наклона прямой равен $2/\pi$. Следовательно, минимальная потенциальная энергия $U_{0\,\text{мин}}$, при которой существует связанное состояние частицы в сферической яме, определится условием

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_{0\,\text{мин}}a^2}}=\frac{2}{\pi},$$

откуда

$$U_{0\,\text{мин}}=\frac{\pi^2}{8}\frac{\hbar^2}{ma^2}. \tag{37,9}$$

Первый уровень энергии в потенциальной яме минимальной глубины $U_{0\,\text{мин}}$ мы найдем из условия

$$\varkappa a=\frac{\pi}{2}$$

или

$$\sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(U_{0\,\text{мин}}-|E_1|)}=\frac{\pi}{2}.$$

Учитывая значение $U_{0\,\text{мин}}$, находим, что $E_1=0$, т. е. энергия частицы на первом уровне равна нулю, никаких других уровней в яме не имеется. С увеличением глубины ямы энергия первого уровня также понижается и становится отрицательной. На графике это соответствует уменьшению угла наклона прямой к оси абсцисс. При некотором угле наклона помимо корня, соответствующего первому уровню, появится и второй корень. Последний отвечает появлению в яме второго уровня энергии. С увеличением глубины ямы число точек пересечения на графике возрастает, что отвечает увеличению числа уровней энергии у частицы в потенциальной яме.

В заключение подчеркнем, что отсутствие связанных состояний частицы в потенциальной яме глубиной $U_0<U_{0\,\text{мин}}$ представляет специфический квантовомеханический эффект, не имеющий аналога в классической физике. Действительно, как бы ни была мала глубина ямы в классической физике, частица, попавшая в яму с начальной кинетической энергией, меньшей глубины ямы, будет удерживаться в ней как угодно долго. В квантовой механике это положение в общем случае не имеет места.

## § 38. Движение в кулоновском поле

Как мы уже указывали, важнейшим примером движения частицы в поле с центральной симметрией является движение электрона в кулоновском поле атомного ядра. Простейшую атомную систему такого рода, состоящую из ядра и одного электрона, представляет атом водорода, а также ион любого атома, в котором остался только один электрон. Другим примером может служить атом мезоводорода, состоящий из протона и отрицательно заряженного мезона.

Задача движения двух тел, ядра и электрона, сводится к задаче движения одной частицы с приведенной массой $\mu$ в кулоновском поле (см. § 14).

Совершенно ясно, что теория атома водорода и водородоподобных систем чрезвычайно важна, поскольку эти системы являются простейшими атомными системами. Кроме того, оказывается, что в случае движения частицы в кулоновском поле ядра можно получить полное аналитическое решение уравнения Шредингера. Это позволяет наглядно проследить за проявлением общих квантовомеханических закономерностей в атомных системах.

Потенциальная энергия электрона, движущегося в поле ядра с зарядом $Ze$, дается формулой

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \tag{38,1}$$

Выпишем уравнение Шредингера для радиальной волновой функции (35,8):

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)R = 0. \tag{38,2}$$

Мы будем первоначально интересоваться состояниями, принадлежащими дискретному энергетическому спектру. В соответствии с выводами § 16 эти состояния отвечают финитному движению электрона и, следовательно, их энергия отрицательна $E < 0$ (см. § 35).

При решении уравнения (38,2) удобно перейти к безразмерным величинам. Это сделает все формулы менее громоздкими.

В качестве основных величин выберем заряд электрона $e$, его приведеную массу $\mu$ и постоянную Планка $\hbar$. Из этих величин можно составить комбинацию, имеющую размерность длины

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}. \tag{38,3}$$

Как мы увидим ниже, эта длина является характерным атомным размером. Если положить приведенную массу $\mu$ равной массе электрона $m$, то $a = 0{,}529 \cdot 10^{-8}$ *см.*

Система единиц, в основу которой положены величины $e$, $\mu$ и $a$, называется кулоновой системой.

