ГЛАВА V

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

§ 32. Движение в центрально-симметричном поле

Задача о движении двух взаимодействующих друг с другом частиц в квантовой механике может быть сведена к задаче об одной частице, — аналогично тому, как это может быть сделано в классической механике. Гамильтониан двух частиц (с массами m_1, m_2), взаимодействующих по закону $U(r)$ (r — расстояние между частицами), имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(r), \tag{32,1}$$

где Δ_1, Δ_2 — операторы Лапласа по координатам частиц. Введем вместо радиусов-векторов частиц $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ новые переменные $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \qquad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}; \tag{32,2}$$

$\mathbf{r}$ — вектор взаимного расстояния, а $\mathbf{R}$ — радиус-вектор центра инерции частиц. Простое вычисление приводит к результату:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \tag{32,3}$$

(Δ_R и Δ — операторы Лапласа соответственно по компонентам векторов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$; $m_1 + m_2$ — полная масса системы; $m = m_1m_2/(m_1+m_2)$ — приведенная масса). Таким образом, гамильтониан распадается на сумму двух независимых частей. Соответственно этому, можно искать $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в виде произведения $\varphi(\mathbf{R})\,\psi(\mathbf{r})$, где функция $\varphi(\mathbf{R})$ описывает движение центра инерции (как свободное движение частицы с массой $m_1 + m_2$), а $\psi(\mathbf{r})$ описывает относительное движение частиц (как движение частицы массы m в центрально-симметричном поле $U = U(r)$).

Уравнение Шредингера для движения частицы в центрально-симметричном поле имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0. \tag{32,4}$$

Воспользовавшись известным выражением для оператора Лапласа в сферических координатах, напишем это уравнение в виде

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]+$$
$$+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\psi=0. \qquad (32,5)$$

Если ввести сюда оператор (26,16) квадрата момента, то мы получим [1])

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\psi\right]+U(r)\psi=E\psi. \qquad (32,6)$$

При движении в центрально-симметричном поле момент импульса сохраняется. Будем рассматривать стационарные состояния с определенными значениями момента l и его проекции m. Заданием значений l и m определяется угловая зависимость волновых функций. Соответственно этому, ищем решения уравнения (32,6) в виде

$$\psi=R(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad (32,7)$$

где $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — сферические функции. Поскольку $\hat{\mathbf{l}}^2Y_{lm}=l(l+1)Y_{lm}$, то для «радиальной функции» $R(r)$ получаем уравнение

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]R=0. \qquad (32,8)$$

Это уравнение не содержит вовсе значения $l_z=m$, что соответствует известному уже нам $(2l+1)$-кратному вырождению уровней по направлениям момента.

Займемся исследованием радиальной части волновых функций. Подстановкой

$$R(r)=\frac{\chi(r)}{r} \qquad (32,9)$$

уравнение (32,8) приводится к виду

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi=0. \qquad (32,10)$$

---

[1]) Если ввести оператор радиальной компоненты импульса p_r в виде

$$\hat{p}_r\psi=-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi,$$

то гамильтониан запишется в виде

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_r^2+\frac{\hbar^2\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\right)+U(r),$$

совпадающем по форме с классической функцией Гамильтона в сферических координатах.

Если потенциальная энергия $U(r)$ везде конечна, то должна быть конечной во всем пространстве, включая начало координат, также и волновая функция ψ, а следовательно, и ее радиальная часть $R(r)$. Отсюда следует, что $\chi(r)$ должна обращаться при $r=0$ в нуль:

$$\chi(0) = 0. \tag{32,11}$$

В действительности это условие сохраняется (см. § 35) также и для поля, обращающегося при $r \to 0$ в бесконечность.

Уравнение (32,10) по форме совпадает с уравнением Шредингера для одномерного движения в поле с потенциальной энергией

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}, \tag{32,12}$$

равной сумме энергии $U(r)$ и члена

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = \frac{\hbar^2 \mathbf{l}^2}{2mr^2},$$

который можно назвать центробежной энергией. Таким образом, задача о движении в центрально-симметричном поле сводится к задаче об одномерном движении в области, ограниченной с одной стороны (граничное условие при $r=0$). «Одномерный характер» имеет также и условие нормировки для функций χ, определяющееся интегралом

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr.$$

При одномерном движении в ограниченной с одной стороны области уровни энергии не вырождены (§ 21). Поэтому можно сказать, что заданием значения энергии решение уравнения (32,10), т. е. радиальная часть волновой функции, определяется полностью. Имея также в виду, что угловая часть волновой функции полностью определяется значениями l и m, мы приходим к выводу, что при движении в центрально-симметричном поле волновая функция полностью определяется значениями E, l, m. Другими словами, энергия, квадрат момента и его проекция составляют вместе полный набор физических величин для такого движения.

