
Раздел 2

ДВИЖЕНИЕ В СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ТЕОРИИ МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

ЛЕКЦИЯ 8

В разделе 1 были рассмотрены основные положения квантовой механики и приведены примеры их использования для решения некоторых простейших одномерных задач. В данном разделе будет рассмотрена одна из наиболее важных трехмерных задач — движение частицы в сферически-симметричном поле. Кроме того, будет рассмотрен математический аппарат теории момента количества движения, который позволит нам естественным образом ввести понятие спина.

§ 32. Движение частицы в сферически-симметричном поле (дискретный спектр)

Найдем стационарные состояния движения частицы в сферически-симметричном поле с потенциальной энергией

$$V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|).$$

Для этого надо найти решения стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \hat{H} = -\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)\nabla^2 + V(|\mathbf{r}|), \quad (32.1)$$

удовлетворяющие во всем пространстве требованиям непрерывности, квадратичной интегрируемости и непрерывности градиента.

Ввиду сферической симметрии поля задачу удобно решать в сферической системе координат (r, θ, φ) , начало которой совпадает с центром симметрии поля, а полярная ось имеет некоторое произвольное направление:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, & y &= r \sin \theta \sin \varphi, & z &= r \cos \theta, \\ 0 &\leq r < \infty, & 0 &\leq \theta \leq \pi, & 0 &\leq \varphi < 2\pi. \end{aligned} \quad (32.2)$$

В этой системе координат имеем

$$\begin{aligned} V(|\mathbf{r}|) &= V(r), & \psi(\mathbf{r}) &= \psi(r, \theta, \varphi), \\ \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\Lambda}}{r^2}, \\ \hat{\Lambda} &= \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned} \quad (32.3)$$

(см. упр. 2.3).

Как мы отмечали в § 16, знание интегралов движения системы обычно позволяет упростить решение уравнения Шредингера. Поэтому и в данном случае начнем с выявления сохраняющихся физических величин.

Легко видеть, что гамильтониан системы (32.1) инвариантен относительно операции \hat{P} инверсии пространства (см. § 12), а поэтому четность есть интеграл движения.

Интегралами движения являются также квадрат момента количества движения \mathbf{L}^2 и любая его проекция L_i ($i = x, y, z$) (см. упражнение 2.5). Кроме того, легко проверить (см. упр. 1.7), что

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i] = 0, \quad \text{но} \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_k] \neq 0 \quad \text{при} \quad i \neq k,$$

а также

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{P}] = 0, \quad [\hat{L}_i, \hat{P}] = 0.$$

Таким образом, все четыре оператора

$$\hat{H}, \hat{P}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i, \quad (32.4)$$

где i имеет какое-нибудь одно из трех возможных значений x, y, z , коммутируют друг с другом. Подчеркнем, что в этот набор может быть включена только одна компонента оператора $\hat{\mathbf{L}} = \{\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\}$, так как различные компоненты этого оператора не коммутируют между собой.

Поскольку все направления в сферически симметричном поле равноправны, то в дальнейшем будем рассматривать следующий набор взаимно коммутирующих операторов:

$$\hat{H}, \hat{P}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z, \quad (32.5)$$

т. е. будем искать такие решения $\psi(\mathbf{r})$ уравнения Шредингера, которые являются собственными функциями всех этих операторов. В сферической системе координат соответствующие уравнения имеют вид:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0, \quad (32.6)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi = L^2 \psi, \quad (32.7)$$

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi, \quad (32.8)$$

$$\hat{P} \psi = P \psi, \quad (32.9)$$

где

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \hat{\Lambda} = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right), \quad (32.10)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (32.11)$$

(см. упр. 1.9).

Собственные значения и собственные функции оператора \hat{L}_z есть (см. упр. 1.10)

$$L_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \quad (32.12)$$

$$\psi_m(\mathbf{r}) = F(r, \theta) \Phi_m(\varphi), \quad (32.13)$$

где

$$\Phi_m(\varphi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \quad (32.14)$$

причем

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}, \quad (32.15)$$

а $F(r, \theta)$ есть произвольная квадратично-интегрируемая функция.

