

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

$$\psi_p = \text{const} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} pr}$$

описывает стационарное состояние, в котором свободная частица обладает определенным импульсом 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

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

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

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

где радиальная функция определяется уравнением

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

(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

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

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

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

то, согласно общей формуле (5,14),

$$R_{El} = R_{kl} \left(\frac{1}{2\pi} \frac{dk}{dE} \right)^{1/2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} R_{kl}. \quad (33,5)$$

При $l = 0$ уравнение (33,3) можно написать в виде

$$\frac{d^2}{dr^2} (rR_{k0}) + k^2 r R_{k0} = 0;$$

его решение, конечное при $r = 0$ и нормированное условием (33,4) (ср. (21,9)), есть

$$R_{k0} = 2 \frac{\sin kr}{r}. \quad (33,6)$$

Для решения уравнения (33,3) с $l \neq 0$ делаем подстановку

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl}. \quad (33,7)$$

Для χ_{kl} будем иметь уравнение

$$\chi_{kl}'' + \frac{2(l+1)}{r} \chi_{kl}' + k^2 \chi_{kl} = 0.$$

Если продифференцировать это уравнение по r , то получим

$$\chi_{kl}''' + \frac{2(l+1)}{r} \chi_{kl}'' + \left[k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2} \right] \chi_{kl}' = 0.$$

Подстановкой $\chi_{kl}' = r \chi_{k, l+1}$ оно приводится к виду

$$\chi_{k, l+1}'' + \frac{2(l+2)}{r} \chi_{k, l+1}' + k^2 \chi_{k, l+1} = 0,$$

действительно совпадающему с тем, которому должна удовлетворять функция $\chi_{k, l+1}$. Таким образом, последовательные функции χ_{kl} связаны друг с другом посредством

$$\chi_{k, l+1} = \frac{1}{r} \chi_{kl}', \quad (33,8)$$

а потому

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \chi_{k0},$$

где $\chi_{k0} = R_{k0}$ определяется формулой (33,6) (это выражение может быть, разумеется, умножено еще на произвольную постоянную).

Таким образом, окончательно находим следующее выражение для радиальных функций свободного движения частицы:

$$R_{kl} = (-1)^l \cdot 2 \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{d}{r dr} \right)^l \frac{\sin kr}{r} \quad (33,9)$$

(множитель k^{-l} введен для нормировки — см. ниже; множитель $(-1)^l$ — из соображений удобства). Функции (33,9) могут быть выражены через функции Бесселя полуцелого порядка:

$$R_{kl} = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{l+1/2}(kr) = 2kj_l(kr); \quad (33,10)$$

вводимые в этой связи функции

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x) \quad (33,11)$$

называют сферическими функциями Бесселя ¹⁾.

Для получения асимптотического выражения радиальной функции (33,9) на больших расстояниях замечаем, что член, наименее быстро убывающий с r при $r \rightarrow \infty$, получается при l -кратном дифференцировании синуса. Поскольку каждое дифференцирование, $-d/dr$, синуса прибавляет член $-\pi/2$ в его аргументе, то получаем следующее асимптотическое выражение:

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right). \quad (33,12)$$

Нормировку функций R_{kl} можно производить по их асимптотическим выражениям, как это было объяснено в § 21. Сравнив асимптотическую формулу (33,12) с нормированной функцией R_{k0} (33,6), видим, что функции R_{kl} с выбранным в (33,9) коэффициентом действительно нормированы должным образом.

Вблизи начала координат (малые r) находим, разложив $\sin kr$ в ряд и сохранив только член, дающий после дифференцирований наиболее низкую степень r ²⁾:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r} \approx \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l (-1)^l \frac{(kr)^{2l+1}}{r(2l+1)!} = \frac{(-1)^l k^{2l+1}}{(2l+1)!}.$$

Таким образом, вблизи начала координат функции R_{kl} имеют вид

$$R_{kl} \approx \frac{2k^{l+1}}{(2l+1)!} r^l \quad (33,13)$$

в согласии с общим результатом (32,15).

В некоторых задачах (в теории рассеяния) приходится рассматривать волновые функции, не удовлетворяющие обычным условиям конечности, а соответствующие потоку частиц, вылетаю-

¹⁾ Первые несколько функций j_l :

$$j_0 = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad j_2 = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}.$$

В литературе встречается также определение функций j_l , отличающееся от (33,11) множителем x .