Единицей скорости будет служить величина $e^2/\hbar$, равная $^1/_{137}$ скорости света, единицей энергии — величина, равная

$$E_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a}. \tag{38,4}$$

При $\mu = m$ $E_0 = 4{,}30\cdot 10^{-11}$ *эрг* $= 27{,}07$ *эв*. Введем в уравнение (38,2) безразмерную переменную $\rho$ и энергию $\varepsilon$

$$\rho = \frac{r}{a}, \quad \varepsilon = -\frac{E}{E_0}. \tag{38,5}$$

Тогда это уравнение перепишется в виде

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(-2\varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho}\right)R = 0. \tag{38,6}$$

На малых расстояниях функция $R$ ведет себя, согласно (35,21), как $\rho^l$. На больших расстояниях эта функция имеет вид $R \sim e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho}$ (см. (35,29)). В соответствии с этим будем пытаться искать решение уравнения (38,6) в виде

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\beta\rho} v(\rho), \tag{38,7}$$

где $\beta = \sqrt{2\varepsilon}$. Подставляем выражение (38,7) в (38,6), после простых вычислений получаем

$$\rho\frac{d^2v}{d\rho^2} + 2\frac{dv}{d\rho}(l - \beta\rho + 1) + 2v(Z - \beta - \beta l) = 0. \tag{38,8}$$

Введем новую переменную

$$\xi = 2\beta\rho. \tag{38,9}$$

Обозначая штрихом дифференцирование по этой новой переменной, имеем

$$\xi v'' + v'(2l + 2 - \xi) + v\left(\frac{Z}{\beta} - l - 1\right) = 0. \tag{38,10}$$

Радиальная волновая функция $R$ должна оставаться конечной во всей области изменения переменной $\xi$ как при $\xi \to \infty$, так и при $\xi \to 0$.

Решение уравнения (38,10) ищем в виде ряда

$$v(\xi) = \sum_{k=0} a_k \xi^k. \tag{38,11}$$

Подставляя (38,11) в уравнение (38,10) и собирая члены при одинаковых степенях $\xi$, получаем

$$\sum_k \xi^k\left[(k+1)(2l+2+k)a_{k+1} + \left(\frac{Z}{\beta} - l - 1 - k\right)a_k\right] = 0. \tag{38,12}$$

Равенство (38,12) будет выполняться при произвольных значениях $\xi$, если равны нулю коэффициенты при всех степенях $\xi$. Приравнивая поэтому квадратную скобку нулю, приходим к следующей рекуррентной формуле:

$$a_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \frac{Z}{\beta}}{(k+1)(2l+2+k)}a_k. \tag{38,13}$$

Заметим, что функция $v$, определяемая рядом (38,11), с коэффициентами $a_k$, удовлетворяющими (38,13), может быть выражена через вырожденную гипергеометрическую функцию [1])

$$v = AF\left(1 + l - \frac{Z}{\beta}, 2l + 2, \xi\right). \tag{38,14}$$

Легко показать аналогично тому, как это сделано в § 10, что ряд (38,11) расходится, как $e^{\xi}$ при $\xi \to \infty$. Это означает, что если бы волновая функция выражалась рядом (38,11), она не удовлетворяла бы условию конечности на сколь угодно большом расстоянии от силового центра. Для того чтобы определить функцию, обладающую должными свойствами и являющуюся решением уравнения (38,10), мы должны так же, как это было сделано при решении задачи об осцилляторе, оборвать ряд на некотором члене, т. е. свести его к полиному. Если при некотором значении числа $k = n_r$ коэффициент ряда $a_{n_r+1}$ обращается в нуль, то согласно (38,13) обращаются в нуль и все последующие коэффициенты $a_{n_r+2}$, $a_{n_r+3}$ и т. д. В этом случае бесконечный ряд сводится к полиному степени $n_r$. При больших значениях $\xi$ функция $v(\xi)$ будет возрастать по степенному закону $v(\xi) \sim \xi^{n_r}$. Волновая функция (38,7) при этом будет стремиться к нулю на бесконечности за счет экспоненциального множителя. При $\xi \to 0$ полином $v(\xi)$ стремится к постоянной величине $a_0$, а волновая функция (38,7) соответственно обращается в нуль или стремится к постоянной. Мы видим, таким образом, что волновая функция будет удовлетворять стандартным граничным условиям.