Из математики известно, что собственные значения оператора \widehat{L}^2 даются формулой

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (32.16)$$

а каждому собственному значению соответствуют собственные функции:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l; \quad (32.17)$$

это сферические функции (см. Дополнение 7), удовлетворяющие условию ортонормированности на сфере

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (32.18)$$

Сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ всегда могут быть представлены в виде

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi), \quad (32.19)$$

где $\Theta_{lm}(\theta)$ — некоторые ограниченные функции (см. (Д7.5)). Следовательно, каждая функция $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ является также собственной функцией оператора \widehat{L}_z , принадлежащей собственному значению $m\hbar$:

$$\widehat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (32.20)$$

Сферические функции при $l = 0, 1, 2$ имеют следующий явный вид:

$$\begin{aligned} l = 0, m = 0 & : Y_{0,0} = 1/\sqrt{4\pi}, \\ l = 1, m = \pm 1 & : Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{3/8\pi} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ m = 0 & : Y_{1,0} = \sqrt{3/4} \cos \theta, \\ l = 2, m = \pm 2 & : Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}, \\ m = \pm 1 & : Y_{2,\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \theta \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ m = 0 & : Y_{2,0} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1). \end{aligned} \quad (32.21)$$

В математике показывается, что каждая сферическая функция $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ удовлетворяет соотношению

$$\widehat{P} Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (32.22)$$

т. е. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ есть собственная функция оператора инверсии, принадлежащая собственному значению $(-1)^l$.

Итак, мы видим, что функции

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(\mathbf{r}) &= R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \end{aligned} \quad (32.23)$$

где $R(r)$ — некоторая функция r , являются общими собственными функциями операторов $\widehat{\mathbf{L}}^2$, \widehat{L}_a , \widehat{P} . Подставляя $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ в уравнение Шредингера (32.6), получаем

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) R(r) = 0, \quad (32.24)$$

т. е. $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ есть собственная функция гамильтониана (32.1), если $R(r)$ удовлетворяет уравнению (32.24) и является непрерывной квадратично-интегрируемой функцией с непрерывной первой производной. Уравнение (32.24) иногда называют радиальным уравнением Шредингера.

Введем новую функцию

$$u(r) = rR(r), \quad (32.25)$$

для которой из (32.24) получаем уравнение

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V_l(r)) u(r) = 0, \quad (32.26)$$

где

$$V_l(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (32.27)$$

Уравнение (32.26) внешне совпадает с уравнением Шредингера для одномерного движения частицы в поле с потенциальной энергией $V_l(r)$.

Пусть E_{nl} ($n = 1, 2, 3, \dots$) есть n -е собственное значение уравнения (32.26) при фиксированном l . Аналогично тому, как в § 12 было доказано, что все дискретные энергетические уровни частицы в произвольном одномерном потенциальном поле невырождены, легко показать, что каждому значению E_{nl} соответствует только одно линейно независимое решение уравнения (32.26):

$$u(r) = u_{nl}(r).$$

Таким образом, искомые общие собственные функции операторов \widehat{H} , \widehat{P} , $\widehat{\mathbf{L}}^2$, \widehat{L}_z имеют вид

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (32.28)$$

где

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}.$$

Мы видим, что каждому собственному значению гамильтониана E_{nl} соответствует $(2l+1)$ линейно независимых собственных функций, отличающихся значениями m ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$). Такое вырождение имеется в любом сферически-симметричном поле. Это «обязательное» вырождение можно было предвидеть еще до решения уравнения Шредингера. Действительно, в сферически-симметричном поле все направления равноправны, а поэтому энергия системы не может зависеть от ориентации в пространстве вектора момента количества движения, в частности от величины его проекции на ось z .

