существовать лишь конечное число отрицательных уровней энергии [1]). Действительно, при энергии $E = 0$ уравнение Шредингера на больших расстояниях имеет вид (35,1) с общим решением (35,4). Но функция (35,4) не имеет (при $r \neq 0$) нулей; поэтому все нули искомой радиальной волновой функции лежат на конечных расстояниях от начала координат и их число, во всяком случае, конечно. Другими словами, порядковый номер уровня $E = 0$, замыкающего дискретный спектр, конечен.

Если же $\gamma > 1/4$, то дискретный спектр содержит бесконечное число отрицательных уровней энергии. Действительно, волновая функция состояния с $E = 0$ имеет на больших расстояниях вид (35,9) с бесконечным числом нулей, так что ее порядковый номер во всяком случае бесконечен.

Наконец, пусть поле $U = -\beta/r^2$ во всем пространстве. Тогда при $\gamma > 1/4$ происходит падение частицы. Если же $\gamma < 1/4$, то отрицательные уровни энергии отсутствуют вовсе. Действительно, волновая функция состояния с $E = 0$ будет во всем пространстве вида (35,7); она не имеет вовсе нулей на конечных расстояниях, т. е. соответствует наиболее низкому (при данном l) уровню энергии.

§ 36. Движение в кулоновом поле (сферические координаты)

Очень важным случаем движения в центрально-симметричном поле является движение в *кулоновом поле*

$$U = \pm \frac{\alpha}{r}$$

(α — положительная постоянная). Мы будем рассматривать сначала кулоново притяжение, соответственно чему будем писать $U = -\alpha/r$. Из общих соображений заранее очевидно, что спектр отрицательных собственных значений энергии будет дискретным (с бесконечным числом уровней), а спектр положительных энергий — непрерывным.

Уравнение (32,8) для радиальных функций имеет вид

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{\alpha}{r}\right)R = 0. \qquad (36,1)$$

Если речь идет об относительном движении двух притягивающихся частиц, то под m надо подразумевать их приведенную массу.

В вычислениях, связанных с кулоновым полем, удобно пользоваться вместо обычных особыми единицами для измерения всех величин, которые мы будем называть *кулоновыми единицами*.

[1]) Предполагается, что при малых r поле таково, что падения частицы не происходит.

Именно, в качестве единиц измерения массы, длины и времени выберем соответственно

$$m,\quad \frac{\hbar^2}{m\alpha},\quad \frac{\hbar^3}{m\alpha^2}.$$

Все остальные единицы выводятся отсюда; так, единицей энергии будет

$$\frac{m\alpha^2}{\hbar^2}.$$

Ниже в этом и следующем параграфах мы везде (где это не оговорено особо) пользуемся этими единицами [1].

Уравнение (36,1) в новых единицах принимает вид

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R+2\left(E+\frac{1}{r}\right)R=0. \tag{36,2}$$

Дискретный спектр

Введем вместо параметра E и переменной r новые величины:

$$n=\frac{1}{\sqrt{-2E}},\qquad \rho=\frac{2r}{n}. \tag{36,3}$$

При отрицательных энергиях n есть вещественное положительное число. Уравнение (36,2) после подстановки (36,3) приобретает вид

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0 \tag{36,4}$$

(штрихи означают дифференцирование по ρ).

При малых ρ решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности, пропорционально ρ^l (см. (32,15)). Для выяснения асимптотического поведения R при больших ρ опускаем в (36,4) члены с $1/\rho$ и $1/\rho^2$ и получаем уравнение

$$R''=\frac{R}{4},$$

---

[1] Если $m=9{,}11\cdot10^{-28}$ г есть масса электрона, а $\alpha=e^2$ (e — заряд электрона), то кулоновы единицы совпадают с так называемыми *атомными единицами*. Атомная единица длины

$$\hbar^2/me^2=0{,}529\cdot10^{-8}\text{ см}$$

(так называемый *боровский радиус*). Атомная единица энергии равна

$$me^4/\hbar^2=4{,}36\cdot10^{-11}\text{ эрг}=27{,}21\text{ эВ}$$

(половину этой величины называют *ридбергом*, Ry). Атомная единица заряда есть $e=4{,}80\cdot10^{-10}$ эл.-стат. единиц. Переход в формулах к атомным единицам производится, формально, положив $e=1$, $m=1$, $\hbar=1$. При $\alpha=Ze^2$ кулоновы единицы отличаются от атомных.

