Раздел II. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЙ ПРЯМОУГОЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ. СВОБОДНАЯ ЧАСТИЦА

§ 7. Сферические функции Бесселя

Если в интервале $(0, \infty)$ существуют области, где потенциал $V(r)$ имеет постоянное значение

$$V(r) = V_0 = \text{const},$$

то в этих областях радиальное уравнение принимает особенно простую форму и его общее решение является линейной комбинацией хорошо известных функций, а именно сферических функций Бесселя.

Предположим, что $E > V_0$. Если положить

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \qquad \rho = kr, \tag{24}$$

то уравнение (20) принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right] y_l = 0.$$

Тогда радиальная функция $f_l = y_l/r$, рассматриваемая как функция от ρ, является решением «сферического уравнения Бесселя»

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right] f_l = 0. \tag{25}$$

Общее решение уравнения (25) есть линейная комбинация двух частных решений. Наиболее часто применяемые частные решения приведены в Дополнении Б (§ 6); это функции j_l, n_l[5]), $h_l^{(+)}$, $h_l^{(-)}$. Из них только j_l является регулярной в начале координат (ведет себя как ρ^l); три остальные имеют в начале координат полюс порядка $l+1$. Функции j_l и n_l являются вещественными и на бесконечности ведут себя как стоячие волны:

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\sin(\rho - l/2\pi)}{\rho}, \qquad n_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\cos(\rho - l/2\pi)}{\rho}. \tag{26}$$

Функции $h_l^{(+)} \equiv n_l + ij_l$ и $h_l^{(-)} \equiv n_l - ij_l$ асимптотически ведут себя как расходящаяся и сходящаяся волны соответственно:

$$h_l^{(+)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{e^{i(\rho - l/2\pi)}}{\rho}, \qquad h_l^{(-)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{e^{-i(\rho - l/2\pi)}}{\rho}. \tag{27}$$

В случае $E < V_0$ полагаем

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \tag{28}$$

---

[5]) Большинство авторов под n_l понимают функцию с противоположным знаком.

и все сказанное выше остается справедливым, если только заменить всюду k на $i\varkappa$. В частности, асимптотические формулы (26) и (27) остаются в силе. Единственной радиальной функцией, ограниченной на бесконечности, является функция $h_l^{(+)}(i\varkappa r)$; она экспоненциально стремится к нулю. Точнее, функция $i^l h_l^{(+)}(i\varkappa r)$ является вещественной, равной произведению $e^{-\varkappa r}/\varkappa r$ на полином степени l от $1/\varkappa r$, так что асимптотически

$$i^l h_l^{(+)}(i\varkappa r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{e^{-\varkappa r}}{\varkappa r}. \tag{29}$$

§ 8. Свободная частица. Свободные плоские и сферические волны

Вышеприведенные результаты применимы и к случаю свободной частицы. В этом случае $V(r)=0$ во всем интервале $(0, \infty)$, и гамильтониан сводится к члену кинетической энергии

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

Будем искать общие собственные решения H, $\mathbf{l}^2$ и l_z. Решение с моментом импульса (lm) и энергией E имеет вид $Y_l^m(\theta, \varphi) f_l(r)$, где f_l есть решение уравнения (25), ограниченное во всем интервале $(0, \infty)$.

Если $E<0$, то единственное решение, ограниченное на бесконечности, а именно $h_l^{(+)}(i\varkappa r)$, в начале координат имеет полюс порядка $l+1$. Задача на собственные значения не имеет решения; как и следовало ожидать, не существует собственных состояний с отрицательной энергией.

Если $E>0$, то уравнение (25) имеет одно и только одно всюду ограниченное решение, а именно функцию $j_l(kr)$. Таким образом, существует одно собственное решение с моментом импульса (lm) для каждого положительного значения $E=\hbar^2k^2/2m$ энергии — это функция

$$Y_l^m(\theta, \varphi)\, j_l(kr). \tag{30}$$

Каждое такое собственное решение отмечается двумя дискретными индексами l, m и непрерывным индексом k, который может принимать все значения в интервале $(0, \infty)$; множество полученных сферических волн образует полную ортонормированную систему (см. задачу 3).

Совокупность плоских волн $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ составляет другую полную ортонормированную систему собственных функций энергии свободной частицы. Это общие собственные функции наблюдаемых p_x, p_y, p_z, т. е. решения, соответствующие определенному заданному значению импульса $\boldsymbol{p}$. Каждая плоская волна определяется тремя непрерывно изменяющимися параметрами — тремя компонентами вектора $\boldsymbol{k}$, которые могут принимать все значения от $-\infty$ до $+\infty$.

