ГЛАВА IX
РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА МЕТОДОМ РАЗДЕЛЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

§ 1. Введение

Исследование физической системы по существу сводится к решению соответствующего стационарного уравнения Шредингера. В частности, с этим уравнением мы сталкиваемся при решении двух наиболее часто встречающихся задач квантовой физики, а именно:

а) определения уровней энергии связанных состояний, т. е. собственных значений дискретного спектра гамильтониана;

б) вычисления эффективных поперечных сечений рассеяния — как будет показано ниже (гл. X), они находятся при исследовании асимптотической формы собственных функций, принадлежащих непрерывному спектру.

Уравнение Шредингера волновой механики является уравнением в частных производных второго порядка. Для одномерной системы оно сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению; исследование проблемы собственных значений в этом простом случае уже было проведено в гл. III. Задача становится гораздо более трудной, если физическая система обладает многими степенями свободы. Однако свойства симметрии, которыми может обладать гамильтониан, существенно облегчает решение уравнения. Может оказаться, что удачная замена переменных приведет к уравнению в частных производных с разделяющимися переменными; задача на собственные значения в этом случае распадается на несколько задач с меньшим числом переменных, т. е. более простых.

Именно это имеет место при решении задачи о частице, движущейся в центрально-симметричном потенциальном поле, когда потенциал зависит только от расстояния до центра r, но не от направления радиуса-вектора $\boldsymbol{r}$. Если гамильтониан обладает сферической симметрией, то переменные полностью разделяются в сферических координатах; после отделения угловых переменных уравнение Шредингера сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению относительно радиальной переменной, которое всегда может быть проинтегрировано, хотя бы численными методами.

Основная часть этой главы посвящена решению уравнения Шредингера для частицы в центрально-симметричном потенциальном поле. Общее обсуждение задачи проводится в разделе I. В разделе II рассматривается задача о свободной частице и частице в центрально-симметричной потенциальной яме.

В разделе III исследуется еще один простой пример разделения переменных при описании движения центра масс системы частиц; как и в классической механике, это движение отделяется от относительного движения, если взаимодействие между частицами зависит только от относительного расстояния между ними.

Раздел I. ЧАСТИЦА В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ. ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ

§ 2. Гамильтониан частицы в сферических координатах

В этом разделе мы изучим уравнение Шредингера для частицы с массой m, движущейся в поле центрально-симметричного потенциала $V(r)$. Если $\boldsymbol{p}$ — импульс частицы, а $\boldsymbol{r}$ — ее радиус-вектор, то гамильтониан частицы выражается формулой

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) \tag{1}$$

и тогда стационарное уравнение Шредингера принимает вид

$$H\psi(\mathbf{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \tag{2}$$

Ввиду того, что гамильтониан обладает сферической симметрией, проведем исследование в сферических координатах.

В качестве полярной оси, как обычно, выберем ось z, тогда декартовы координаты (x, y, z) выражаются через сферические координаты (r, θ, φ) известными формулами (см. рис. 27):

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta. \tag{I}$$

Выражение для потенциальной энергии V в сферических координатах нам дано; надо найти выражение для кинетической энергии $p^2/2m$, иначе говоря, выразить в сферических координатах дифференциальный оператор

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right).$$

Это можно сделать непосредственно с помощью формул преобразования (I). Вычисление довольно длинно, но не представляет серьезных трудностей; мы не будем его здесь приводить. Вместо этого, чтобы лучше понять физический смысл результата, мы попытаемся выразить кинетическую энергию $\boldsymbol{p}^2/2m$ не через дифференциальные операторы $\partial/\partial r$, $\partial/\partial\theta$, $\partial/\partial\varphi$, а через построенные из этих дифференциальных операторов эрмитовы операторы, которые имеют более наглядный физический смысл.

Так, вместо того, чтобы использовать дифференциальный оператор $\partial/\partial\varphi$, удобнее иметь дело с z-компонентой момента импульса, которая согласно уравнению (V. 49) выражается формулой

$$l_z \equiv xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \qquad (3)$$

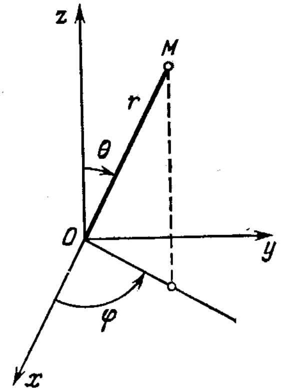

Рис. 27. Сферические и декартовы координаты.

