

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

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

Например, в случае $l = 0$ полярная диаграмма представляет собой окружность, а при $l = 1$ имеем

$$|\Theta_{10}(\theta)|^2 \sim \cos^2 \theta; \quad |\Theta_{1,\pm 1}(\theta)|^2 \sim \sin^2 \theta$$

(рис. 11).

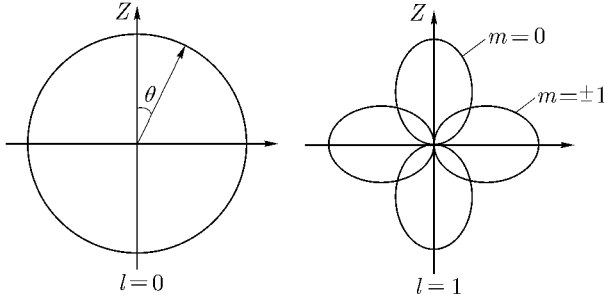


Рис. 11. Полярные диаграммы пространственного распределения частицы в s - и p -состояниях

Теперь найдем плотность тока вероятности (7.5), соответствующего движению частицы по орбите $|nlm\rangle$:

$$\mathbf{j}_{nlm} = (\hbar/2i\mu)(\psi_{nlm}^* \nabla \psi_{nlm} - \psi_{nlm} \nabla \psi_{nlm}^*).$$

В сферической системе координат оператор градиента есть

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

где $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi$ — соответствующие орты. Поскольку функции $R_{nl}(r)$ и $\Theta_{lm}(\theta)$ вещественны, то

$$\mathbf{j}_{nlm}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_\varphi \frac{\hbar m}{\mu} \frac{1}{r \sin \theta} |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2,$$

т. е.

$$\mathbf{j}_{nlm}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_\varphi \frac{\hbar m}{\mu r \sin \theta} \rho_{nlm}(r, \theta). \quad (34.5)$$

Таким образом, плотность тока вероятности не зависит от азимутального угла φ и всегда имеет направление \mathbf{e}_φ . При $m = 0$ имеем $\mathbf{j} = 0$, при $m \neq 0$ абсолютная величина плотности тока не

зависит от знака m , а направление тока при изменении знака m изменяется на противоположное:

$$\mathbf{j}_{nlm}(r, \theta) = -\mathbf{j}_{n,l,-m}(r, \theta). \quad (34.6)$$

Пусть по каждой из $2l+1$ орбит, принадлежащих уровню E_{nl} , движется по одной частице (взаимодействием частиц друг с другом мы пренебрегаем). Тогда плотность пространственного распределения этих частиц есть

$$\sum_{m=-l}^l \rho_{nlm}(r, \theta) = |R_{nl}(r)|^2 \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} |R_{nl}(r)|^2, \quad (34.7)$$

т. е. она изотропна (здесь мы воспользовались формулой (Д7.15)). Используя (34.3), получаем

$$\sum_{m=-l}^l \mathbf{j}_{nlm}(r, \theta) = e\varphi \frac{\hbar m}{\mu r \sin \theta} \sum_{m=-l}^l m \rho_{nlm}(r, \theta) = 0, \quad (34.8)$$

т. е. плотность полного тока вероятности в этом случае равна нулю.

Дополним представление о «квантовых орбитах» рассмотрением импульсного распределения частицы. В общем случае этот вопрос был разобран в § 15. Согласно (15.8) и (15.9) плотность импульсного распределения частицы, находящейся в стационарном состоянии $|nlm\rangle$, не зависит от времени и может быть вычислена по формуле

$$\rho_{nlm}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3} \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \psi_{nlm}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right|^2. \quad (34.9)$$

Мы видим отсюда, что $\rho_{nlm}(\mathbf{p})$ зависит не только от величины, но и от направления импульса, т. е. разные направления импульса \mathbf{p} представлены в состоянии $|nlm\rangle$ с разной вероятностью.