Сведе́ние задачи о движении в центрально-симметричном поле к одномерному позволяет применить осцилляционную теорему (§ 21). Расположим собственные значения энергии (дискретного спектра) при заданном l в порядке возрастания, перенумеровав их порядковыми номерами n_r, причем наиболее низкому уровню приписывается номер $n_r = 0$. Тогда n_r определяет число узлов радиальной части волновой функции при конечных значениях r (не считая точки $r=0$). Число n_r называют *радиальным квантο-*

вым числом. Число l при движении в центрально-симметричном поле иногда называют *азимутальным квантовым числом*, а m — *магнитным квантовым числом*.

Для обозначения состояний с различными значениями момента l частицы существует общепринятая символика; состояния обозначаются буквами латинского алфавита со следующим соответствием:

$$\begin{matrix} l = 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \ldots \\ s & p & d & f & g & h & i & k & \ldots \end{matrix} \qquad (32,13)$$

Нормальным состоянием при движении частицы в центрально-симметричном поле всегда является s-состояние; действительно, при $l \neq 0$ угловая часть волновой функции во всяком случае имеет узлы, между тем как волновая функция нормального состояния не должна иметь узлов вовсе. Можно также утверждать, что наименьшее возможное при заданном l собственное значение энергии растет с увеличением l. Это следует уже из того, что наличие момента связано с добавлением в гамильтониане существенно положительного члена $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$, растущего с увеличением l.

Определим вид радиальной функции вблизи начала координат. При этом будем считать, что

$$\lim_{r \to 0} U(r) r^2 = 0. \qquad (32,14)$$

Ищем $R(r)$ в виде степенного ряда по r, оставляя при малых r только первый член разложения; другими словами, ищем $R(r)$ в виде $R = \text{const} \cdot r^s$. Подставляя это в уравнение

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) - l(l+1) R = 0,$$

получающееся из (32,8) умножением последнего на r^2 и переходом к $r \to 0$, найдем

$$s(s+1) = l(l+1).$$

Отсюда

$$s = l \text{ или } s = -(l+1).$$

Решение с $s = -(l+1)$ не удовлетворяет необходимым условиям; оно обращается в бесконечность при $r = 0$ (напомним, что $l \geqslant 0$). Таким образом, остается решение с $s = l$, т. е. вблизи начала координат волновые функции состояний с данным l пропорциональны r^l:

$$R_l \approx \text{const} \cdot r^l. \qquad (32,15)$$

Вероятность частице находиться на расстоянии от центра между r и $r+dr$ определяется величиной $r^2|R|^2$ и поэтому пропорциональна $r^{2(l+1)}$. Мы видим, что она тем быстрее обращается в нуль в начале координат, чем больше значение l.

§ 33. Сферические волны

Плоская волна

$$\psi_{\mathbf{p}} = \mathrm{const}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}$$

описывает стационарное состояние, в котором свободная частица обладает определенным импульсом $\mathbf{p}$ (и энергией $E = p^2/2m$). Рассмотрим теперь такие стационарные состояния свободной частицы, в которых она обладает, наряду с энергией, определенными величиной и проекцией момента. Вместо энергии нам будет удобно ввести волновой вектор

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{33,1}$$

Волновая функция состояния с моментом l и его проекцией m имеет вид

$$\psi_{klm} = R_{kl}(r)\,Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{33,2}$$

где радиальная функция определяется уравнением

$$R''_{kl} + \frac{2}{r}R'_{kl} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{kl} = 0 \tag{33,3}$$

(уравнение (32,8) без $U(r)$). Волновые функции ψ_{klm}, относящиеся к непрерывному (по k) спектру, удовлетворяют условиям нормировки и взаимной ортогональности:

$$\int \psi^*_{k'l'm'}\psi_{klm}\,dV = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta\left(\frac{k'-k}{2\pi}\right).$$

Взаимная ортогональность при различных l, l' и m, m' обеспечивается угловыми функциями. Радиальные же функции должны быть нормированы условием

$$\int_0^\infty r^2 R_{k'l}R_{kl}\,dr = \delta\left(\frac{k'-k}{2\pi}\right) = 2\pi\delta(k'-k). \tag{33,4}$$

Если нормировать волновые функции не «по шкале $k/2\pi$», а «по шкале энергии», т. е. условием

$$\int_0^\infty r^2 R_{E'l}R_{El}\,dr = \delta(E'-E),$$