²⁾ Знак !! означает произведение всех чисел одинаковой четности до данного включительно.

щих из центра или, напротив, падающих на него. Волновая функция, описывающая такой поток частиц с моментом $l = 0$; получится, если взять вместо стоячей сферической волны (33,6) решение в виде расходящейся (R_{k0}^+) или сходящейся (R_{k0}^-) сферической волны:

$$R_{k0}^{\pm} = \frac{A}{r} e^{\pm ikr}. \quad (33,14)$$

В общем случае для отличного от нуля момента l получим решение уравнения (33,3) в виде

$$R_{kl}^{\pm} = (-1)^l A \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{e^{\pm ikr}}{r}. \quad (33,15)$$

Эти функции могут быть выражены через функции Ганкеля

$$R_{kl}^{\pm} = \pm iA \sqrt{\frac{k\pi}{2r}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1,2)}(kr) \quad (33,16)$$

(первого и второго рода — соответственно для знаков $+$ и $-$). Асимптотическое выражение функции (33,15)

$$R_{kl}^{\pm} \approx \frac{A}{r} \exp \left[\pm i \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) \right]. \quad (33,17)$$

Вблизи же начала координат она имеет вид

$$R_{kl}^{\pm} \approx A \frac{(2l-1)!!}{k^l} r^{-l-1}. \quad (33,18)$$

Нормируем эти функции так, чтобы они соответствовали испусканию (или поглощению) в единицу времени одной частицы. Для этого заметим, что на больших расстояниях сферическая волна в каждом небольшом участке может рассматриваться как плоская и плотность потока в ней равна $j = v\psi\psi^*$, где $v = k\hbar/m$ — скорость частиц. Нормировка определяется условием $\oint j df = 1$, где интегрирование производится по сферической поверхности большого радиуса r , т. е. $\int jr^2 d\omega = 1$, где $d\omega$ — элемент телесного угла. Оставляя нормировку угловых функций прежней, мы должны, следовательно, положить коэффициент A в радиальной функции равным

$$A = \frac{1}{\sqrt{v}} = \sqrt{\frac{m}{k\hbar}}. \quad (33,19)$$

Асимптотическое выражение, аналогичное (33,12), имеет место не только для радиальной части волновой функции свободного движения, но и при движении (с положительной энергией) в любом поле, достаточно быстро убывающем с расстоянием¹⁾. На

¹⁾ Как будет показано в § 124, поле должно убывать быстрее, чем $1/r$.

больших расстояниях можно пренебречь в уравнении Шредингера как полем, так и центробежной энергией, и остается приближенное уравнение

$$\frac{1}{r} \frac{d^2 (rR_{kl})}{dr^2} + k^2 R_{kl} = 0.$$

Общее решение этого уравнения

$$R_{kl} \approx 2 \frac{\sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)}{r}, \quad (33,20)$$

где δ_l — постоянная (*фазовый сдвиг*), а общий множитель выбран в соответствии с нормировкой волновой функции «по шкале $k/2\pi$ »¹). Постоянная фаза δ_l определяется граничным условием (конечность R_{kl} при $r \rightarrow 0$), при котором должно решаться точное уравнение Шредингера, и не может быть вычислена в общем виде. Фазы δ_l являются, разумеется, функциями как от l , так и от k и представляют собой существенную характеристику собственных функций непрерывного спектра.

Задачи

1. Определить уровни энергии для движения частицы с моментом $l=0$ в сферической прямоугольной потенциальной яме: $U(r) = -U_0$ при $r < a$, $U(r) = 0$ при $r > a$.

Решение. При $l=0$ волновые функции зависят только от r . Внутри ямы уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) + k^2 \psi = 0, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - |E|)}.$$

Решение, конечное при $r=0$,

$$\psi = A \frac{\sin kr}{r}.$$

При $r > a$ имеем уравнение

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) - \kappa^2 \psi = 0, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}.$$

Решение, обращаемое в нуль на бесконечности,

$$\psi = A' \frac{e^{-\kappa r}}{r}.$$

Условие непрерывности логарифмической производной от $r\psi$ при $r=a$ дает

$$k \operatorname{ctg} ka = -\kappa = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - k^2}, \quad (1)$$

¹ Член $-l\pi/2$ в аргументе синуса прибавлен для того, чтобы в отсутствие поля было $\delta_l = 0$. Поскольку общий знак волновой функции несуществен, фазы δ_l определены с точностью до $l\pi$ (а не $2l\pi$); поэтому их значения всегда могут быть приведены к интервалу между 0 и π .