Посмотрим теперь, при каких условиях коэффициент ряда $a_{n_r+1}$ обращается в нуль. Согласно (38,13) для этого необходимо равенство нулю выражения

$$n_r + l + 1 - \frac{Z}{\beta} = 0. \tag{38,15}$$

Так как $n_r$ — целое число (включая и нуль), то сумма $(n_r + l + 1)$ также является целым положительным числом. Обозначим ее через $n$, $n = n_r + l + 1$. Целое число $n$ называется главным квантовым числом, число $n_r$ — радиальным квантовым числом. При фиксированном значении азимутального квантового числа $l$ имеем:

$$n \geqslant l + 1.$$

Соотношение (38,15) определяет, очевидно, расположение уровней энергии системы. Учитывая значение $\beta$, находим:

$$\varepsilon = \frac{Z^2}{2n^2}. \tag{38,16}$$

---

[1]) См. В. И. Смирнов, Курс высшей математики, Физматгиз, 1958, т. III, ч. 2, стр. 422.

Переходя от атомных к обычным единицам (38,4) и (38,5), получаем

$$E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -13{,}5\frac{Z^2}{n^2}\ \text{эв}. \tag{38,17}$$

Эта формула, впервые полученная Н. Бором еще до появления современной квантовой механики, определяет дискретные энергетические уровни в атоме водорода и водородоподобных ионах. Мы видим, что уровни энергии зависят только от главного квантового числа $n$. Значению $n = 1$ соответствует низший энергетический уровень (основное состояние) частицы в кулоновом поле. С ростом $n$ расстояние между уровнями уменьшается, уровни сгущаются при $n \to \infty$, $\Delta E \to 0$ и дискретный спектр переходит в непрерывный.

Радиальная функция $R_{nl}$ дается формулой

$$R_{nl} = \text{const}\, \xi^l e^{-\xi/2} v(\xi), \tag{38,18}$$

где полином $v(\xi)$ с коэффициентами, определяемыми рекуррентной формулой (38,13), совпадает с точностью до множителя с обобщенным полиномом Лагерра [1]). Поэтому в нашем случае радиальная функция приобретает вид

$$R_{nl} = A_{nl}\xi^l e^{-\xi/2} L_{n+l}^{2l+1}(\xi). \tag{38,19}$$

Обобщенный полином Лагерра $L_n^m(\xi)$ выражается через производные от многочленов Лагерра, которые определяются соотношением

$$L_n(\xi) = e^{\xi}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi}\xi^n\right), \tag{38,20}$$

так что

$$L_n^m(\xi) = \frac{d^m}{d\xi^m} L_n(\xi). \tag{38,21}$$

Коэффициенты $A_{nl}$ (38,19) определяются из условия нормировки [2]). Радиальные волновые функции, принадлежащие, например, двум нижним уровням энергии, имеют вид

$$R_{10}(\rho) = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a^3}}\, e^{-Z\rho}, \tag{38,22}$$

$$R_{20}(\rho) = \sqrt{\frac{Z^3}{2a^3}}\, e^{-\frac{Z}{2}\rho}\left(1 - \frac{Z}{2}\rho\right), \tag{38,23}$$

$$R_{21}(\rho) = \sqrt{\frac{Z^3}{6a^3}}\, e^{-\frac{Z}{2}\rho}\frac{Z}{2}\rho. \tag{38,24}$$

---

[1]) См. сноску на стр. 143.

[2]) Вычисление нормировочного интеграла проведено, например, в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 150.

Здесь вместо $\xi$ введена опять переменная $\rho$ (см. (38,9)). Подчеркнем, что волновая функция полностью определяется совокупностью значений трех квантовых чисел: $n$, $l$ и $m$, тогда как уровни энергии (38,17) зависят только от главного квантового числа $n$. Таким образом, энергетические уровни атома водорода являются вырожденными. Мы видели в § 35, что вырождение по магнитному квантовому числу $m$ — общее свойство движения в поле с центральной симметрией. Однако в кулоновском поле уровни энергии оказываются вырожденными также и по азимутальному квантовому числу $l$. Это вырождение характерно только для движения в кулоновском поле. Достаточно слегка изменить закон сил, и энергия становится зависящей от азимутального квантового числа. Поэтому вырождение, характерное для кулоновского поля, получило название случайного вырождения. Найдем кратность вырождения $n$-го уровня энергии. Так как при заданном $n$ азимутальное квантовое число пробегает все целочисленные значения от 0 до $n-1$ и, в свою очередь, каждому $l$ соответствует $2l+1$ возможных значений квантового числа $m$, то кратность вырождения равна

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2. \tag{38,25}$$

Каждому уровню энергии $E_n$ принадлежит $n^2$ различных волновых функций.