Пусть ψ_m и $\psi_{m'}$ — волновые функции двух состояний, отличающихся только значениями m . Тогда любая линейная комбинация этих функций

$$\psi = \alpha\psi_m + \beta\psi_{m'},$$

является собственной функцией гамильтониана, принадлежащей тому же энергетическому уровню, которому принадлежат ψ_m и $\psi_{m'}$, но в отличие от них функция ψ не является собственной функцией оператора \widehat{L}_z . Поэтому в состоянии ψ проекция момента количества движения на ось z не имеет определенного значения. Таким образом, частица, движущаяся в любом сферически-симметричном поле с некоторым определенным значением энергии, может находиться не только в состояниях с определенным значением проекции момента на некоторое направление, но и в бесчисленном множестве таких состояний, в которых проекция момента не имеет определенного значения (исключением является случай $l = 0$, когда проекция момента может иметь только одно значение $m = 0$).

В некоторых сферически-симметричных полях одному и тому же значению энергии системы может соответствовать несколько различных значений l , т.е. несколько линейно-независимых функций ψ_{nlm} . Это вырождение по l в отличие от «обязательно» вырождения по m иногда называется «случайным». Ниже мы встретимся с примерами такого «случайного» вырождения.

Поскольку согласно Дополнению 2 собственные функции эрмитова оператора, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны, для всех функций $\{\psi_{nlm}\}$ имеем

$$\langle \psi_{nlm} | \psi_{n'l'm'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (32.29)$$

Отсюда, в частности, получаем

$$\langle \psi_{nlm} | \psi_{n'l'm} \rangle = \delta_{nn'},$$

т. е.

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^*(r) R_{n'l}(r) r^2 dr = \delta_{nn'}. \quad (32.30)$$

Таким образом, функции R_{nl} удовлетворяют условию нормировки:

$$\int_0^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (32.31)$$

Итак, стационарное состояние движения в сферически-симметричном поле однозначно определяется тремя числами n , l , m , для которых приняты следующие названия:

- n — главное квантовое число,
- l — орбитальное квантовое число,
- m — магнитное квантовое число.

Совокупность состояний, отличающихся друг от друга только значениями m , принято объединять в одно состояние и обозначать его символом (n, l) (иногда вместо n используется какой-либо другой индекс, характеризующий энергию состояния). При этом вместо значений орбитального квантового числа ($l = 0, 1, 2, \dots$) обычно используются буквы латинского алфавита со следующим соответствием:

$$\begin{array}{ccccccc} l = 0, & 1, 2, & 3, 4, & 5, 6, \dots; & & & \\ & s, & p, d, & f, g, & h, i, \dots & & \end{array} \quad (32.32)$$

Например, символ $3d$ обозначает состояние с квантовыми числами $n = 3$, $l = 2$ (точнее, совокупность состояний с $n = 3$, $l = 2$, $m = 0, \pm 1, \pm 2$).

Мы видим, что стационарные состояния в сферически-симметричном поле задаются тремя квантовыми числами (n, l, m) , хотя мы их искали как собственные функции четырех коммутирующих операторов (32.5). Очевидно, это «несоответствие» объясняется тем, что не все четыре интеграла движения независимы.

Действительно, из (32.22) следует, что четность состояния однозначно определяется квадратом момента количества движения, т. е. орбитальным квантовым числом

$$P = (-1)^l. \quad (32.33)$$

В то же время три других интеграла движения (E, \mathbf{L}^2, L_z) образуют полный набор физических величин для данной системы (см. § 4), так как каждой совокупности значений этих величин соответствует одно и только одно линейно независимое состояние. Этот полный набор не является единственным, поскольку наборы (E, \mathbf{L}^2, L_x) , (E, \mathbf{L}^2, L_y) тоже являются полными и не сводятся к набору (E, \mathbf{L}^2, L_z) .