откуда $R = e^{\pm\rho/2}$. Интересующее нас исчезающее на бесконечности решение, следовательно, при больших ρ ведет себя, как $e^{-\rho/2}$.

Ввиду этого естественно сделать подстановку

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho), \tag{36,5}$$

после чего уравнение (36,4) принимает вид

$$\rho w'' + (2l + 2 - \rho) w' + (n - l - 1) w = 0. \tag{36,6}$$

Решение этого уравнения должно расходиться на бесконечности не быстрее конечной степени ρ, а при $\rho = 0$ должно быть конечным. Удовлетворяющее последнему условию решение есть вырожденная гипергеометрическая функция

$$w = F(-n + l + 1,\ 2l + 2,\ \rho) \tag{36,7}$$

(см. § d математических дополнений) [1]). Решение, удовлетворяющее условию на бесконечности, получится лишь при целых отрицательных (или равном нулю) значениях $(-n + l + 1)$, когда функция (36,7) сводится к полиному степени $(n - l - 1)$. В противном случае она расходится на бесконечности, как e^ρ (см. (d, 14)).

Таким образом, мы приходим к выводу, что число n должно быть целым положительным, причем при данном l должно быть

$$n \geqslant l + 1. \tag{36,8}$$

Вспоминая определение (36,3) параметра n, находим

$$E = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{36,9}$$

Этим решается задача об определении уровней энергии дискретного спектра в кулоновом поле. Мы видим, что имеется бесконечное множество уровней между нормальным уровнем $E_1 = -1/2$ и нулем. Интервалы между каждыми двумя последовательными уровнями уменьшаются с увеличением n; уровни сгущаются по мере приближения к значению $E = 0$, при котором дискретный спектр смыкается с непрерывным. В обычных единицах формула (36,9) имеет следующий вид [2]):

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}. \tag{36,10}$$

Целое число n называется *главным квантовым числом*. Радиальное же квантовое число, определенное в § 32, равно

$$n_r = n - l - 1.$$

---

[1]) Второе решение уравнения (36,6) расходится при $\rho \to 0$, как ρ^{-2l-1}.

[2]) Формула (36,10) была получена впервые *Н. Бором* в 1913 г. до создания квантовой механики. В квантовой механике она была выведена *В. Паули* в 1926 г. матричным методом, а через несколько месяцев — *Шредингером* с помощью волнового уравнения.

При заданном значении главного квантового числа число l может принимать значения

$$l = 0, 1, \ldots, n-1, \tag{36,11}$$

всего n различных значений. В выражение (36,9) для энергии входит только число n. Поэтому все состояния с различными l, но одинаковыми n обладают одинаковой энергией. Таким образом, каждое собственное значение оказывается вырожденным не только по магнитному квантовому числу m (как при всяком движении в центрально-симметричном поле), но и по числу l. Это последнее вырождение (о нем говорят, как о *случайном* или *кулоновом*) специфично именно для кулонова поля. Каждому данному значению l соответствует $2l+1$ различных значений m; поэтому кратность вырождения n-го уровня энергии равна

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2. \tag{36,12}$$

Волновые функции стационарных состояний определяются формулами (36,5), (36,7). Вырожденная гипергеометрическая функция с целыми значениями обоих параметров совпадает, с точностью до множителя, с так называемыми *обобщенными полиномами Лагерра* (см. § d. математических дополнений). Поэтому

$$R_{nl} = \text{const}\cdot\rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho).$$