Будем характеризовать вектор \mathbf{p} сферическими координатами:

$$\mathbf{p} = \{p, \theta_p, \varphi_p\}. \quad (34.10)$$

Покажем, что в стационарном состоянии $|nlm\rangle$ плотность импульсного распределения не зависит от азимутального угла φ_p ,

а зависимость от полярного угла θ_p имеет универсальный характер. Для этого удобно воспользоваться разложением экспоненты, стоящей под интегралом в (34.9), по сферическим функциям (см. (Д9.1)):

$$e^{i\mathbf{a}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\lambda\mu} i^\lambda j_\lambda(ar) Y_{\lambda\mu}^*(\theta_a, \varphi_a) Y_{\lambda\mu}(\theta_r, \varphi_r); \quad (34.11)$$

здесь $j_\lambda(x)$ — сферические функции Бесселя, с которыми мы уже встречались в § 33. Подставляя (34.11) в (34.9) и учитывая ортонормированность функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, получаем

$$\begin{aligned} \rho_{nlm}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left| 4\pi (-i)^l Y_{lm}(\theta_p, \varphi_p) \int_0^\infty j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) R_{nl}(r) r^2 dr \right|^2 = \\ &= \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} |\Theta_{lm}(\theta_p)|^2 \left| \int_0^\infty j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) R_{nl}(r) r^2 dr \right|^2. \end{aligned} \quad (34.12)$$

Отсюда видно, что зависимость плотности $\rho_{nlm}(\mathbf{p})$ от абсолютной величины импульса p одна и та же для всех $(2l+1)$ квантовых орбит, соответствующих уровню E_{nl} , и определяется видом радиальной волновой функции $R_{nl}(r)$.

В частном случае, когда $l = 0$, распределение импульса частицы сферически симметрично и вычисляется по формуле

$$\rho_{n00}(p) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \left| \int_0^\infty \frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)} R_{n0}(r) r^2 dr \right|^2; \quad (34.13)$$

здесь мы воспользовались соотношениями $\Theta_{00} = 2^{-\frac{1}{2}}$ (см. (Д7.18)) и $j_0(x) = (\sin x)/x$ (см. (Д8.6)). Разумеется, формулу (34.13) легко получить, и не прибегая к разложению (34.11), а вычисляя интеграл, стоящий в (34.9), по углам непосредственно. Однако если $l \neq 0$, то такое прямое вычисление оказывается очень громоздким и более сложным, нежели использование разложения (34.11).

§ 35. Движение частицы в кулоновском поле (дискретный спектр)

Найдем стационарные состояния дискретного спектра частицы в кулоновском поле с потенциальной энергией:

$$V(r) = -Ze^2/r, \quad Z > 0. \quad (35.1)$$

Ищем решение уравнения (32.26) для радиальной функции $u(r)$ при фиксированном значении l в виде

$$u_l(r) = r^{l+1} e^{-\kappa r} W_l(r), \quad (35.2)$$

где

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu|E|}, \quad (35.3)$$

$W_l(r)$ — некоторый полином. Решением соответствующего уравнения для $W_l(r)$ является вырожденная гипергеометрическая функция:

$$W_l(r) = F \left(-\sqrt{\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 |E|}} + l + 1, 2l + 2, 2\kappa r \right), \quad (35.4)$$

причем квадратичная интегрируемость функции $u_l(r)$ имеет место только в том случае, когда F сводится к полиному конечной степени. Это, в свою очередь, осуществляется тогда и только тогда, когда первый аргумент вырожденной гипергеометрической функции есть целое отрицательное число или ноль:

$$-\sqrt{\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 |E|}} + l + 1 = -n_r, \quad (35.5)$$

где

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (35.6)$$

Отсюда получаем энергетический спектр системы:

$$E_n = -\varepsilon_0 Z^2 / 2n^2, \quad (35.7)$$

где

$$n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots \quad (35.8)$$

для выбранного значения l . Величина

$$\varepsilon_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \sim 27,21 \text{ эВ} \quad (35.9)$$

называется атомной единицей энергии.

Из (35.8) следует, что если фиксировать не l , а n , то l может принимать следующие значения:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (35.10)$$

Квантовое число n может принимать только целые положительные значения:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (35.11)$$

и согласно (35.7) играет роль главного квантового числа.

Радиальные функции, соответствующие паре квантовых чисел n, l , имеют вид

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l e^{-\frac{Z}{na}r} F\left(l + 1 - n, 2l + 2; \frac{2Z}{na}r\right), \quad (35.12)$$

где

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 5.29 \times 10^{-9} \text{ см} \quad (35.13)$$

называется атомной единицей длины. Заметим, что вырожденная гипергеометрическая функция в (35.12) сводится к обобщенному полиному Лагерра (см. Дополнение 10):

$$F\left(l + 1 - n, 2l + 2; \frac{2Z}{na}r\right) = \frac{(2l + 1)!}{(n + l)!} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{na}r\right), \quad (35.14)$$

а нормировочный множитель N_{nl} определяется из условия нормировки (32.31).