Энергетический спектр системы определяется видом потенциальной энергии $V(r)$. В дальнейшем мы будем в основном рассматривать движение в таких полях, потенциальная энергия в которых ограничена или в начале координат обращается в бесконечность не быстрее, чем $1/r^2$, т. е. $V(r)$ удовлетворяет условию

$$\lim_{r \rightarrow 0} V(r)r^2 = 0. \quad (32.34)$$

Примерами таких полей являются следующие:

1) прямоугольная яма

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{при } 0 \leq r < a, \\ 0 & \text{при } r > a; \end{cases}$$

2) гармонический изотропный осциллятор

$$V(r) = \mu\omega^2 r^2/2;$$

3) кулоновское поле

$$V(r) = -Ze^2/r;$$

4) экранированное кулоновское поле

$$V(r) = -(Ze^2/r)e^{-r/a}, \quad a = \text{const.}$$

Выясним поведение «радиальной» функции $u(r)$ при $r \rightarrow 0$ для таких систем. Уравнение (32.26) принимает вид

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

Легко проверить, что его решениями являются функции

$$u_1(r) = Cr^{l+1}, \quad u_2(r) = Cr^{-l}.$$

Как видно из (32.25) и (32.31), второе решение при $l \geq 1$ не удовлетворяет условию нормировки, так как интеграл расходится на нижнем пределе. Это значит, что соответствующая волновая функция не является квадратично-интегрируемой и не может описывать какое-либо физическое состояние. При $l = 0$ функция $R(r) = u_2(r)/r = C/r$ не приводит к расходимости нормировочного интеграла (32.31), но не удовлетворяет уравнению Шредингера в точке $r = 0$, так как

$$\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r}).$$

Следовательно, решение $u_2(r)$ при любом $l \geq 0$ должно быть отброшено.

Итак, в окрестности начала координат радиальная функция имеет вид

$$u(r) = Cr^{l+1}. \quad (32.35)$$

Отсюда следует, что она удовлетворяет граничному условию

$$u(0) = 0. \quad (32.36)$$

Таким образом,

$$R_{nl}(r) = Cr^l \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0. \quad (32.37)$$

При этом плотность вероятности нахождения частицы в окрестности точки $\mathbf{r} = 0$ есть

$$\rho_{nlm}(\mathbf{r}) = |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 = C^2 r^{2l} |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2, \quad (32.38)$$

т. е. она тем быстрее обращается в нуль в начале координат, чем больше величина момента количества движения в данном состоянии.

В уравнении (32.26) для радиальной функции роль эффективной потенциальной энергии играет величина

$$V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \quad (32.39)$$

графики которой для некоторого $V(r)$ и различных значений l приведены на рис. 9.

Мы видим, что при увеличении l усиливается отталкивание в окрестности центра поля. Именно с этим обстоятельством связано уменьшение вероятности пребывания частицы вблизи центра поля. Член

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

называют «центробежной потенциальной энергией».

§ 33. Стационарные состояния для потенциалов притяжения с быстрым затуханием. Пример: сферически-симметричная прямоугольная потенциальная яма

Большинство встречающихся в природе взаимодействий между частицами описывается потенциалами, абсолютная величина которых достаточно быстро (быстрее, чем $1/r$) уменьшается при $r \rightarrow \infty$ (исключением является кулоновский потенциал и некоторые другие). Кроме того, во многих случаях можно считать, что на некотором расстоянии R взаимодействием можно совсем пренебречь, т. е. положить $V(r) = 0$ при $r > R$. Такие потенциалы называются короткодействующими, а R — радиусом их действия.

Примером быстро затухающего потенциала притяжения является потенциал Вудса – Саксона

$$V(r) = -V_0 \left(1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right) \right)^{-1}, \quad (33.1)$$

где V_0 , R и a — некоторые положительные константы. Этот потенциал широко используется в ядерной физике для описания взаимодействия нейтронов с атомными ядрами. Параметр R определяет размеры области локализации взаимодействия, а параметр a — размеры той области, где происходит наиболее быстрое изменение потенциала. При $a \rightarrow 0$ потенциал (33.1) переходит в потенциал сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямы радиуса R (рис. 10).