Волна $e^{i\boldsymbol{kr}}$ представляет свободную частицу с импульсом $\hbar\boldsymbol{k}$ и энергией $E=\hbar^2k^2/2m$. В то же время она не представляет состояния с определенным моментом импульса, подобно тому как сферическая волна (30) не представляет состояния с определенным импульсом. Это не удивительно, так как три компоненты импульса p_x, p_y, p_z не коммутируют одновременно с $\boldsymbol{l}^2$ и l_z.

§ 9. Разложение плоской волны по сферическим функциям

Каждое собственное значение энергии свободной частицы бесконечно вырождено. Поскольку сферические волны (30) образуют полную систему, счетное множество сферических волн, соответствующее заданному волновому числу, k растягивает пространство собственных функций с энергией $E=\hbar^2k^2/2m$. Следовательно, плоская волна $e^{i\boldsymbol{kr}}$ может быть разложена в ряд по этим функциям:

$$e^{i\boldsymbol{kr}}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}a_{lm}(\boldsymbol{k})\,Y_l^m(\theta,\ \varphi)\,j_l(kr). \tag{31}$$

Если выбрать ось z в направлении $\boldsymbol{k}$, то плоская волна может быть записана в форме $e^{ikr\cos\theta}$; она не зависит от φ и разложение (31) содержит только члены с $m=0$ [6]). Положим

$$\rho=kr,\quad u=\cos\theta.$$

Разложение плоской волны сводится к разложению в ряд по полиномам Лежандра (см. уравнение (Б. 94)):

$$e^{i\rho u}=\sum_{l=0}^{\infty}c_l j_l(\rho)\,P_l(u). \tag{32}$$

Для определения коэффициентов c_l, можно действовать следующим образом. Дифференцируя почленно ряд (32) по ρ, находим

$$iue^{i\rho u}=\sum_l c_l\frac{dj_l}{d\rho}P_l. \tag{33}$$

---

[6]) Действительно,

$$l_z\exp(ikr\cos\theta)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\exp(ikr\cos\theta)=0.$$

Но это же разложение может быть записано и в другом виде, если учесть рекуррентные соотношения для полиномов Лежандра (Б. 78):

$$iue^{i\rho u} = i\sum_l c_l j_l u P_l =$$
$$= i\sum_l \left(\frac{l+1}{2l+3}c_{l+1}j_{l+1} + \frac{l}{2l-1}c_{l-1}j_{l-1}\right)P_l. \qquad (34)$$

Приравнивая коэффициенты при P_l в разложениях (33) и (34) и используя рекуррентные соотношения (Б.53—54) для сферических функций Бесселя, получаем соотношения:

$$l\left(\frac{1}{2l+1}c_l - \frac{i}{2l-1}c_{l-1}\right)j_{l-1}(\rho) =$$
$$= (l+1)\left(\frac{1}{2l+1}c_l + \frac{i}{2l+3}c_{l+1}\right)j_{l+1}(\rho).$$

Чтобы они выполнялись при любом ρ необходимо и достаточно, чтобы выражения в скобках равнялись нулю, т. е. чтобы

$$\frac{1}{2l+3}c_{l+1} = \frac{i}{2l+1}c_l \qquad (l = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ \infty),$$

откуда

$$c_l = (2l+1)\,i^l \cdot c_0.$$

Коэффициент c_0 можно найти, записывая разложение для случая $\rho = 0$; тогда поскольку $j_l(0) = \delta_l$, получим $c_0 = 1$.

В заключение выпишем формулу разложения плоской волны:

$$e^{ikz} \equiv e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,i^l j_l(kr)\,P_l(\cos\theta). \qquad (35)$$

Для того чтобы получить это разложение в произвольной системе сферических координат, заметим, что угол θ, фигурирующий в разложении (35), есть угол между $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{r}$. Обозначим символами $\widehat{\boldsymbol{k}}$ и $\widehat{\boldsymbol{r}}$ угловые координаты этих векторов. Согласно теореме сложения сферических функций (Б. 98)

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\widehat{\boldsymbol{k}})\,Y_l^m(\widehat{\boldsymbol{r}}).$$

Подставляя это выражение в разложение (35), имеем

$$e^{i\boldsymbol{kr}} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr)Y_l^{m*}(\widehat{\boldsymbol{k}})\,Y_l^m(\widehat{\boldsymbol{r}}). \qquad (36)$$

§ 10. Сферическая прямоугольная яма

В качестве иллюстрации решения задачи о частице в центрально-симметричном поле сил, рассмотрим «прямоугольную яму» (рис. 28):

$$V(r)=\begin{cases} -V_0 & r<a, \\ 0 & r>a. \end{cases} \tag{37}$$

Решение радиального уравнения совершенно аналогично случаю одномерной прямоугольной ямы. Мы умеем писать общее решение уравнения Шредингера в каждой из областей $(0, a)$ и (a, ∞); это линейная комбинация сферических функций Бесселя. Условия регулярности в начале и на бесконечности и условие непрерывности функции и ее логарифмической производной в точке $r=a$ позволяют определить допустимые решения.