Поскольку $V(r)$ не зависит от φ, очевидно, что l_z коммутирует с потенциальной энергией. Однако l_z коммутирует также и с кинетической энергией $\boldsymbol{p}^2/2m$, что можно легко проверить (задача 4), пользуясь определением l_z и соотношениями коммутации[1])

$$[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}. \qquad (4)$$

Таким образом, l_z коммутирует с гамильтонианом H. Выбирая в качестве полярных осей оси Ox и Oy, можно прийти к тому же заключению относительно l_x и l_y. Следовательно *три составляющие* l_x, l_y, l_z *момента импульса*

$$\boldsymbol{l} \equiv [\boldsymbol{r}\boldsymbol{p}] = \frac{\hbar}{i}[\boldsymbol{r}\nabla] \qquad (5)$$

коммутируют с гамильтонианом. По этой причине мы будем использовать именно эти операторы, а не операторы $\partial/\partial\theta$, $\partial/\partial\varphi$.

По тем же соображениям мы используем радиальный импульс

$$p_r \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \qquad (6)$$

вместо оператора $-i\hbar\,\partial/\partial r$, который не является эрмитовым (см. задачу 1).

Чтобы уточнить свойство эрмитовости p_r, выясним при каких условиях среднее $\langle\psi, p_r\psi\rangle$, где $\psi(\boldsymbol{r})$ квадратично интегрируемая функция, является вещественным. Мы должны иметь

$$0 = \langle\psi, p_r\psi\rangle - \langle\psi, p_r\psi\rangle^* \equiv \int [\psi^*(p_r\psi) - (p_r\psi)^*\psi]\,d\boldsymbol{r} =$$
$$= \frac{\hbar}{i}\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial r}|r\psi|^2\right]dr.$$

[1]) В дальнейшем индексы $i, j = 1, 2, 3$ служат для обозначения компонент векторов в декартовых координатах Ox, Oy, Oz; так, например, $r_1 \equiv x$, $p_1 \equiv p_x$ и т. д.

Поскольку $r\psi$ обращается в нуль при $r \to \infty$, мы должны выяснить поведение функции ψ в начале координат. Очевидно, что оператор p_r является эрмитовым только, если ограничиться квадратично интегрируемыми функциями, которые подчиняются дополнительному условию [2])

$$\lim_{r\to 0} r\psi(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{7}$$

Из определения p_r следует, что этот оператор коммутирует с любой функцией θ и φ, а также с тремя компонентами $\boldsymbol{l}$, но

$$[r,\ p_r] = i\hbar. \tag{8}$$

Существует операторное тождество

$$\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \boldsymbol{l}^2/r^2 \qquad (r \neq 0), \tag{9}$$

согласно которому действие на функцию $\psi(\boldsymbol{r})$ операторов $\boldsymbol{p}^2$ и $p_r^2 + (\boldsymbol{l}^2/r^2)$ дает одинаковый результат при $r \neq 0$.

Чтобы его доказать, применим для вычисления $\boldsymbol{l}^2$ тождество

$$[\boldsymbol{AB}]^2 = \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{B}^2 - (\boldsymbol{AB})^2,$$

подставляя вместо векторов $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ операторы $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$. Разумеется, поскольку компоненты $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ не обязательно коммутируют между собой, это тождество остается справедливым только при сохранении порядка следования операторов, именно

$$\boldsymbol{l}^2 \equiv [\boldsymbol{rp}][\boldsymbol{rp}] = \sum_{i,\,j} (r_i p_j r_i p_j - r_i p_j r_j p_i).$$

Повторное применение коммутационных соотношений (4) позволяет переписать это тождество в виде

$$\boldsymbol{l}^2 = \boldsymbol{r}^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{rp})^2 + i\hbar\boldsymbol{rp}, \tag{10}$$