или

$$\sin ka = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2 U_0}} ka. \quad (2)$$

Этим уравнением определяются, неявным образом, искомые уровни энергии (должны быть взяты те корни уравнения, для которых $\operatorname{ctg} ka < 0$, как это следует из (1)). Первый из этих уровней (уровни с $l = 0$) является в то же время самым глубоким из всех вообще уровней энергии, т. е. соответствует нормальному состоянию частицы.

При слишком малой глубине U_0 потенциальной ямы уровни отрицательной энергии вообще отсутствуют, частица не может «удержаться» ямой. Это легко видеть из уравнения (2) с помощью следующего графического построения. Корни уравнения вида $\pm \sin x = \alpha x$ изображаются точками пересечения прямой $y = \alpha x$ кривыми $y = \pm \sin x$, причем мы должны рассматривать только те точки пересечения, в которых $\operatorname{ctg} x < 0$; соответствующие

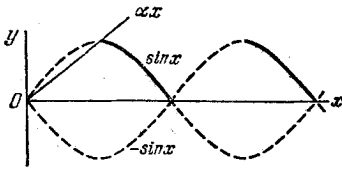


Рис. 9

которой появляется первый отрицательный уровень,

$$U_0 \min = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (3)$$

Эта величина тем больше, чем меньше радиус ямы a . Положение первого уровня E_1 в момент его появления определяется из $ka = \pi/2$ и равно $E_1 = 0$, как и естественно было ожидать. По мере дальнейшего увеличения глубины ямы нормальный уровень E_1 тоже понижается. При малой разности $\Delta = U_0/U_0 \min - 1$ это понижение происходит по закону

$$-E_1 = \frac{\pi^2}{16} U_0 \min \Delta^2. \quad (4)$$

2. Определить порядок расположения уровней энергии с различными значениями момента l в очень глубокой ($U_0 \gg \hbar^2/ma^2$) сферической потенциальной яме (W. Elsasser, 1933).

Решение. Условие на границе ямы требует, при $U_0 \rightarrow \infty$, обращения ψ в нуль (см. § 22). Написав радиальную волновую функцию внутри ямы в виде (33,10), получим уравнение

$$J_{l+1/2}(ka) = 0,$$

корни которого определяют положение уровней над дном ямы ($U_0 - |E| = \hbar^2 k^2/2m$) при различных значениях l . Порядок их расположения, начиная от основного состояния, оказывается следующим:

1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, ...

Цифра перед буквой нумерует в порядке возрастающей последовательности уровни с одинаковым l ¹⁾.

3. Определить последовательность, в которой появляются уровни с различными l по мере возрастания глубины ямы U_0 .

¹⁾ Такое обозначение принято для уровней частиц в ядре (§ 118).

Решение. В момент своего первого появления новый уровень имеет энергию $E = 0$. Соответствующая волновая функция в области вне ямы, обращаясь в нуль при $r \rightarrow \infty$, есть $R_l = \text{const} \cdot r^{-(l+1)}$ (решение уравнения (33,3) с $k = 0$). Из непрерывности R_l и R_l' на границе ямы следует, в частности, непрерывность производной $(r^{l+1}R_l)'$, откуда в данном случае получается следующее условие для волновой функции внутри ямы:

$$(r^{l+1}R_l)' = 0 \text{ при } r = a.$$

Оно эквивалентно ¹⁾ условию обращения в нуль функции R_{l-1} , и, ввиду (33,10), получаем уравнение

$$J_{l-1/2} \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \right) = 0;$$

при $l = 0$ функцию $J_{l-1/2}$ надо заменить на \cos . Отсюда получается следующая последовательность появления новых уровней при увеличении U_0 :

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 3s, 1h, 2f, \dots$$

Отметим, что отличия от порядка расположения уровней в глубокой яме появляются лишь для сравнительно высоких уровней.

4. Определить уровни энергии пространственного осциллятора (частица в поле $U = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$), кратности их вырождения и возможные значения орбитального момента в соответствующих стационарных состояниях.