Рассмотрим более детально уровни энергии атома водорода. Они даются формулой (38,17), в которой нужно положить $Z=1$. Энергия основного состояния определяет потенциал ионизации атома водорода. Согласно квантовой теории света, разности энергетических состояний определяют частоты электромагнитных волн, излучаемых атомом (см. § 103):

$$\hbar\omega=E_m-E_n. \tag{38,26}$$

Величина $E_n/\hbar$ называется спектральным термом. Разности этих спектральных термов и определяют частоты излучения. Подставляя в формулу (38,26) выражение (38,17), получаем:

$$\nu=\frac{\omega}{2\pi}=R\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right), \qquad m>n \tag{38,27}$$

Величина $R$ называется постоянной Ридберга

$$R=\frac{e^4\mu}{4\pi\hbar^3}=3{,}27\cdot10^{15}\ сек^{-1}. \tag{38,28}$$

Все частоты, относящиеся к переходам на один и тот же нижний уровень, образуют спектральную серию. Так, если в формуле (38,27) положить $n=1$, то мы получим серию Лаймана. Она лежит в ультрафиолетовой части спектра. Переходы на уровень $n = 2$ лежат в области видимой части спектра. Совокупность этих спектральных линий образует серию Бальмера. Спектральные серии, соответствующие переходам на уровни $n = 3$ и т. д., лежат в инфракрасной области спектра. Для водородоподобных ионов соответствующие спектральные линии сдвигаются в область более коротких длин волн, так как частоты возрастают в $Z^2$ раз.

Найдем, далее, вероятность (35,10) обнаружения электрона, находящегося в различных квантовых состояниях, на заданном расстоянии $r$ от ядра. Основное состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией $\psi_{100} = R_{10}Y_{00}$. Угловая часть волновой функции сводится при $l=0$, $m=0$ к постоянной (см. § 30), т. е. состояние сферически-симметрично. Вероятность обнаружить электрон, находящийся в основном состоянии $\psi_{100}$, на заданном расстоянии от ядра дается выражением

$$dW_{10} = |\psi_{100}|^2 4\pi r^2 \, dr.$$

Пользуясь (38,22), получаем

$$dW_{10} = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 \, dr. \qquad (38,29)$$

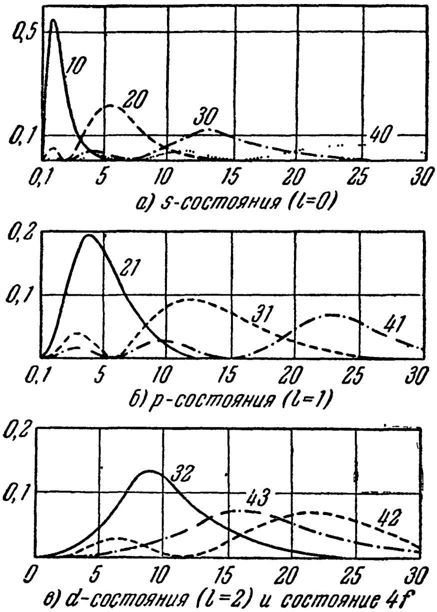


Рис. 11.