Для нахождения стационарных состояний надо решить уравнение (32.26). В общем случае это можно сделать только численно. Исключением являются кулоновский потенциал, потенциалы гармонического осциллятора, прямоугольной ямы (они будут рассмотрены ниже) и некоторые другие. Важной особенностью всех потенциалов, спадающих быстрее, чем $1/r$, является универсальный вид волновой функции при $r \gg R$, поскольку в этой области

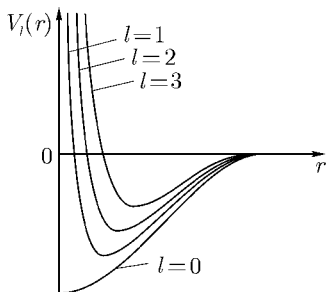


Рис. 9. Эффективная потенциальная энергия $V_l(r)$ частицы в сферически-симметричном потенциальном поле при различных значениях орбитального квантового числа l

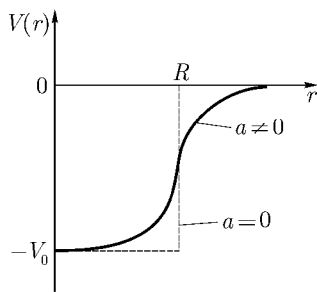


Рис. 10. Потенциал Вудса-Саксона

взаимодействие пренебрежимо мало. Поэтому численное интегрирование уравнения для радиальной части волновой функции достаточно провести только во внутренней области, а затем к найденной функции надо «пришить» стандартный «хвост».

В этом параграфе мы найдем энергии и волновые функции стационарных состояний в сферически-симметричной прямоугольной потенциальной яме, когда в аналитическом виде может быть представлена не только асимптотика волновой функции, но и ее внутренняя часть.

Итак, найдем стационарные состояния движения в поле с потенциальной энергией:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 < 0 & \text{при } 0 \leq r \leq R, \\ 0 & \text{при } r > R. \end{cases} \quad (\text{I})$$

(II)

Пусть $l = 0$. В этом случае уравнение (32.26) для радиальной функции принимает вид:

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) u(r) = 0. \quad (33.2)$$

Ищем его решения, удовлетворяющие требованиям непрерывности, квадратичной интегрируемости, непрерывности производной. В частности, они должны удовлетворять граничному условию (32.36)

$$u(0) = 0.$$

Ищем E в интервале $-V_0 < E \leq 0$. В пространственной области (I) имеем

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + k^2 u(r) = 0,$$

$$u_{(I)}(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr),$$

где

$$k \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu(V_0 - |E|)}. \quad (33.3)$$

Из граничного условия (32.36) получаем $B = 0$, т. е.

$$u_{(I)}(r) = A \sin(kr). \quad (33.4)$$

В пространственной области (II) имеем

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \kappa^2 u(r) = 0,$$

$$u_{(II)}(r) = C e^{\kappa r} + D e^{-\kappa r},$$

где

$$\kappa \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu|E|}. \quad (33.5)$$

Из условия квадратичной интегрируемости функции $u(r)$ получаем $C = 0$, т. е.

$$u_{(II)}(r) = D e^{-\kappa r}. \quad (33.6)$$

Производя сшивание функций $u_{(I)}(r)$ и $u_{(II)}(r)$ в точке $r = R$, приходим к трансцендентному уравнению

$$-k \cdot \operatorname{ctg}(kR) = \kappa, \quad (33.7)$$

которому должна удовлетворять величина k , т. е. энергия системы. Графический анализ этого уравнения был произведен в § 14. Обращаясь к рис. 5, мы видим, что решения уравнения (33.7) существуют только при условии

$$K \geq \pi/2R, \quad K \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu V_0},$$

т. е.