Мы видим, что дискретный энергетический спектр частицы в кулоновском поле (35.7) представляет собой систему уровней, сгущающихся к точке $E = 0$, которая дискретному спектру не принадлежит. Энергия каждого стационарного состояния однозначно определяется главным квантовым числом n и не зависит от орбитального квантового числа l .

При данном значении энергии E_n , т.е. при фиксированном значении главного квантового числа n , орбитальное квантовое

Таблица 1. Низшие стационарные состояния в кулоновском поле

n	l	Символ состояния	$R_{nl}(r)$	N_n
1	0	1s	$\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} 2 \exp(-Zr/a)$	1
2	0	2s	$(Z/2a)^{3/2} (2 - Zr/a) \exp(-Zr/2a)$	4
	1	2p	$(Z/2a)^{3/2} (Zr/\sqrt{3}a) \exp(-Zr/2a)$	
3	0	3s	$(Z/3a)^{3/2} 2 \left(1 - \frac{2}{3} \frac{Zr}{a} + \frac{2}{27} \frac{Z^2 r^2}{a^2}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{3a}\right)$	9
	1	3p	$(Z/3a)^{3/2} \frac{8}{9\sqrt{2}} \frac{Zr}{a} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{Zr}{a}\right) \exp(-Zr/3a)$	
	2	3d	$(Z/3a)^{3/2} \frac{4}{27\sqrt{10}} \frac{Z^2 r^2}{a^2} \exp(-Zr/3a)$	

число l принимает n различных значений (35.10), каждому из которых соответствует $2l + 1$ линейно независимых функций

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

Следовательно, помимо вырождения по магнитному квантовому числу m , обязательного для любого сферически-симметричного поля (см. § 32), в кулоновском поле для всех уровней, кроме основного, имеет место дополнительное вырождение по орбитальному квантовому числу l , которое было названо в § 32 «случайным». Нетрудно проверить, что кратность вырождения каждого энергетического уровня есть

$$N_n = n^2. \quad (35.15)$$

В табл. 1 приведены квантовые числа низших стационарных состояний частицы в кулоновском поле и указана кратность вырождения N_n каждого энергетического уровня.

Отметим, что каждому энергетическому уровню, кроме основного, принадлежат состояния как с положительной (l — четное), так и с отрицательной (l — нечетное) четностью.

Рассмотрим линейную комбинацию ψ собственных функций, принадлежащих некоторому энергетическому уровню:

$$\psi = \alpha\psi_{nl} + \beta\psi_{nl'}$$

Пусть при этом четности чисел l и l' противоположны. Функция ψ является собственной функцией, принадлежащей тому же энергетическому уровню, но она не обладает определенной четностью. Поэтому частица, движущаяся в кулоновском поле с некоторым определенным значением энергии, может находиться не только в состояниях с определенной четностью, но и в таких состояниях, в которых четность не имеет определенного значения (исключением является низший энергетический уровень, которому соответствует только четное состояние). Так, например, в состоянии $\psi = (\psi_{2s} + \psi_{2p})/2^{1/2}$ четность не имеет определенного значения. Эта ситуация аналогична той, которая была рассмотрена в § 32 в связи с вырождением по m в произвольном сферически-симметричном поле.

Укажем средние значения $r^{\pm 1}$ и $r^{\pm 2}$ в произвольном стационарном состоянии (nl) :

$$\bar{r} \equiv \langle nl|r|nl \rangle = \frac{a}{2Z}(3n^2 - l(l+1)), \quad (35.16)$$

$$\bar{r}^2 \equiv \langle nl|r^2|nl \rangle = \frac{a^2 n^2}{2Z^2}(5n^2 + 1 - 3l(l+1)), \quad (35.17)$$

$$\bar{r}^{-1} = \frac{Z/a}{n^2}, \quad (9.35.17a)$$

$$\bar{r}^{-2} = \frac{Z^2/a^2}{n^3(l+1/2)}. \quad (9.35.17b)$$

Эти формулы можно получить с помощью соотношений, приведенных в Дополнении 10.

С помощью (35.16) и (35.17) можно найти дисперсию координаты r в произвольном состоянии (nl) :

$$\langle nl|(r - \bar{r})^2|nl \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{a}{Z} \right)^2 \{n^2(n^2 + 2) - l^2(l+1)^2\}. \quad (35.18)$$

Отсюда видно, что при фиксированном n координата r имеет минимальный разброс, если l имеет максимальное возможное значение $l = n - 1$. Такие кулоновские орбиты называются «круговыми».