Мы видим, что эта вероятность отлична от нуля во всем пространстве, хотя и быстро падает с ростом $r$. Простое вычисление показывает, что кривая $dW_{10}/dr$ имеет максимум на расстоянии $r = a$, где величина $a$ определена формулой (38,3) и носит название боровского радиуса. Вид функции $|R_{nl}|^2 r^2$ для различных $n$ и $l$ приведен на рис. 11. По абсциссе отложено расстояние от центра $\rho = \frac{r}{a}$. По ординате — плотность вероятности $a^3 |R_{nl}|^2 \rho^2$. Отметим, что число нулей радиальной волновой функции $R_{nl}$ совпадает со значением радиального квантового числа $n_r$. На больших расстояниях радиальная волновая функция имеет вид

$$R_{nl}(r) \sim e^{-\frac{Zr}{na}} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^{n-1} + \ldots \qquad (38,30)$$

Вычисленная с помощью этой функции плотность вероятности быстро спадает на расстояниях порядка $\frac{na}{Z}$. Отсюда видно, что величина $\frac{na}{Z}$ характеризует размеры атома, так как вероятность обнаружить электрон на бо́льших расстояниях весьма мала.

До сих пор мы рассматривали связанные состояния электрона в кулоновском поле ядра. В кулоновском поле в связанном состоянии могут находиться и другие отрицательно заряженные частицы, например $\pi$- и $\mu$-мезоны. Такие образования, как мы уже упоминали, получили название мезоатомов.

В качестве простейшего примера рассмотрим мезоатом водорода, или, как его называют, мезоводород. Уровни энергии мезоводорода и волновые функции мезона даются формулами (38,17), (38,18), (38,19), в которых, однако, приведенная масса электрона $\mu$ должна быть заменена на приведенную массу мезона $\mu'$. Эффективные размеры атома мезоводорода определяются величиной $a' = \frac{\mu}{\mu'} a$, которая существенно меньше эффективных размеров атома водорода. В частности, масса $\pi^-$-мезона равна 273 электронным массам и соответственно

$$a' \approx 0{,}2 \cdot 10^{-10} \text{ см}.$$

В атоме мезоводорода $\pi$-мезон находится на значительно меньших расстояниях от ядра, чем электрон. Наличие ядерного взаимодействия $\pi$-мезона с ядром приводит к тому, что уровни энергии (38,17), полученные для чисто кулоновского поля, несколько смещаются. Экспериментальное исследование этого смещения позволяет сделать некоторые выводы о характере ядерного взаимодействия $\pi$-мезонов и нуклонов. Следует заметить, что время существования мезоатомов ограничено временем жизни самих мезонов. Как известно, мезоны являются нестабильными частицами, испытывающими распад с некоторым средним временем жизни $\tau$, характерным для данного сорта мезонов.

До сих пор мы ограничивались рассмотрением дискретного энергетического спектра, т. е. считали энергию отрицательной. Рассмотрим теперь сплошной энергетический спектр $E > 0$, $\varepsilon = -\frac{E}{E_0} < 0$ (38,5). Введем обозначения с учетом (38,7), (38,9), (38,15)

$$\beta = \sqrt{2\varepsilon} = i\sqrt{2\frac{E}{E_0}} = ik; \quad n = \frac{Z}{\beta} = -i\frac{Z}{k}; \quad \xi = 2ik\rho. \qquad (38{,}31)$$

Используя (38,7), (38,14) и (38,31), запишем радиальную волновую функцию непрерывного спектра в виде

$$R_{kl}=\frac{C_k}{(2l+1)!}(2k\rho)^l e^{-ik\rho}F\left(1+l+i\frac{Z}{k};\ 2l+2,\ 2ik\rho\right),\qquad(38,32)$$

здесь $C_k$ — нормировочный множитель.

Если функции $R_{kl}$ нормировать на $\delta$-функцию по $k$, то этот множитель равен

$$C_k=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{k}{Z}\,e^{\frac{\pi Z}{2k}}\left|\Gamma\left(l+1-\frac{iZ}{k}\right)\right|.\qquad(38,33)$$

Асимптотическое выражение радиальной волновой функции при больших $\rho$ определяется формулой [1])

$$R_{kl}\approx\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{Z\rho}\sin\left(k\rho+\frac{Z}{k}\ln 2k\rho-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right),\qquad(38,34)$$

где

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

($\Gamma$ — гамма-функция комплексного переменного. Ее аргумент равен $\delta_l$).

От общего асимптотического выражения радиальной волновой функции в центрально-симметричном поле (35,26) выражение волновой функции (38,34) (кулоновское поле) отличается наличием медленно возрастающего логарифмического члена в аргументе у синуса.

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 154; В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 155.