$$V_0 R^2 \geq \hbar^2 \pi^2 / 8\mu. \quad (33.8)$$

Полное количество решений N определяется неравенствами

$$\left(\frac{KR}{\pi} - \frac{1}{2}\right) < N \leq \left(\frac{KR}{\pi} + \frac{1}{2}\right). \quad (33.9)$$

Поскольку в каждом интервале

$$(1 + 2(n - 1))\frac{\pi}{2}R \leq k < (1 + 2n)\frac{\pi}{2}R, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

существует только одно решение уравнения (33.7), все его корни можно перенумеровать в порядке возрастания их величины

$$0 < k_1 < k_2 < \dots < k_N.$$

Каждому корню k_n соответствует значение энергии

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)k_n^2 - V_0 \quad (33.10)$$

и собственная функция

$$u_n(r) = \begin{cases} A_n \sin(k_n r) & \text{при } 0 \leq r \leq R, \\ D_n e^{-\varkappa_n r} & \text{при } r > R, \end{cases} \quad (33.11)$$

где

$$\varkappa_n = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu|E_n|},$$

$$D_n = A_n e^{\varkappa_n R} \sin(k_n R),$$

а константа A_n определяется из условия нормировки

$$\int_0^{\infty} |u_n(r)|^2 dr = 1. \quad (33.12)$$

При этом для собственной функции гамильтониана получаем

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \psi_{n00}(\mathbf{r}) = R_{n0}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{u_n(r)}{\sqrt{4\pi r}}, \quad (33.13)$$

так как $Y_{00}(\theta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$.

При $l = 0$ все решения стационарного уравнения Шредингера сферически-симметричны, и вероятность пребывания частицы

в любой точке пространства зависит только от расстояния до центра поля.

Заметим, что функцию $R_{nl}(r)$ при $l = 0$ можно представить в виде

$$R_{n0}(r) = \begin{cases} B_n j_0(k_n r) & \text{при } 0 \leq r \leq R, \\ C_n h_0^{(1)}(i\kappa_n r) & \text{при } r > R, \end{cases}$$

где $j_0(\rho)$, $h_0^{(1)}(\xi)$ — сферические функции Бесселя и Ханкеля (см. Дополнение 8). Нетрудно проверить, что при $l > 0$ радиальная функция $R_{nl}(r)$ аналогичным образом выражается через сферические функции Бесселя и Ханкеля порядка l :

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} B_{nl} j_l(k_{nl} r) & \text{при } 0 \leq r \leq R, \\ C_{nl} h_l^{(1)}(i\kappa_{nl} r) & \text{при } r > R, \end{cases} \quad (33.14)$$

причем k_{nl} (и κ_{nl}) определяются из условия сшивания в точке $r = R$:

$$\frac{k_{nl} j_l'(k_{nl} R)}{j_l(k_{nl} R)} = \frac{i\kappa_{nl} h_l^{(1)'}(i\kappa_{nl} R)}{h_l^{(1)}(i\kappa_{nl} R)} \quad (33.15)$$

(штрих означает дифференцирование по аргументу).

Решения этого уравнения определяют дискретный спектр гамильтониана. В соответствии с общими свойствами решений уравнения (32.26) каждому собственному значению E_{nl} ($n = 1, 2, \dots, N$) принадлежит только одна радиальная функция $R_{nl}(r)$ и $(2l + 1)$ собственных функций $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ вида (32.28).

Упражнения к лекции 8

8.1. Частица с массой μ находится в s -состоянии в сферически-симметричной прямоугольной потенциальной яме. Получить приближенное выражение для энергии связи частицы, если глубина V_0 и радиус a ямы удовлетворяют соотношению

$$V_0 a^2 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu}.$$

Оценить вероятность пребывания частицы внутри и вне ямы.

8.2. Найти энергии стационарных состояний нейтрона в ядрах ^{16}O и ^{208}Pb , считая, что он движется в сферически-симметричной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками, а радиус ямы равен радиусу ядра

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 = 1,3 \cdot 10^{-13} \text{ см},$$

где A — массовое число ядра.