В заключение отметим, что волновые функции (35.12), вычисленные при произвольном Z , называются водородоподобными. При $Z = 1$ они описывают стационарные состояния атома водорода. Надо помнить (см. упр. 8.8), что в этом случае в уравнение Шредингера, а следовательно и в соотношения (35.9)

и (35.13), входит не масса электрона, а приведенная масса атома водорода

$$\mu = \frac{m_e m_p}{(m_e + m_p)}. \quad (35.19)$$

Поскольку $m_e \ll m_p$, то возникающая при этом поправка к спектру (35.7) и к волновым функциям (35.12) невелика. Однако иногда ее необходимо учитывать (см. упр. 9.8).

§ 36. Трехмерный изотропный гармонический осциллятор

Найдем стационарные состояния движения частицы с массой μ в поле с потенциальной энергией:

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2. \quad (36.1)$$

Ищем решение уравнения (32.26) для радиальной функции $u(r)$ при фиксированном значении l в виде

$$u_l(r) = r^{l+1} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right) W_l(r), \quad (36.2)$$

где

$$r_0 = \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^{1/2}, \quad (36.3)$$

$W_l(r)$ — некоторый полином. Решением соответствующего уравнения для $W_l(r)$ является вырожденная гипергеометрическая функция:

$$W_l(r) = F\left(\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right), l + \frac{3}{2}; \left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right), \quad (36.4)$$

причем квадратичная интегрируемость функции $u_l(r)$ имеет место только в том случае, когда F сводится к полиному конечной степени, т. е. тогда и только тогда, когда первый аргумент вырожденной гипергеометрической функции есть целое отрицательное число или нуль:

$$\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) = -n, \quad (36.5)$$

где

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (36.6)$$

Отсюда получаем энергетический спектр трехмерного изотропно-го гармонического осциллятора:

$$E_{\Lambda} = \hbar\omega(\Lambda + 3/2), \quad (36.7)$$

где

$$\Lambda = 2n + l = l, \quad l + 2, \quad l + 4, \quad \dots \quad (36.8)$$

для выбранного значения l .

Из (36.8) следует, что Λ может принимать только целые неотрицательные значения:

$$\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (36.9)$$

и играет роль главного квантового числа.

Для обозначения стационарных состояний трехмерного гармонического изотропного осциллятора принято использовать вместо пары квантовых чисел (Λ, l) символ $(1/2(\Lambda - l) + 1, l)$: $1s, 1p, 2s, 1d$ и т. д. Комбинация квантовых чисел $1/2(\Lambda - l)$ имеет простой смысл: она указывает, в который раз состояние с данным значением l появляется в этой последовательности. При фиксированном Λ орбитальное квантовое число l может принимать следующие значения:

$$l = \begin{cases} 0, 2, 4, \dots, \Lambda - 2, \Lambda, & \text{если } \Lambda \text{ четное;} \\ 1, 3, 5, \dots, \Lambda - 2, \Lambda, & \text{если } \Lambda \text{ нечетное,} \end{cases} \quad (36.10)$$

причем каждому значению l соответствует одно значение n :

$$n = \frac{1}{2}(\Lambda - l) \quad (36.11)$$

и $2l+1$ значений магнитного квантового числа m . Нетрудно проверить, что кратность вырождения каждого энергетического уровня есть

$$N_{\Lambda} = \frac{1}{2}(\Lambda + 1)(\Lambda + 2). \quad (36.12)$$

Радиальные функции имеют вид

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l e^{-1/2(r/r_0)^2} F\left(-n, l + \frac{3}{2}; \left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right), \quad (36.13)$$

где

$$F\left(-n, l + \frac{3}{2}; \left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right) = \frac{\Gamma(l + 3/2)}{\Gamma(n + l + 3/2)} L_n^{l+1/2}\left(\frac{r^2}{r_0^2}\right), \quad (36.14)$$

Таблица 2. Низшие стационарные состояния трехмерного изотропного гармонического осциллятора.

Λ	n	l	Символ состояния	$R_{nl}(r)$	N_Λ
0	0	0	1s	$\frac{2}{\pi^{1/4} r_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{r^2}{r_0^2}\right)$	1
1	0	1	1p	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4} r_0^{3/2}} r \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{r^2}{r_0^2}\right)$	3
2	1	0	2s	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4} r_0^{3/2}} \left(\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{3}{2}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{r^2}{r_0^2}\right)$	6
	0	2	1d	$\frac{\sqrt{16/15}}{\pi^{1/4} r_0^{3/2}} \frac{r^2}{r_0^2} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{r^2}{r_0^2}\right)$	

$\Gamma(x)$ — гамма-функция, $L_\beta^\alpha(x)$ — обобщенный полином Лагерра, N_{nl} — нормировочный множитель, определяемый условием нормировки (32.31).