Радиальные функции должны быть нормированы условием

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2\,dr = 1.$$

Их окончательный вид следующий [1]:

$$R_{nl} = -\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\,e^{-r/n}\left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right) =$$
$$= \frac{2}{n^{l+2}(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}\,(2r)^l e^{-r/n} F\left(-n+l+1,\ 2l+2,\ \frac{2r}{n}\right) \tag{36,13}$$

[1]) Приведем в явном виде несколько первых функций R_{nl}:

$$R_{10} = 2e^{-r},\qquad R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-r/2}\left(1-\frac{r}{2}\right),\qquad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}}e^{-r/2}r,$$

$$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}}e^{-r/3}\left(1-\frac{2}{3}r+\frac{2}{27}r^2\right),$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}e^{-r/3}r\left(1-\frac{r}{6}\right),\qquad R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}e^{-r/3}r^2.$$

(вычисление нормировочного интеграла см. § f, интеграл (f, 6)) [1]).

Вблизи начала координат R_{nl} имеет вид

$$R_{nl} \approx r^l \frac{2^{l+1}}{n^{2+l}(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}. \tag{36,14}$$

На больших расстояниях

$$R_{nl} \approx (-1)^{n-l-1} \frac{2^n}{n^{n+1}\sqrt{(n+l)!\,(n-l-1)!}} r^{n-1}e^{-r/n}. \tag{36,15}$$

Волновая функция R_{10} нормального состояния затухает экспоненциально на расстояниях порядка $r \sim 1$, т. е. в обычных единицах, $r \sim \hbar^2/m\alpha$.

Средние значения различных степеней r вычисляются по формуле

$$\overline{r^k} = \int_0^\infty r^{k+2}R_{nl}^2\,dr.$$

Общая формула для $\overline{r^k}$ может быть получена с помощью формулы (f, 7). Приведем здесь несколько первых величин $\overline{r^k}$ (с положительными и отрицательными k):

$$\begin{aligned} &\bar{r} = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)], && \overline{r^2} = \frac{n^2}{2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)], \\ &\overline{r^{-1}} = \frac{1}{n^2}, && \overline{r^{-2}} = \frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}. \end{aligned} \tag{36,16}$$

Непрерывный спектр

Спектр положительных собственных значений энергии непрерывен и простирается от нуля до бесконечности. Каждое из этих собственных значений вырождено с бесконечной кратностью; каждому значению E соответствует бесконечное множество состояний с l, пробегающими все целые значения от 0 до ∞ (и со всеми возможными, при данных l, значениями m).

Определяемое формулами (36,3) число n и переменная ρ теперь чисто мнимы:

$$n = -\frac{i}{\sqrt{2E}} = -\frac{i}{k}, \qquad \rho = 2ikr, \tag{36,17}$$

---

[1]) Нормировочный интеграл можно вычислить также, подставляя выражение (d, 13) для полиномов Лагерра и интегрируя по частям (подобно тому как вычислен интеграл (c, 8) для полиномов Лежандра).

где $k = \sqrt{2E}$ [1]). Радиальные собственные функции непрерывного спектра имеют вид

$$R_{kl} = \frac{C_{kl}}{(2l+1)!}(2kr)^l e^{-ikr} F\left(\frac{i}{k} + l + 1,\ 2l+2,\ 2ikr\right), \tag{36,18}$$

где C_{kl} — нормировочный множитель. Они могут быть представлены в виде комплексного интеграла (см. § d)

$$R_{kl} = C_{kl}(2kr)^l e^{-ikr}\frac{1}{2\pi i}\oint e^{\xi}\left(1 - \frac{2ikr}{\xi}\right)^{-\frac{i}{k}-l-1}\xi^{-2l-2}\,d\xi, \tag{36,19}$$

который берется по контуру, изображенному на рис. 10 [2]). Подстановкой $\xi = 2ikr\,(t + 1/2)$ этот интеграл приводится к более симметричному виду

$$R_{kl} = C_{kl}\frac{(-2kr)^{-l-1}}{2\pi}\oint e^{2ikrt}\left(t + \frac{1}{2}\right)^{\frac{i}{k}-l-1}\left(t - \frac{1}{2}\right)^{-\frac{i}{k}-l-1}dt \tag{36,20}$$

(путь интегрирования обходит в положительном направлении точки $t = \pm 1/2$). Из этого выражения непосредственно видно, что функции R_{kl} вещественны.