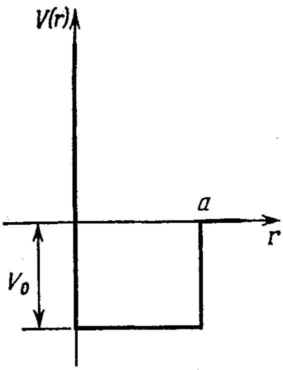

Рис. 28. Сферическая прямоугольная потенциальная яма.

Пусть E — энергия частицы. Положим $K=[2m(E+V_0)]^{1/2}/\hbar$. Во внутренней области $(0<r<a)$ радиальное уравнение имеет вид

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

Положив $\rho=Kr$, приходим к уравнению (25). Существует только одно решение, регулярное в начале: $Aj_l(Kr)$ (A — постоянная нормировки).

Во внешней области $(r>a)$ уравнение Шредингера есть уравнение для свободной частицы. Следует рассмотреть два случая:

A) $E<0$. *Дискретный спектр, связанные состояния.*

Положим $\varkappa=\sqrt{-2mE}/\hbar$. Единственным решением, ограниченным на бесконечности, является функция $Bh_l^{(+)}(i\varkappa r)$, характерная для связанного состояния. Условие непрерывности функции при $r=a$ фиксирует отношение B/A. Непрерывность логарифмической производной дает

$$\frac{1}{h_l^{(+)}(i\varkappa r)}\left(\frac{d}{dr}h_l^{(+)}(i\varkappa r)\right)\bigg|_{r=a}=\frac{1}{j_l(Kr)}\frac{d}{dr}j_l(Kr)\bigg|_{r=a}. \tag{38}$$

Это условие может быть выполнено только для некоторых дискретных значений E. Оно определяет уровни энергии связанных состояний частицы в яме. Если речь идет об s-состояниях

($l = 0$), то уравнение имеет простой вид

$$-\varkappa a = Ka \operatorname{ctg} Ka. \tag{38a}$$

Это уравнение подобно уравнению (III. 18) одномерной задачи из § III.6. Обсуждение вопроса о числе корней уравнения и числе узлов решений может быть повторено здесь без больших изменений. Аналогичные выводы можно сделать относительно значений момента импульса (задача 5).

Б) $E > 0$. *Непрерывный спектр, несвязанные состояния.*

Положим $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Общее решение уравнения Шредингера во внешней области всюду ограничено. Это линейная комбинация функций $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$. Условия непрерывности в точке $r = a$ фиксируют коэффициенты линейной комбинации. Каждому значению E соответствует одна и только одна волновая функция (с точностью до постоянного множителя).

Если внешнее решение представить в форме

$$B[\cos\delta_l \cdot j_l(kr) + \sin\delta_l \cdot n_l(kr)], \tag{39}$$

то условие непрерывности функции в точке $r = a$ определяет отношение B/A. Величина δ_l находится из условия непрерывности логарифмической производной

$$\frac{Kj_l'(Ka)}{j_l(Ka)} = k\,\frac{\cos\delta_l \cdot j_l'(ka) + \sin\delta_l \cdot n_l'(ka)}{\cos\delta_l \cdot j_l(ka) + \sin\delta_l \cdot n_l(ka)}, \tag{40}$$

δ_l — действительная величина и может быть названа сдвигом фазы сферической волны с моментом импульса l. Пользуясь выражениями (26), нетрудно проверить, что асимптотический вид решения (39) выражается формулой

$$B\,\frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}.$$

В случае s-волны уравнение (40) принимает простую форму:

$$K \operatorname{ctg} Ka = k \operatorname{ctg}(ka + \delta_0). \tag{40a}$$

Раздел III. ЗАДАЧА ДВУХ ТЕЛ. ОТДЕЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЦЕНТРА МАСС

§ 11. Отделение движения центра масс в классической механике

При изучении системы двух частиц в квантовой механике мы, вообще говоря, имеем дело с задачей в 6 измерениях. Однако если частицы не испытывают никаких других воздействий кроме их взаимодействия, зависящего только от вектора относительного положения частиц $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, то задача распадается