но поскольку $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, $\quad x\dfrac{\partial}{\partial x} + y\dfrac{\partial}{\partial y} + z\dfrac{\partial}{\partial z} = r\dfrac{\partial}{\partial r}$, следовательно,

$$\boldsymbol{rp} = r\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial r} = rp_r + i\hbar$$

и, учитывая соотношение коммутации (8), получаем

$$(\boldsymbol{rp})^2 - i\hbar(\boldsymbol{rp}) \equiv (\boldsymbol{rp} - i\hbar)(\boldsymbol{rp}) = rp_r(rp_r + i\hbar) = r^2p_r^2.$$

---

[2]) Оператор p_r эрмитов, но не является наблюдаемой. Какой бы ни была постоянная ω, решение дифференциального уравнения

$$p_r f(r) \equiv \frac{\hbar}{i}\,\frac{1}{r}\,\frac{d}{dr}(rf(r)) = \omega f(r)$$

есть, с точностью до постоянного множителя, $\exp(i\omega r/\hbar)/r$. Это решение не удовлетворяет условию (7); задача на собственные значения p_r не имеет решения (Оператор p_r эрмитов (симметричен) на функциях, удовлетворяющих условию (7), но его нельзя расширить до самосопряженного — *Прим. перев.*).

Правая часть тождества (10) поэтому равна $r^2(p^2 - p_r^2)$. Разделив обе части уравнения на r^2, получаем искомое тождество (9), справедливое всюду, кроме, быть может, точки $r = 0$.

Далее, разделив обе части тождества (9) на $2m$, находим выражение для кинетической энергии, а затем и выражение гамильтониана в сферических координатах

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + V(r). \tag{11}$$

Подобно энергии классической частицы гамильтониан есть сумма трех членов: «радиальной кинетической энергии» $p_r^2/2m$, «вращательной кинетической энергии» $l^2/2mr^2$ (заметим, что mr^2 есть момент инерции относительно начала координат) и потенциальной энергии $V(r)$.

Непосредственное вычисление с заменой переменных, упомянутое в начале параграфа, приводит к тому же выражению, причем оператор l^2 представляется в виде

$$l^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{12}$$

В заключение выпишем уравнение Шредингера в сферических координатах:

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \tag{13}$$

Разумеется, решения этого уравнения могут рассматриваться как решения уравнения Шредингера только после изучения их поведения в начале координат. Не следует забывать, что справедливость выражения (11) в начале координат не является автоматически обеспеченной, независимо от вида функции, на которую действует гамильтониан H. Не приводя доказательства, ограничимся здесь указанием того, что уравнение (13) эквивалентно уравнению Шредингера во всем пространстве, включая начало координат, если только ψ удовлетворяет условию (7), т. е. условию эрмитовости оператора p_r.

§ 3. Отделение угловых переменных. Сферические функции

Из выражений (11) и (12) видно, что операторы H и l^2 коммутируют. Это можно было предвидеть: поскольку H коммутирует с l_x, l_y, l_z, он коммутирует и с любой функцией от этих операторов и, в частности, с l^2. Наблюдаемые H и l^2 имеют (по крайней мере одну) общую базисную систему. Поэтому решение проблемы собственных значений H следует проводить в два этапа: решить проблему собственных значений l^2, а затем искать собственные функции оператора l^2, удовлетворяющие уравнению Шредингера. Конкретная форма потенциала $V(r)$ будет играть роль только на втором этапе вычислений.

При нахождении полной системы собственных функций оператора l^2 переменная r является параметром и может быть временно опущена, так как оператор l^2 действует только на угловые переменные θ и φ.

Оператор l^2 коммутирует с каждой компонентой момента импульса (см. уравнение (V. 70)), в частности, он коммутирует с l_z. В теории специальных функций показывается, что общими собственными функциями операторов l^2 и l_z, определенных выражениями (12) и (3), являются *сферические функции* $Y_l^m(\theta, \varphi)$. Основные свойства этих функций даны в Дополнении Б (§ 10). Их построение будет подробно обсуждаться при систематическом изучении момента импульса в квантовой механике (гл. XIII). Различные сферические функции отмечаются индексами l и m, причем l может принимать все целые положительные значения и нуль, а m — все целые значения от $-l$ до $+l$. Имеем:

$$l^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi), \tag{14}$$

$$l_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{15}$$

$$(l = 0, 1, 2, \ldots, \infty;\ m = -l, -l+1, \ldots, +l).$$

В пространстве квадратично интегрируемых функций от θ и φ, т. е. в пространстве квадратично интегрируемых функций, определенных на сфере радиуса 1, сферические функции образуют полную ортонормированную систему. Следует учитывать, что скалярное произведение определяется в этом случае как интеграл по сфере единичного радиуса[3]), причем элемент поверхности выражается формулой