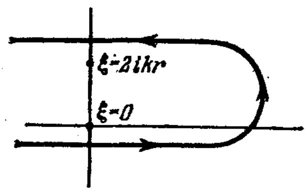

Рис. 10

Асимптотическое разложение (d, 14) вырожденной гипергеометрической функции позволяет непосредственно получить такое же разложение для волновой функции R_{kl}. Два члена в (d, 14) приводят в функции R_{kl} к двум комплексно сопряженным выражениям, и в результате получается

$$R_{kl} = C_{kl}\frac{e^{-\pi/2k}}{kr}\times$$

$$\times \operatorname{Re}\left\{\frac{e^{-i\left[kr - \frac{\pi}{2}(l+1) + \frac{1}{k}\ln 2kr\right]}}{\Gamma\left(l + 1 - \frac{i}{k}\right)}G\left(l + 1 + \frac{i}{k},\ \frac{i}{k} - l,\ -2ikr\right)\right\}. \tag{36,21}$$

---

[1]) Можно было бы определить n и ρ и комплексно сопряженными выражениями $n = i/k$, $\rho = -2ikr$; вещественные функции R_{kl} от способа определения n и ρ, конечно, не зависят.

[2]) Вместо этого контура можно воспользоваться также любой замкнутой петлей, обходящей особые точки $\xi = 0$ и $\xi = 2ikr$ в положительном направлении. При целом l функция $V(\xi) = \xi^{-n-l}(\xi - 2ikr)^{n-l}$ (см. § d) возвращается к исходному значению при обходе вдоль такого контура.

Если нормировать волновые функции «по шкале $k/2\pi$» (т. е. условием (33,4)), то нормировочный коэффициент C_{kl} равен

$$C_{kl} = 2ke^{\pi/2k}\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\right|. \tag{36,22}$$

Действительно, асимптотическое выражение R_{kl} при больших r (первый член разложения (36,21)) тогда имеет вид

$$\begin{gathered} R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr+\frac{1}{k}\ln 2kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right), \\ \delta_l = \arg\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right) \end{gathered} \tag{36,23}$$

в согласии с общим видом (33,20) нормированных волновых функций непрерывного спектра в центрально-симметричном поле. Выражение (36,23) отличается от (33,20) наличием логарифмического члена в аргументе у синуса; поскольку, однако, $\ln r$ растет при увеличении r медленно по сравнению с самим r, то при вычислении нормировочного интеграла, расходящегося на бесконечности, наличие этого члена несущественно.

Модуль Г-функции, входящий в выражение (36,22) для нормировочного множителя, может быть выражен через элементарные функции. Воспользовавшись известными свойствами Г-функций

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \qquad \Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin\pi z},$$

имеем

$$\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right) = \left(l+\frac{i}{k}\right)\cdots\left(1+\frac{i}{k}\right)\frac{i}{k}\Gamma\left(\frac{i}{k}\right),$$

$$\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right) = \left(l-\frac{i}{k}\right)\cdots\left(1-\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)$$

и далее

$$\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\right| = \left[\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)\right]^{1/2} =$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{k}}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}}\,\mathrm{sh}^{-1/2}\frac{\pi}{k}.$$

Таким образом,

$$C_{kl} = \left[\frac{8\pi k}{1-e^{-2\pi/k}}\right]^{1/2}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}} \tag{36,24}$$

(при $l = 0$ произведение заменяется на 1).

