($l = 0$), 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 на две трехмерные задачи: задачу о свободной частице и задачу о частице в статическом потенциальном поле. Пусть m_1, m_2 — массы, $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ — импульсы, $\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$ — векторы положения этих двух частиц. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H \equiv \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} + V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2). \tag{41}$$

Метод решения задачи состоит в отделении движения центра масс от относительного движения — в полной аналогии с соответствующим методом классической механики.

Напомним вкратце, как выглядит классическое рассмотрение задачи. Положим:

$$\begin{gathered} M = m_1 + m_2, \quad \boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2, \\ m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \quad \boldsymbol{p} = \frac{m_2\boldsymbol{p}_1 - m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1 + m_2}. \end{gathered} \tag{II}$$

При замене динамических переменных, согласно этим формулам, движение пары частиц представляется как движение двух фиктивных частиц. Одна из них есть *центр масс*, положение которого дается вектором $\boldsymbol{R}$, импульс $\boldsymbol{P}$ равен полному импульсу системы, а масса M равна полной массе системы. Другая частица, сопоставляется относительному движению; ее положение $\boldsymbol{r}$ есть относительное положение первой частицы по отношению ко второй, скорость $\boldsymbol{p}/m$ равна относительной скорости $\boldsymbol{p}_1/m_1 - \boldsymbol{p}_2/m_2$, масса m этой *относительной частицы* называется *приведенной массой*.

Отметим несколько замечательных свойств преобразования (II):

$$m_1 m_2 = mM, \tag{42а}$$

$$\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}, \tag{42б}$$

$$m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = mr^2 + MR^2, \tag{42в}$$

$$\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{p}\boldsymbol{r} + \boldsymbol{P}\boldsymbol{R}, \tag{42г}$$

$$\boldsymbol{l}_1 + \boldsymbol{l}_2 = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{L}. \tag{42д}$$

В уравнении (42д) мы ввели моменты импульса двух частиц $\boldsymbol{l}_1$ и $\boldsymbol{l}_2$, момент импульса относительной частицы $\boldsymbol{l} = [\boldsymbol{r}\boldsymbol{p}]$ и центра масс $\boldsymbol{L} = [\boldsymbol{R}\boldsymbol{P}]$.

Нетрудно видеть, что преобразование сохраняет скобки Пуассона; это — каноническое преобразование. Поэтому уравнения движения в новых переменных являются каноническими уравнениями, полученными, исходя из функции Гамильтона, выраженной в новых переменных, т. е.

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}). \tag{43}$$

Находим

$$\dot{\boldsymbol{R}} = \frac{\boldsymbol{P}}{M}, \quad \dot{\boldsymbol{P}} = 0, \quad \dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}, \quad \dot{\boldsymbol{p}} = -\operatorname{grad} V.$$

Уравнения движения центра масс и относительной частицы полностью разделились. Движение центра масс является равномерным и прямолинейным — это движение свободной частицы с массой M. Движение относительной частицы есть движение частицы с массой m в поле действия потенциала $V(\boldsymbol{r})$.

§ 12. Отделение движения центра масс квантовой системы двух частиц

Чтобы рассмотреть ту же задачу в квантовой механике, мы вводим новые динамические переменные $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{P}$, определенные уравнениями (II). Гамильтониан, в старых переменных выражавшийся формулой (41), теперь принимает форму (43). Соотношения коммутации таковы, как если бы мы имели две частицы в точках $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{R}$ с импульсами $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{P}$; единственно отличными от нуля коммутаторами являются

$$[r_j, p_j] = i\hbar, \quad [R_j, P_j] = i\hbar \qquad (j = x, y, z).$$

Все эти свойства чисто алгебраические и без труда проверяются с помощью уравнений (II).

Аналогично проверяется и выполнение уравнений (42) в квантовой механике, включая уравнение (42д), причем нет необходимости изменять порядок фигурирующих в этих формулах операторов.

В новых динамических переменных гамильтониан может быть представлен как сумма двух членов: $H = H_R + H_r$, из которых первый,

$$H_R = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M},$$

зависит только от переменных центра масс, а второй,

$$H_r = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}),$$

только от переменных относительного движения. Векторы, образованные путем тензорного умножения собственных векторов наблюдаемой H_r на собственные векторы наблюдаемой H_R, образуют полную систему собственных векторов наблюдаемой H.

Таким образом, уравнение Шредингера в представлении $\{\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}\}$ записывается в виде

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r+V(\boldsymbol{r})\right)\right]\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}), \tag{44}$$

где Δ_R и Δ_r обозначают операторы Лапласа по координатам $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{r}$ соответственно[7]. Это уравнение обладает полной системой собственных решений $\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r})=\Phi(\boldsymbol{R})\varphi(\boldsymbol{r})$, причем функции Φ и φ удовлетворяют соответственно уравнениям:

$$H_R\Phi(\boldsymbol{R})\equiv\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\right)\Phi(\boldsymbol{R})=E_R\Phi(\boldsymbol{R}),$$

$$H_r\varphi(\boldsymbol{r})\equiv\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r+V(\boldsymbol{r})\right]\varphi(\boldsymbol{r})=E_r\varphi(\boldsymbol{r}).$$

Собственная энергия полной системы равна сумме собственных энергий «отделенных» систем: $E=E_R+E_r$.

Если в начальный момент времени t_0 волновая функция является произведением вида $F(\boldsymbol{R})f(\boldsymbol{r})$, то это свойство факторизации сохраняется с течением времени; функция $F(\boldsymbol{R})$ эволюционирует как волновой пакет, представляющий свободную частицу с массой M, а функция $f(\boldsymbol{r})$ — как волна, представляющая частицу с массой m в поле действия потенциала $V(\boldsymbol{r})$[8]).