Решение. Уравнение Шредингера для частицы в поле $U = \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$ допускает разделение переменных, приводящее к трем уравнениям типа линейного осциллятора. Поэтому уровни энергии

$$E = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \equiv \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right).$$

Кратность вырождения n -го уровня равна числу способов, которыми n может быть представлено в виде суммы трех целых неотрицательных чисел ²⁾; оно равно

$$\frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Волновые функции стационарных состояний

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3} = \text{const} \cdot \exp(-\alpha^2 r^2 / 2) H_{n_1}(\alpha x) H_{n_2}(\alpha y) H_{n_3}(\alpha z), \quad (5)$$

где $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ (m — масса частицы). При изменении знака координаты полином H_n умножается на $(-1)^n$. Поэтому четность функции (5) есть $(-1)^{n_1+n_2+n_3} = (-1)^n$. Составляя линейные комбинации этих функций с заданной суммой $n_1 + n_2 + n_3 = n$, можно образовать функции

$$\Psi_{nlm} = \text{const} \cdot r^l \exp(-\alpha^2 r^2 / 2) Y_{lm}(\theta, \varphi) F \left(-\frac{n-l}{2}, l + \frac{3}{2}, \alpha^2 r^2 \right), \quad (6)$$

¹⁾ Согласно (33,7)—(33,8) имеем $(r^{-l}R_l)' \sim r^{-l}R_{l+1}$. Поскольку уравнение (33,3) не меняется при замене l на $-l-1$, имеем также

$$(r^{l+1}R_{-l-1})' \sim r^{l+1}R_{-l}.$$

Наконец, поскольку функции R_{-l} и R_{l-1} удовлетворяют одному и тому же уравнению, получаем окончательно

$$(r^{l+1}R_l)' \sim r^{l+1}R_{l-1},$$

что и использовано в тексте.

²⁾ Другими словами, это есть число способов, которыми n одинаковых шаров могут быть разложены по трем ящикам.

где F — вырожденная гипергеометрическая функция, $|m| = 0, 1, \dots, l$, а l пробегает значения $0, 2, \dots, n$ для четных n и $1, 3, \dots, n$ — для нечетных n ; последнее очевидно из сопоставления четности $(-1)^n$ функций (5) и четности $(-1)^l$ функций (6), которые должны быть одинаковыми. Этим определяются возможные значения орбитального момента, соответствующие рассматриваемым уровням энергии.

Последовательность уровней пространственного осциллятора (в тех же обозначениях, что и в задачах 2, 3), следовательно, такова:

$$(1s), (1p), (1d, 2s), (1f, 2p), (1g, 2d, 3s), \dots,$$

где в скобки заключены взаимно вырожденные состояния ¹⁾.

§ 34. Разложение плоской волны

Рассмотрим свободную частицу, движущуюся с определенным импульсом $p = k\hbar$ в положительном направлении оси z . Волновая функция такой частицы имеет вид

$$\psi = \text{const} \cdot e^{ikz}.$$

Разложим эту функцию по волновым функциям ψ_{klm} свободного движения с определенными моментами. Поскольку в рассматриваемом состоянии энергия имеет определенное значение $E = k^2\hbar^2/2m$, то ясно, что в искомое разложение войдут только функции с тем же k . Далее, поскольку функция e^{ikz} обладает аксиальной симметрией вокруг оси z , то в ее разложение могут войти только функции, не зависящие от угла φ , т. е. функции с $m = 0$. Таким образом, должно быть:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \psi_{kl0} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl} Y_{l0},$$

где a_l — постоянные. Подставив выражения (28,8) и (33,9) для функций Y_{l0} и R_{kl} , получим

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos \theta) \left(\frac{r}{k}\right)^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{kr} \quad (z = r \cos \theta),$$

где C_l — другие постоянные. Эти постоянные удобно определить, сравнив коэффициенты при $(r \cos \theta)^n$ в разложениях обеих сторон равенства по степеням r . В правой стороне равенства такой член имеется только в n -м слагаемом; при $l > n$ разложение радиальной функции начинается с более высоких степеней r , а при $n > l$ полином $P_l(\cos \theta)$ содержит более низкие степени $\cos \theta$. Член с $\cos^l \theta$ в $P_l(\cos \theta)$ имеет коэффициентом $(2l)!/2^l (l!)^2$ (см. форму-

¹⁾ Обратим внимание на взаимное вырождение уровней с различными моментами l ; см. по этому поводу примечание на стр. 160.