Предельным переходом $k \to 0$ можно получить радиальную функцию для особого случая равной нулю энергии. При $k \to 0$

$$F\left(\frac{i}{k}+l+1,\ 2l+2,\ 2ikr\right) \to F\left(\frac{i}{k},\ 2l+2,\ 2ikr\right) =$$
$$= 1 - \frac{2r}{(2l+2)\,1!} + \frac{(2r)^2}{(2l+2)(2l+3)\,2!} - \ldots =$$
$$= (2l+1)!\,(2r)^{-l-1/2} J_{2l+1}\left(\sqrt{8r}\right),$$

где J_{2l+1} — функция Бесселя. Коэффициенты C_{kl} (36,24) при $k \to 0$ сводятся к

$$C_{kl} \approx \sqrt{8\pi}\, k^{-l+1/2}.$$

Отсюда находим

$$\left.\frac{R_{kl}}{\sqrt{k}}\right|_{k\to 0} = \sqrt{\frac{4\pi}{r}}\, J_{2l+1}\left(\sqrt{8r}\right). \tag{36,25}$$

Асимптотический вид этой функции при больших r [1])

$$\left.\frac{R_{kl}}{\sqrt{k}}\right|_{k\to 0} = \left(\frac{8}{r^3}\right)^{1/4} \sin\left(\sqrt{8r} - l\pi - \frac{\pi}{4}\right). \tag{36,26}$$

Множитель $\sqrt{k}$ исчезает при переходе к нормировке «по шкале энергии», т. е. от функций R_{kl} к функции R_{El} согласно (33,5); именно функция R_{El} остается конечной в пределе $E \to 0$.

В кулоновом поле отталкивания ($U = \alpha/r$) имеется только непрерывный спектр положительных собственных значений энергии. Уравнение Шредингера в этом поле может быть формально получено из уравнения для поля притяжения изменением знака у r. Поэтому волновые функции стационарных состояний получаются непосредственно из (36,18) посредством этой же замены. Нормировочный коэффициент снова определяется по асимптотическому выражению и в результате получается

$$R_{kl} = \frac{C_{kl}}{(2l+1)!}(2kr)^l e^{ikr} F\left(\frac{i}{k}+l+1,\ 2l+2,\ -2ikr\right),$$
$$C_{kl} = 2ke^{-\pi/2k}\left|\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)\right| = \left(\frac{8\pi k}{e^{2\pi/k}-1}\right)^{1/2} \prod_{s=1}^{l} \sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}}. \tag{36,27}$$

---

[1]) Отметим, что эта функция соответствует квазиклассическому приближению (§ 49), примененному к движению в области $(l+1/2)^2 \ll r \ll k^{-2}$.

Асимптотическое выражение этой функции при больших r имеет вид

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{1}{k}\ln 2kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \qquad \delta_l = \arg\Gamma\left(l + 1 + \frac{i}{k}\right). \tag{36,28}$$

Природа кулонова вырождения

При классическом движении частицы в кулоновом поле имеет место специфический для этого поля закон сохранения; в случае поля притяжения

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} - [\mathbf{p}\mathbf{l}] = \mathrm{const} \tag{36,29}$$

(см. I, § 15). В квантовой механике этой величине отвечает оператор

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{l}}] - [\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{p}}]) \tag{36,30}$$

коммутативный, как легко проверить, с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2 - 1/r$.

Прямое вычисление приводит к следующим правилам коммутации для операторов $\hat{A}_i$ друг с другом и с операторами момента:

$$\{\hat{l}_i, \hat{A}_k\} = ie_{ikl}\hat{A}_l, \qquad \{\hat{A}_i, \hat{A}_k\} = -2i\hat{H}e_{ikl}\hat{l}_l. \tag{36,31}$$

Некоммутативность операторов $\hat{A}_i$ друг с другом означает, что величины A_x, A_y, A_z не могут иметь в квантовой механике одновременно определенных значений. Каждый из этих операторов, скажем $\hat{A}_z$, коммутативен с такой же компонентой момента $\hat{l}_z$, но некоммутативен с оператором квадрата момента $\hat{\mathbf{l}}^2$. Наличие новой сохраняющейся величины, не измеримой одновременно с другими сохраняющимися величинами, приводит (§ 10) к дополнительному вырождению уровней, — это и есть специфическое для кулонова поля «случайное» вырождение дискретных уровней энергии.