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

Соотношения ортонормированности записываются в виде

$$\int Y_l^{*m} Y_{l'}^{m'}\, d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta Y_l^{*m}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{16}$$

Каждой паре квантовых чисел (l, m) соответствует одна сферическая функция. Требуя, чтобы функция $\psi(r, \theta, \varphi)$ была общей собственной функцией операторов l^2 и l_z, принадлежащей собственным значениям $l(l+1)\hbar^2$ и $m\hbar$ соответственно, мы определяем ее угловую зависимость: функция $\psi(r, \theta, \varphi)$ имеет форму $f(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$.

---

[3]) См. обсуждение в конце § VII. 13. Аналогичные соображения следует иметь в виду при написании соотношения замкнутости в представлении (θ, φ) (уравнение (Б. 88)).

§ 4. Радиальное уравнение

Перейдем теперь ко второму этапу решения уравнения Шредингера. Мы должны найти общие собственные функции коммутирующих операторов H, $\mathbf{l}^2$ и l_z. Они являются решениями уравнения Шредингера вида:

$$\psi_l^m(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi)\chi_l(r). \tag{17}$$

Из того, что ψ_l^m есть решение уравнения (13), а Y_l^m — собственная функция $\mathbf{l}^2$ (уравнение (14)) следует, что $\chi_l(r)$ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E\right]\chi_l(r) = 0, \tag{18}$$

где $p_r^2 \equiv -\hbar^2 \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2} r$.

Удобно ввести обозначение

$$y_l(r) = r\chi_l(r) \tag{19}$$

и заменить уравнение (18) эквивалентным радиальным уравнением

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E\right]y_l(r) = 0, \tag{20}$$

которое имеет большое сходство с одномерным уравнением Шредингера. Отметим, что норма ψ_l^m, после проведения интегрирования по углам, определяется выражением

$$\langle\psi_l^m, \psi_l^m\rangle = \int_0^\infty r^2|\chi_l(r)|^2 dr = \int_0^\infty |y_l(r)|^2 dr \tag{21}$$

и что условие (7) эрмитовости p_r эквивалентно условию

$$y_l(0) = 0. \tag{22}$$

Нас будут интересовать не все возможные решения радиального уравнения (20), так как для того, чтобы функция ψ_l^m была приемлема в качестве собственной функции необходимо, чтобы y_l удовлетворяла некоторым условиям регулярности. Нужно: а) исследуя поведение y_l в начале координат, убедиться в том, что ψ_l^m действительно является решением уравнения Шредингера во всем пространстве, включая начало координат; б) потребовать, чтобы решение было нормируемым (в смысле, определенном на стр. 185).

В целях уточнения условий регулярности рассмотрим подробнее поведение решений уравнения (20) вблизи начала координат. Будем предполагать, что потенциал $V(r)$ ограничен во всем интервале, кроме, быть может, начала координат, где допустима сингулярность типа $1/r$. Эти предположения выполняются во всех практически интересных случаях. При таких условиях уравнение (20) допускает одно «регулярное» решение R_l (определенное с точностью до постоянного множителя), которое в начале координат обращается в нуль как r^{l+1}; другое решение вблизи начала координат ведет себя как $(1/r)^l$ [4]).