В табл. 2 приведены квантовые числа и радиальные функции $R_{nl}(r)$ низших стационарных состояний осциллятора и указана кратность вырождения N_Λ каждого энергетического уровня.

Итак, мы видим, что энергетический спектр трехмерного гармонического изотропного осциллятора представляет собой эквидистантную систему уровней с расстоянием между ними $\hbar\omega$, причем минимальное значение энергии есть $\frac{3}{2}\hbar\omega$. Все уровни с $\Lambda \geq 2$ имеют «случайное вырождение» по орбитальному квантовому числу l , которое обусловлено спецификой взаимодействия. Отметим, что в отличие от движения в кулоновском поле здесь каждое собственному значению гамильтониана принадлежат только такие собственные функции, которые имеют одинаковую четность (см. (36.10)). Поэтому любое стационарное состояние осциллятора обладает определенной четностью, которая однозначно определяется энергией состояния:

$$P = (-1)^\Lambda. \quad (36.15)$$

Теперь рассмотрим задачу о движении гармонического осциллятора в декартовых координатах. Для этого представим по-

тенциальную энергию (36.1) в виде

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) \quad (36.16)$$

и заметим, что при этом гамильтониан системы принимает вид

$$\widehat{H} = \widehat{H}_x(x) + \widehat{H}_y(y) + \widehat{H}_z(z), \quad (36.17)$$

где

$$\widehat{H}_i(x_i) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} x_i^2, \quad (36.18)$$

$$\{x_i\}_1^3 \equiv \{x, y, z\}.$$

Тогда любое решение стационарного уравнения Шредингера

$$\widehat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

представляется в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z), \quad (36.19)$$

причем каждая функция $\psi_i(x_i)$ удовлетворяет одномерному уравнению

$$\widehat{H}_i(x_i)\psi_i(x_i) = E_i\psi_i(x_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (36.20)$$

а

$$E = E_1 + E_2 + E_3. \quad (36.21)$$

Таким образом, в декартовых координатах наша задача сводится к задаче о линейном гармоническом осцилляторе, которая была рассмотрена в § 11. Используя полученные там результаты, имеем

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z), \quad (36.22)$$

где

$$\psi_{n_i}(x_i) = (\sqrt{\pi}2^{n_i}n_i!r_0)^{-1/2}H_{n_i}\left(\frac{x_i}{r_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\frac{x_i^2}{r_0^2}}, \quad (36.23)$$

$$r_0 = \sqrt{\hbar/\mu\omega},$$

$$E_{n_i} = \hbar\omega(n_i + 1/2), \quad n_i = 0, 1, 2, 3, \dots;$$

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \hbar\omega(3/2 + n_x + n_y + n_z).$$

Таким образом, каждое стационарное состояние однозначно определяется тремя квантовыми числами $|n_x, n_y, n_z\rangle$, а его энергия есть

$$E_\Lambda = \hbar\omega\left(\Lambda + \frac{3}{2}\right), \quad (36.24)$$

где

$$\Lambda = n_x + n_y + n_z. \quad (36.25)$$

Мы видим, что каждому энергетическому уровню E_Λ принадлежит столько линейно независимых состояний N_Λ , сколько существует различных троек чисел n_x, n_y, n_z , удовлетворяющих равенству (36.25). Возможные значения этих чисел для $\Lambda = 0, 1, 2$ представлены в табл. 3.

Таблица 3. Низшие стационарные состояния трехмерного изотропного гармонического осциллятора (декартовы координаты).

Λ	0	1	2
n_x	0	1 0 0	2 0 0 1 1 0
n_y	0	0 1 0	0 2 0 1 0 1
n_z	0	0 0 1	0 0 2 0 1 1
N_Λ	1	3	6

Нетрудно проверить, что при любом Λ кратность вырождения N_Λ совпадает с той, которая дается формулой (36.12). Поскольку четность полинома Эрмита $H_n(\xi)$ есть $(-1)^n$, для четности функции $\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$ (см. (36.22)) получаем

$$P = (-1)^{n_x + n_y + n_z} = (-1)^\Lambda,$$

что совпадает с результатом (36.15), полученным при решении задачи в сферических координатах.