Происхождение этого вырождения можно сформулировать также и в терминах той повышенной симметрии (по сравнению с симметрией по отношению к пространственным вращениям), которой обладает кулонова задача в квантовой механике (*В. А. Фок*, 1935).

Для этого замечаем, что для состояний дискретного спектра с фиксированной отрицательной энергией можно заменить $\hat{H}$ в правой стороне последнего соотношения (36,31) на E и ввести вместо $\hat{A}_i$ операторы $\hat{u}_i = \hat{A}_i/\sqrt{-2E}$. Для них правила коммутации принимают вид

$$\{\hat{l}_i, \hat{u}_k\} = ie_{ikl}\hat{u}_l, \qquad \{\hat{u}_i, \hat{u}_k\} = ie_{ikl}\hat{l}_l. \tag{36,32}$$

Вместе с правилом $\{\hat{l}_i, \hat{l}_k\} = ie_{ikl}\hat{l}_l$ эти соотношения формально совпадают с правилами коммутации операторов бесконечно малых поворотов в четырехмерном евклидовом пространстве [1]). Это и есть симметрия кулоновой задачи в квантовой механике [2]).

Из соотношений коммутации (36,32) можно снова получить выражение для уровней энергии в кулоновом поле [3]). Перепишем их, введя вместо $\hat{\mathbf{l}}$ и $\hat{\mathbf{u}}$ операторы

$$\hat{\mathbf{j}}_1 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{u}}), \qquad \hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{l}} - \hat{\mathbf{u}}). \tag{36,33}$$

Для них имеем

$$\{\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{1k}\} = ie_{ikl}\hat{j}_{1l}, \qquad \{\hat{j}_{2i}, \hat{j}_{2k}\} = ie_{ikl}\hat{j}_{2l}, \qquad \{\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{2k}\} = 0. \tag{36,34}$$

Эти правила формально совпадают с правилами коммутации двух независимых векторов трехмерного момента импульса. Поэтому собственные значения каждого из квадратов $\mathbf{j}_1^2$ и $\mathbf{j}_2^2$ равны $j_1(j_1 + 1)$ и $j_2(j_2 + 1)$, где $j_1, j_2 = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ [4]). С другой стороны, по определению операторов $\hat{\mathbf{u}}$ и $\hat{\mathbf{l}} = [\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}]$, находим после простого вычисления:

$$\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}}\hat{\mathbf{l}} = 0,$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{u}}^2 = -1 - \frac{1}{2E}$$

(при вычислении суммы $\hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{u}}^2$ снова заменено $\hat{H}$ на E). Отсюда

$$\mathbf{j}_1^2 = \mathbf{j}_2^2 = -\frac{1}{4}\left(1 + \frac{1}{2E}\right) = j(j+1)$$

(где $j \equiv j_1 = j_2$) и затем $E = -1/2(2j + 1)^2$. Обозначив

$$2j + 1 = n, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{36,35}$$

---

[1]) При этом $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$ играют роль операторов бесконечно малых поворотов в плоскостях yz, xz, xy четырехмерной декартовой системы координат x, y, z, u, а $\hat{u}_x$, $\hat{u}_y$, $\hat{u}_z$ — роль операторов бесконечно малых поворотов в плоскостях xu, yu, zu.

[2]) В явном виде эта симметрия проявляется в волновых функциях в импульсном представлении: см. *В. А. Фок*, Изв. АН СССР, серия физ., № 2, стр. 169 (1935); Zs. f. Physik 98, 145 (1935).

[3]) Этот вывод в основном совпадает с выводом *Паули* (1926).

