранее разделим переменные в виде

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r} u_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{18}$$

При этом получается следующее уравнение на радиальную часть волновой функции

$$\partial_r^2 u_{nl}(r) + \left(2mE_{nl} + \frac{2mZe^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_{nl}(r) = 0. \tag{19}$$

Связанные состояния возможны при $E_{nl} < 0$. Первым делом обезразмерим данное уравнение введя переменную $\rho = r\sqrt{-2mE_{nl}}$. Кроме этого выделим граничные условия введя новую функцию $\nu(\rho)$ соотношением

$$u_{nl}(r) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \nu_{nl}(\rho). \tag{20}$$

В итоге уравнение преобразуется к виду

$$\rho \partial_\rho^2 \nu_{nl}(\rho) + 2(l+1-\rho)\partial_\rho \nu_{nl}(\rho) + (\xi_{nl} - 2(l+1))\nu_{nl}(\rho) = 0, \qquad \xi_{nl} = Ze^2\sqrt{-\frac{2m}{E_{nl}}} \tag{21}$$

Будем искать решение данного уравнения в виде степенного ряда

$$\nu(\rho) = \sum_{k=0} c_k \rho^k, \tag{22}$$

причем из уравнения следует, что его коэффициенты удовлетворяют следующему рекуррентному соотношению

$$c_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \xi_{nl}}{(k+1)(k+2l+2)} c_k \tag{23}$$

Возможно две ситуации. В одной ситуации ряд обрывается на какой-то степени, а в обратном случае ряд бесконечен. однако в случае когда ряд бесконечен его асимптотическое поведение $c_{k+1}/c_k = 2/k$, что отвечает асимптотическому поведению $\nu(\rho) \sim e^{2\rho}$. В этом случае волновая функция не удовлетворяет граничному условию. Таким образом, для существовния связанного состояния необходимо, чтобы ряд оборвался. Это означает, что для какого-то целого n имеет место равенство

$$\xi_{nl} = 2(n+l+1) \tag{24}$$

Отсюда находим энергии связанных состояний

$$E_{nl} = -\frac{mZ^2e^4}{2(n+l+1)^2}. \tag{25}$$

Заметим, что в данной задаче существует случайное вырождение, или иными словами уровни энергии с разными значениями момента имеют одинаковую энергию. Данное вырождение возникает из-за наличия в задаче дополнительного интеграла движения - вектора Рунге-Ленца.