Для доказательства предположим, что функция $V(r)$ является аналитической в окрестности начала координат, и будем искать частное решение уравнения (20) в виде ряда $r^s(1 + a_1 r\, a_2 r^2 + \ldots)$. Подставляя это разложение в уравнение, разлагая функцию $V(r)$ в ряд Тейлора и приравнивая нулю коэффициенты при равных степенях r в левой части уравнения, получим бесконечную последовательность алгебраических уравнений, из которых первое

$$s(s-1) - l(l+1) = 0$$

определяет s, а последующие — коэффициенты $a_1, a_2, \ldots$. В нашем случае уравнение для s имеет два решения: $l + 1$ и $-l$. Если $s = l + 1$, вычисление коэффициентов ряда может быть продолжено до бесконечности и мы получаем «регулярное» решение R_l. Если же $s = -l$, то вычисление коэффициентов невозможно. Однако, нетрудно показать, что если R_l является решением уравнения (20), то функция

$$R_l(r) \int^r \frac{dr'}{R_l^2(r')},$$

которая вблизи начала координат ведет себя как $(1/r)^l$, также является решением уравнения. Общее решение есть линейная комбинация этих двух частных решений.

Всякое решение типа $(1/r)^l$ должно быть отброшено, так как оно не удовлетворяет по крайней мере одному из условий а) и б). Действительно, если $l \neq 0$, интеграл от квадрата модуля такого решения расходится в нуле и согласно уравнению (21) функция ψ_l^m, образованная из такого решения, не принадлежит пространству Гильберта (условие б)). Заметим, что расходимость в нуле имеет место и для собственного дифференциала функции ψ_l^m. Поэтому данное решение должно быть отброшено

[4]) Это естественно, так как общее решение уравнения (20) в окрестности нуля приближенно может быть представлено решением уравнения

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

а общее решение последнего уравнения есть $v(r) = ar^{l+1} + \frac{b}{r^l}$ (a и b — произвольные постоянные).

как в случае дискретного спектра E, так и в случае непрерывного спектра.

Это рассуждение неприменимо при $l = 0$. Но в этом случае соответствующая волновая функция ψ_0 не удовлетворяет уравнению Шредингера (условие (а)). Действительно, вблизи начала координат эта функция ведет себя как $1/r$ и, поскольку $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$ (см. уравнение (А. 12)), имеем

$$(H - E)\,\psi_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\,\delta(\boldsymbol{r}).$$

Таким образом, мы должны сохранить только «регулярные» решения или, что то же самое, решения, удовлетворяющие условию (22). При этом функция ψ_l^m является решением уравнения Шредингера всюду, включая начало (условие а)). Далее, поскольку интеграл нормировки сходится в начале координат, выполнение условия принадлежности ψ_l^m или ее собственного дифференциала пространству Гильберта (условие б)) будет зависеть исключительно от поведения этого решения на бесконечности.

Дополненное условием (22) радиальное уравнение (20) представляет собой уравнение Шредингера, описывающее одномерное движение частицы с массой m при наличии потенциала $V(r) + l(l+1)\dfrac{\hbar^2}{2mr^2}$ в области $(0, \infty)$ и бесконечно большого отталкивающего потенциала в области $(-\infty, 0)$. Решение уравнения Шредингера в трех измерениях свелось, таким образом, к одномерному уравнению Шредингера. Все свойства такого уравнения, разобранные в гл. III (свойства вронскиана, асимптотическое поведение решений, соотношения ортогональности и т. д.), остаются справедливыми и в нашем случае, несмотря на сингулярность «эквивалентного потенциала» типа $l(l+1)/r^2$ в начале координат.

§ 5. Собственные решения радиального уравнения. Структура спектра.

Природа спектра энергии и собственных функции радиального уравнения (20) при заданном значении l зависит от асимптотического поведения решений уравнения, регулярных в начале координат. Все выводы § III. 10 могут быть повторены здесь без изменения.

Предположим, например, что при $r \to \infty$ потенциал $V(r)$ стремится к нулю быстрее $1/r$:

$$\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0.$$

Энергетический спектр состоит из двух частей:

а) если $E < 0$, то будучи регулярным в начале решение бесконечно растет по абсолютной величине как $e^{\varkappa r}$, где $\hbar\varkappa = \sqrt{-2mE}$, кроме некоторых дискретных значений $E_l^{(1)}$, $E_l^{(2)}$, ..., для которых

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-\varkappa r}.$$

Эти значения и являются единственно возможными собственными значениями. Каждому из них соответствует радиальная функция с ограниченной нормой;

