КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №11: Атом водорода

А.Г. Семенов

I. ВЕКТОР РУНГЕ-ЛЕНЦА

В конце предыдущей лекции мы нашли энергии связанных состояний водородоподобного атома в координатном представлении. При этом мы заметили, что в системе существует вырождение уровней. На этом занятии мы подробно разберем вопрос о том, какие законы сохранения существуют в данной задаче, и решим задачу о собственных состояниях атома водорода при помощи алгебраического подхода. Гамильтониан, описывающий водородоподобный атом имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{\hat{r}}, \qquad \hat{r} = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}. \tag{1}$$

Давайте разберемся с тем, какие существуют у данной системы законы сохранения. Во-первых, как уже обсуждалось, в силу сферической симметрии компоненты момента импульса

$$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \qquad \hat{l}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \qquad \hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \tag{2}$$

коммутируют с Гамильтонианом, но при этом, однако, не коммутируют между собой $[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k$. При этом со всеми тремя данными операторами коммутирует оператор квадрата импульса $\hat{l}^2 = \hat{l}_i\hat{l}_i$. Сферическая симметрия не специфична для атома водорода и присутствует в любой системе с центральным потенциалом. Однако в рассматриваемой задаче существует дополнительный закон сохранения, который называется вектором Рунге-Ленца. Он имеет следующие компоненты

$$\hat{A}_x = \frac{\hat{x}}{\hat{r}} - \frac{\hat{p}_y\hat{l}_z + \hat{l}_z\hat{p}_y - \hat{p}_z\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{p}_z}{2me^2}, \tag{3}$$

$$\hat{A}_y = \frac{\hat{y}}{\hat{r}} - \frac{\hat{p}_z\hat{l}_x + \hat{l}_z\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{p}_x}{2me^2}, \tag{4}$$

$$\hat{A}_z = \frac{\hat{z}}{\hat{r}} - \frac{\hat{p}_x\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{p}_x - \hat{p}_y\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{p}_y}{2me^2}. \tag{5}$$

Компоненты данного вектора не коммутируют с операторами компонент момента импульса

$$[\hat{l}_i, \hat{A}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{A}_k. \tag{6}$$

При этом коммутационные соотношения совершенно аналогичны соотношениям для операторов координаты и импульса. Между собой компоненты вектора Рунге-Ленца также не коммутируют. Их коммутационные соотношения имеют вид

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -\frac{2i\epsilon_{ijk}}{me^4}\hat{H}\hat{l}_k, \tag{7}$$

а гамильтониан связан с квадратом вектора Рунге-Ленца:

$$\hat{A}^2 = 1 + \frac{2}{me^4}\hat{H}(1 + \hat{l}^2). \tag{8}$$

Кроме этого несложно проверить тот факт, что $\hat{A}_k\hat{l}_k = \hat{l}_k\hat{A}_k = 0$.

II. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ АТОМА ВОДОРОДА

Давайте получим энергии дискретных уровней водородоподобного атома используя только коммутационные соотношения. Для этого рассмотрим собственное подпространство Гамильтониана, отвечающее энергии $-\epsilon$. В силу коммутационных соотношений, действие всех введенных операторов (компонент момента импульса и вектора Рунге-Ленца) переводит данное подпространство в себя. Введем новые операторы $\hat{a}_k = e^2\sqrt{m/(2\epsilon)}\hat{A}_k$ таким образом, чтобы выполнялись соотношения

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k, \qquad \hat{a}^2 + \hat{l}^2 + 1 = \frac{me^4}{2\epsilon}. \tag{9}$$

на рассматриваемом подпространстве. Для того, чтобы получить спектр введем два набора операторов соотношениями

$$\hat{j}_k^{(1)} = \frac{1}{2}\left(\hat{l}_k + \hat{a}_k\right), \qquad \hat{j}_k^{(2)} = \frac{1}{2}\left(\hat{l}_k - \hat{a}_k\right) \tag{10}$$

Несложно видеть, что каждый из этих наборов реализует коммутационные соотношения алгебры SU(2), которую мы подробно разбирали при исследовании оператора момента импульса. Коммутационные соотношения имеют вид

$$[\hat{j}_i^{(1)}, \hat{j}_j^{(1)}] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k^{(1)}, \qquad [\hat{j}_i^{(2)}, \hat{j}_j^{(2)}] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k^{(2)}, \qquad [\hat{j}_i^{(1)}, \hat{j}_j^{(2)}] = 0. \tag{11}$$

Это означает, что представление может быть построено совершенно аналогичным образом, с тем лишь отличием, что $\hat{j}^{(1)}_k \hat{j}^{(1)}_k = \hat{j}^{(2)}_k \hat{j}^{(2)}_k = \frac{1}{4}(\hat{l}^2 + \hat{a}^2)$. Таким образом любое представление нумеруется тремя числами. Первое число это j, которое может принимать целые и полуцелые неотрицательные значения, так что на любом состоянии из рассматриваемого подпространства $(\hat{l}^2 + \hat{a}^2)|\psi\rangle = 4j(j+1)|\psi\rangle$. Кроме этого состояние определяется двумя проекциями m_1 и m_2, каждая из которых пробегает значения от $-j$ до j. Используя связь вектора Рунге-Ленца с Гамильтонианом получим, что

$$4j(j+1) + 1 = \frac{me^4}{2\epsilon}, \tag{12}$$

откуда энергия, собственного подпространства, отвечающего соответствующему представлению равна

$$E_{2j+1} = -\epsilon = -\frac{me^4}{2(2j+1)^2} \tag{13}$$

Число $n = 2j + 1$ называется главным квантовым числом и может принимать все положительные целые значения. При этом степень вырождения каждого уровня n^2. Построив все возможные представления мы получили все возможные значения энергии, а на предыдущем занятии в координатном представлении мы получили выражения для волновых функций всех связанных состояний.