Таким образом, мы нашли два полных ортонормированных набора собственных функций гамильтониана трехмерного гармонического изотропного осциллятора:

$$1) \quad \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (36.26)$$

где $R_{nl}(r)$ дается формулой (36.13);

$$2) \quad \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z), \quad (36.27)$$

где $\psi_{n_i}(x_i)$ дается формулой (36.23).

Каждое состояние первого набора (36.26) задается значениями трех физических величин: полной энергии, квадрата момента количества движения и его проекции на ось z . Каждое состояние второго набора (36.27) задается значениями трех квантовых чисел: n_x, n_y, n_z . Эти числа определяют энергию состояния (36.24)

и могут рассматриваться как количества квантов колебаний (фононов) с энергией $\hbar\omega$ вдоль осей x , y , z соответственно. Наборы $|nlm\rangle$ и $|n_x n_y n_z\rangle$ дают эквивалентные описания стационарных состояний трехмерного осциллятора, а переход от одного описания к другому осуществляется с помощью унитарного преобразования (см. § 24).

Упражнения к лекции 9

9.1. Найти импульсное распределение трехмерного гармонического осциллятора, находящегося в состояниях $1p$.

9.2. Найти матрицы преобразования волновых функций стационарных состояний трехмерного гармонического осциллятора соответствующих энергетическим уровням с $\Lambda = 1$ и $\Lambda = 2$ и заданных в представлении $|nlm\rangle$, к представлению $|n_x, n_y, n_z\rangle$. Проверить унитарность найденных матриц.

9.3. Показать, что в представлении волновых функций стационарных состояний трехмерного гармонического осциллятора матричные элементы оператора координаты \hat{r} отличны от нуля только для состояний, соответствующих соседним энергетическим уровням.

9.4. Найти энергетический спектр анизотропного гармонического осциллятора с потенциальной энергией

$$V(r, \theta) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2(1 + \beta P_2(\cos \theta)),$$

где $P_2(\cos \theta)$ — полином Лежандра, β — некоторый вещественный параметр.

Нарисовать схему расположения первых десяти энергетических уровней для значений параметра β в интервале $-1 < \beta < 1$. Указать кратности вырождения всех уровней.

9.5. Выразить гамильтониан трехмерного гармонического осциллятора через операторы рождения и уничтожения квантов колебаний вдоль осей x , y , z .

9.6. Найти импульсное распределение электрона, находящегося в основном состоянии атома водорода.

9.7. Вычислить средний электростатический потенциал, создаваемый в пространстве атомом водорода, находящимся в основном состоянии. То же для иона гелия He^+ .

9.8. Вычислить разность потенциалов ионизации атомов водорода и тяжелого водорода.

9.9. Вычислить потенциал ионизации мезоатома водорода, находящегося в основном состоянии (масса μ^- -мезона превышает массу электрона в 207 раз).

9.10. Оценить зависимость вероятности захвата ядром μ^- -мезона, находящегося в основном состоянии мезоатома, от заряда ядра Ze (захват обусловлен реакцией $\mu^- + p = n + \nu$).

9.11. Согласно классической механике при движении частицы с массой μ и зарядом $(-e)$ в кулоновском поле заряда Ze сохраняется следующая векторная величина:

$$\mathbf{A} = -Ze^2 \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{\mu} [\mathbf{p} \times \mathbf{L}],$$

которая называется вектором Рунге–Ленца. Построить квантово-механический оператор, соответствующий этой физической величине, и показать, что он коммутирует с гамильтонианом системы.

9.12. Определить плотность распределения координаты z трехмерного изотропного гармонического осциллятора, находящегося в каждом из состояний $|nlm\rangle$ с $\Lambda = 1$.

9.13. Вычислить матричные элементы $\langle 2p, m | z | 2s \rangle$. Что можно было бы сказать о результате на основании соображений о размерности?

ЛЕКЦИЯ 10

§ 37. Квантование момента количества движения с помощью перестановочных соотношений

В § 32 мы нашли спектры и общие собственные функции операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z . При этом использовались явные выражения для этих операторов в координатном представлении и решались соответствующие уравнения на собственные значения в пространстве L_2 . Сейчас мы покажем, что эти же результаты можно получить, исходя только из коммутационных соотношений для операторов проекций момента на оси координат:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 e_{ikl} \hat{L}_l. \quad (37.1)$$