б) если $E > 0$, то регулярное в начале координат решение бесконечно осциллирует согласно закону

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l\right) \qquad \left(k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right).$$

Оно приемлемо в качестве собственного решения при любых значениях $E > 0$ и представляет состояние непрерывного спектра. Постоянная δ_l называется *сдвигом фазы* или просто *фазой* (дополнительный член $-l\pi/2$ добавлен для того, чтобы при $V(r)=0$ выполнялось равенство $\delta_l = 0$; см. § 7). Фаза δ_l является важной величиной: она характеризует асимптотическое поведение регулярного решения в случае непрерывного спектра и играет существенную роль в задачах о рассеянии (гл. X).

Если потенциал V при $r\to\infty$ стремится к нулю как $1/r$ или еще медленнее (но монотонным образом), то асимптотическое поведение решений не столь просто, однако основной результат, касающийся природы спектра, остается в силе: это всюду невырожденный спектр, включающий непрерывную область для положительных энергий и последовательность (бесконечную счетную) отрицательных дискретных уровней энергии.

Остается показать, что при заданном значении l множество построенных нами собственных функций $y_l(r)$ образует полную систему в том смысле, что любая квадратично интегрируемая функция от r, определенная на полуоси $(0, \infty)$, может быть разложена в ряд по этим собственным функциям. Мы примем, что это так для всех рассматриваемых в дальнейшем потенциалов; в противном случае гамильтониан H не являлся бы наблюдаемой.

§ 6. Заключение

Подводя итоги, констатируем, что наблюдаемые H, $\mathbf{l}^2$ и l_z составляют полный набор коммутирующих наблюдаемых. Задача построения общих собственных функций H, $\mathbf{l}^2$ и l_z сводится к разделению в уравнении Шредингера угловых переменных и радиальной переменной. Если фиксировать собственные значения $l(l+1)\hbar^2$ и $m\hbar$ операторов l^2 и l_z соответственно, то собственные функции имеют вид

$$\psi_l^m = y_l(r)\,\frac{Y_l^m(\theta,\ \varphi)}{r}, \tag{23}$$

где $y_l(r)$ есть решение радиального уравнения (20), которое обращается в нуль в начале координат и остается ограниченным во всем пространстве.

Часто говорят, что такая собственная функция представляет состояние с моментом импульса l или, точнее, что частица обладает моментом импульса l с компонентой m относительно оси z. Напомним, что l и m целые числа и что $l \geqslant 0$, $-l \leqslant m \leqslant l$. Согласно традиционной спектроскопической терминологии l называется *азимутальным квантовым числом*, а m — *магнитным квантовым числом*. По традиции более низкие состояния момента импульса отмечаются буквами алфавита, а не численными значениями азимутального квантового числа: значениям $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ соответствуют буквы $s, p, d, f, g, h, \ldots$

Природа спектра H зависит от поведения потенциала $V(r)$ на бесконечности. В частности, если $V(r)$ стремится (монотонно) к нулю, энергетический спектр содержит некоторое число отрицательных дискретных значений и множество (континуальное) положительных значений.

Каждое из собственных значений *непрерывного спектра бесконечно вырождено*. Действительно, для любых возможных значений (lm) момента импульса существует собственная функция с положительной энергией E.

Уровни энергии *дискретного спектра* E_{kl} могут быть отмечены двумя индексами, азимутальным квантовым числом l и радиальным квантовым числом k, позволяющим различать собственные значения радиального уравнения при заданном l. *A priori* нет никаких причин, по которым радиальные уравнения, соответствующие различным значениям квантового числа l, могли бы иметь одинаковые собственные значения: *в общем случае* собственные значения E_{kl} все различны, но каждое $(2l+1)$ *раз вырождено*, так как каждому соответствует столько линейно независимых собственных функций, сколько при данном l имеется возможных значений магнитного квантового числа m, т. е. $-l, -l+1, \ldots, +l$.

Для некоторых частных форм потенциала $V(r)$ может случиться, что некоторые из собственных значений E_{kl} совпадают; в этом случае вырождение увеличивается. Мы встретимся с вырождением этого рода при изучении атома водорода (гл. XI) и трехмерного изотропного гармонического осциллятора (гл. XII).