8.3. Частица с массой μ находится в основном состоянии в сферически-симметричной прямоугольной потенциальной яме с радиусом a и бесконечно высокими стенками. Найти среднеквадратичное расстояние частицы от центра ямы.

8.4. В условиях задачи 8.3 найти импульсное распределение.

8.5. Классифицировать состояния частицы в двумерной аксиально-симметричной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

8.6. Рассмотрим линейное пространство, образованное собственными функциями операторов \hat{L}_z и $\hat{\mathbf{L}}^2$, принадлежащими собственному значению $l = 1$ оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$.

В этом пространстве:

а) найти матрицы операторов $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z, \hat{\mathbf{L}}^2$ в представлении собственных функций операторов \hat{L}_z и $\hat{\mathbf{L}}^2$, воспользовавшись явным видом этих функций и операторов;

б) найти собственные значения и собственные функции оператора \hat{L}_x в представлении собственных функций оператора \hat{L}_z ,

в) найти матрицы операторов

$$\hat{L}_+ = \frac{\hat{L}_x + i\hat{L}_y}{\sqrt{2}}, \quad \hat{L}_- = \frac{\hat{L}_x - i\hat{L}_y}{\sqrt{2}}$$

в представлении собственных функций оператора \hat{L}_z ; выяснить физический смысл этих операторов, воспользовавшись аналогией с операторами \hat{a} и \hat{a}^+ из § 25.

8.7. Частица находится в сферически-симметричном поле в состоянии с $l = 1, l_x = 0$ (l_x — проекция момента количества движения на ось x). Найти распределение проекции момента на ось z .

8.8. Две частицы с массами m_1 и m_2 связаны между собой центральным взаимодействием $V(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$. Показать, что уравнение Шредингера, описывающее эту систему, распадается на два независимых уравнения, одно из которых описывает относительное движение частиц, а другое — движение их центра масс.

ЛЕКЦИЯ 9

§ 34. Представление о «квантовых орбитах»

В классической механике орбитой частицы называется траектория ее движения. В квантовой механике термин «орбита» используется для обозначения стационарного состояния $|nlm\rangle$ движения частицы в сферически-симметричном поле. Каждому энергетическому уровню E_{nl} соответствуют $2l + 1$ «квантовых орбит».

Плотность пространственного распределения частицы, находящейся на орбите $|nlm\rangle$, есть

$$\begin{aligned} \rho_{nlm}(\mathbf{r}, t) &= |\psi_{nlm}(\mathbf{r}, t)|^2 = \left| R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{nl} t} \right|^2 = \\ &= |R_{nl}(r)|^2 (2\pi)^{-1} |\Theta_{lm}(\theta)|^2, \end{aligned} \quad (34.1)$$

т. е. она не зависит от азимутального угла φ (здесь мы использовали формулы (Д7.4) и (Д7.7)). Отсюда видно, что $|R_{nl}(r)|^2$ есть плотность радиального распределения, а $|\Theta_{lm}(\theta)|^2$ — плотность распределения полярного угла частицы, движущейся по орбите $|nlm\rangle$.

Учитывая (32.22), получаем

$$\rho_{nlm}(r, \theta) = \rho_{nlm}(r, \pi - \theta). \quad (34.2)$$

Мы видим, что плотность пространственного распределения симметрична относительно плоскости $\theta = \pi/2$. Кроме того, из (Д7.12) следует, что она не зависит от знака, магнитного квантового числа m :

$$\rho_{nlm}(r, \theta) = \rho_{n,l,-m}(r, \theta). \quad (34.3)$$

Для наглядного представления угловой зависимости этой величины удобно использовать полярные диаграммы

$$\rho_{nlm}(r = \text{const}, \theta) \sim |\Theta_{lm}(\theta)|^2. \quad (34.4)$$