[4]) Здесь мы несколько забегаем вперед и используем свойства момента, о которых будет идти речь в § 54 (возможность существования целых и полуцелых значений j).

приходим к требуемому результату $E = -1/2n^2$. Кратность вырождения уровней равна, как и следовало: $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = (2j + 1)^2 = n^2$. Наконец, поскольку $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$, то при заданном $j_1 = j_2 = (n-1)/2$ орбитальный момент l пробегает значения от 0 до $2j = n - 1$ [1]).

Задачи

1. Определить распределение вероятностей различных значений импульса в основном состоянии атома водорода.

Решение[2]). Волновая функция основного состояния

$$\psi = R_{10}Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}.$$

Волновая функция этого же состояния в $\mathbf{p}$-представлении получается отсюда как интеграл

$$a(\mathbf{p}) = \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{pr}}\, dV$$

(см. (15,10)). Интеграл вычисляется путем перехода к сферическим координатам с полярной осью вдоль $\mathbf{p}$; в результате получаем

$$a(\mathbf{p}) = \frac{8\sqrt{\pi}}{(1+p^2)^2},$$

а плотность вероятности в $\mathbf{p}$-пространстве есть $|a(\mathbf{p})|^2/(2\pi)^3$.

2. Определить средний потенциал поля, создаваемого ядром и электроном в основном состоянии атома водорода.

Решение. Средний потенциал φ_e, создаваемый «электронным облаком» в произвольной точке $\mathbf{r}$, проще всего определяется как сферически-симметричное

---

[1]) «Случайное» вырождение уровней с различными значениями момента l имеет место также и для движения в центрально-симметричном поле $U = m\omega^2r^2/2$ (пространственный осциллятор, см. задачу 4 § 33). Это вырождение тоже связано с дополнительной симметрией гамильтониана. В данном случае эта симметрия возникает в результате того, что в $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + m\omega^2\mathbf{r}^2/2$ как операторы $\hat{p}_i$, так и координаты x_i входят в виде суммы квадратов. Введя вместо них операторы

$$\hat{a}_i = \frac{m\omega x_i + i\hat{p}_i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \qquad \hat{a}_i^+ = \frac{m\omega x_i - i\hat{p}_i}{\sqrt{2m\hbar\omega}},$$

получим

$$\hat{H} = \hbar\omega\left[\hat{\mathbf{a}}^+\hat{\mathbf{a}} + \frac{3}{2}\right].$$

Это выражение инвариантно по отношению к любым унитарным преобразованиям операторов $\hat{a}_i^+$ и $\hat{a}_i$, составляющим совокупность (группу) более широкую, чем группа трехмерных вращений (по отношению к которой инвариантен гамильтониан частицы во всяком центрально-симметричном поле).

Отметим также, что специфике кулонова и осцилляторного полей в квантовой механике (наличие случайного вырождения) отвечает в классической механике специфика, состоящая в существовании в этих (и только в этих) полях замкнутых траекторий частиц.

[2]) В задачах 1 и 2 пользуемся атомными единицами.

решение уравнения Пуассона с плотностью заряда $\rho = -|\psi|^2$:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e) = 4e^{-2r}.$$

Интегрируя это уравнение, выбирая постоянные так, чтобы $\varphi_e(0)$ было конечным, а $\varphi_e(\infty) = 0$ и прибавляя потенциал поля ядра, получим

$$\varphi = \frac{1}{r} + \varphi_e(r) = \left(\frac{1}{r} + 1\right)e^{-2r}.$$

При $r \ll 1$ имеем $\varphi \approx 1/r$ (поле ядра), а при $r \gg 1$ потенциал $\varphi \approx e^{-2r}$ (экранирование ядра электроном).

3. Определить уровни энергии частицы, движущейся в центрально-симметричном поле с потенциальной энергией $U = A/r^2 - B/r$ (рис. 11).

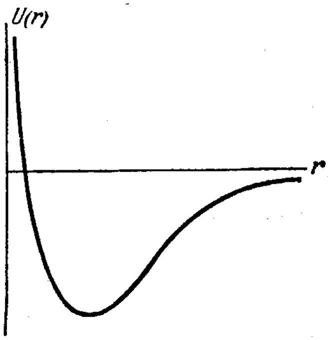

Рис. 11

Решение. Спектр положительных энергий непрерывен, а отрицательных — дискретен; рассматриваем последний. Уравнение Шредингера для радиальной функции:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)\frac{1}{r^2} - \frac{A}{r^2} + \frac{B}{r}\right)R = 0. \quad (1)$$

Вводим новую переменную

$$\rho = \frac{2\sqrt{-2mE}}{\hbar}r$$

и обозначения

$$\frac{2mA}{\hbar^2} + l(l+1) = s(s+1), \quad (2)$$

$$\frac{B}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{-2E}} = n. \quad (3)$$

Тогда уравнение (1) приобретает вид

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{s(s+1)}{\rho^2}\right)R = 0,$$

формально совпадающий с (36,4). Поэтому сразу заключаем, что удовлетворяющее необходимым условиям решение есть

$$R = \rho^s e^{-\rho/2}F(-n+s+1,\ 2s+2,\ \rho),$$

причем $n - s - 1 = p$ должно быть целым положительным числом (или нулем), а под s надо понимать положительный корень уравнения (2). Согласно определению (3) получаем, следовательно, уровни энергии

$$-E_p = \frac{2B^2m}{\hbar^2}\left[2p + 1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}}\right]^{-2}.$$

4. То же при $U = \frac{A}{r^2} + Br^2$ (рис. 12).

Решение. Имеется только дискретный спектр. Уравнение Шредингера будет следующим:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}-\frac{A}{r^2}-Br^2\right)R=0.$$

Вводя переменную

$$\xi=\frac{\sqrt{2mB}}{\hbar}r^2$$

и обозначения

$$l(l+1)+\frac{2mA}{\hbar^2}=2s(2s+1),$$

$$\sqrt{\frac{2m}{B}}\frac{E}{\hbar}=4(n+s)+3,$$

получаем уравнение

$$\xi R''+\frac{3}{2}R'+\left[n+s+\frac{3}{4}-\frac{\xi}{4}-\frac{s\left(s+\frac{1}{2}\right)}{\xi}\right]R=0.$$

Искомое решение ведет себя при $\xi\to\infty$ асимптотически, как $e^{-\xi/2}$, а при малых ξ пропорционально ξ^s, где под s надо понимать положительное значение

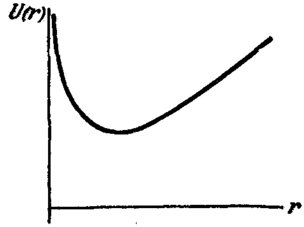

Рис. 12

$$s=\frac{1}{4}\left[-1+\sqrt{(2l+1)^2+\frac{8mA}{\hbar^2}}\right].$$

Поэтому ищем решение в виде

$$R=e^{-\xi/2}\xi^s w$$

и получаем для w уравнение

$$\xi w''+\left(2s+\frac{3}{2}-\xi\right)w'+nw=0,$$

откуда

$$w=F\left(-n,\ 2s+\frac{3}{2},\ \xi\right),$$

причем n должно быть целым неотрицательным числом. Для уровней энергии получаем, следовательно, бесконечное множество равноотстоящих значений

$$E_n=\hbar\sqrt{\frac{B}{2m}}\left[4n+2+\sqrt{(2l+1)^2+\frac{8mA}{\hbar^2}}\right],\qquad n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

§ 37. Движение в кулоновом поле (параболические координаты)

Разделение переменных в уравнении Шредингера, написанном в сферических координатах, всегда возможно для движения в любом центрально-симметричном поле. В случае кулонова поля разделение переменных оказывается возможным также и в так называемых *параболических* координатах. Решение задачи о движении в кулоновом поле в параболических координатах полезно