На практике рассмотрение задачи двух тел, таким образом, сводится к исследованию движения частицы в поле потенциала $V(\boldsymbol{r})$, т. е. к задаче, которую мы уже умеем решать в случае, когда этот потенциал является центрально-симметричным.

§ 13. Система многих частиц

Отделение движения центра масс может быть осуществлено и в системах с несколькими частицами всякий раз, когда потенциал взаимодействия V зависит только от взаимного положения частиц и не зависит от их абсолютного положения; иными словами, *когда взаимодействие инвариантно относительно общей трансляции всех частиц.*

Рассмотрим квантовую систему из $N+1$ частицы, гамильтониан которой обладает указанным свойством инвариантности. Мы всегда можем выполнить операцию редукции к центру масс на любой паре частиц, т. е. заменить их динамические переменные на переменные их центра масс и «относительной частицы». Этот процесс может быть продолжен; после первой редукции на двух частицах можно выполнить редукцию на центре масс этих двух частиц и некоторой третьей частицы: После этих двух последовательных замен динамических переменных три частицы заменяются «относительной частицей» частиц 1 и 2, «частицей», связанной с относительным движением центра масс

---

[7]) Это уравнение можно было бы получить непосредственно, исходя из уравнения Шредингера в представлении $\{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\}$ и производя в этом уравнении с частными производными замену переменных $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\to(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R})$.

[8]) Если $m_1 \ll m_2$, то $m\simeq m_1$ и $M\simeq m_2$ (пример: атом водорода, m_1 — масса электрона, m_2 — масса протона); если $m_1\simeq m_2$, то $m\simeq m_1/2$ и $M\simeq 2m_1$ (пример: ядро дейтерия, m_1 — масса протона, m_2 — масса нейтрона).

двух первых частиц 1 и 2 и третьей частицы и, наконец, центром масс трех частиц. В общем случае с помощью N замен переменных можно заменить $N+1$ частицу на N «относительных частиц» и центр масс совокупности из $N+1$ частицы. Эта редукция к центру масс совокупности может быть проведена многими способами: либо от частицы к частице ($(N+1)!/2$ возможных вариантов), либо разделяя систему из $N+1$ частицы на две группы из N_1 и N_2 частиц, производя редукцию к центру масс в каждой из этих групп, а затем заменяя их центры масс $\boldsymbol{R}_1$ и $\boldsymbol{R}_2$ на «относительную частицу» $\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2$ и центр масс всей системы $(M_1\boldsymbol{R}_1+M_2\boldsymbol{R}_2)/(M_1+M_2)$, либо разделяя первоначальную систему из $N+1$ частицы на три группы и т. д.

Пусть $\boldsymbol{r}_i$, $\boldsymbol{p}_i$ и m_i — соответственно, положение, импульс и масса i-й частицы, а $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{P}$ и M — соответствующие величины, относящиеся к центру масс системы из $N+1$ частицы:

$$M=\sum_{i=1}^{N+1} m_i, \qquad \boldsymbol{P}=\sum_{i=1}^{N+1}\boldsymbol{p}_i, \qquad \boldsymbol{R}=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N+1} m_i\boldsymbol{r}_i$$

и пусть $\boldsymbol{\rho}_j$, $\boldsymbol{\omega}_j$ и μ_j ($j=1, 2, \ldots, N$) соответствующие величины, принадлежащие j-й «относительной частице», появляющейся в процессе редукции к центру масс, описанном выше. Поскольку такая редукция есть последовательность N редукций к центру масс двух частиц, равенства (42) без труда обобщаются и дают:

$$m_1m_2\ldots m_{N+1}=M\mu_1\mu_2\ldots\mu_N, \tag{45а}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m_i}=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\sum_{j=1}^{N}\frac{\boldsymbol{\omega}_j^2}{2\mu_j}, \tag{45б}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} m_i\boldsymbol{r}_i^2=M\boldsymbol{R}^2+\sum_{j=1}^{N}\mu_j\boldsymbol{\rho}_j^2, \tag{45в}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{P}\boldsymbol{R}+\sum_{j=1}^{N}[\boldsymbol{\omega}_j\boldsymbol{\rho}_j], \tag{45г}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}[\boldsymbol{r}_i\boldsymbol{p}_i]=[\boldsymbol{R}\boldsymbol{P}]+\sum_{j=1}^{N}[\boldsymbol{\rho}_j\boldsymbol{\omega}_j]. \tag{45д}$$

С другой стороны и по той же причине, новые динамические переменные подчиняются соотношениям коммутации, характерным для динамических переменных квантовой системы из $N+1$ частицы. Наконец, ясно, что потенциал V зависит только от относительных координат $\boldsymbol{\rho}_1$ $\boldsymbol{\rho}_2, \ldots, \boldsymbol{\rho}_N$ и что полная кинетическая энергия является суммой кинетической энергии центра масс $\boldsymbol{P}^2/2M$ и кинетических энергий «относительных частиц» согласно (45б), т. е.

$$H=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\left[\sum_{j=1}^{N}\frac{\boldsymbol{\omega}_j^2}{2\mu_j}+V(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \ldots, \boldsymbol{\rho}_N)\right].$$

Таким образом, движение центра масс отделяется и решение задачи $N+1$ тела сводится к задаче N тел.

Все эти результаты не зависят от конкретной процедуры редукции к центру масс. В частности, каким бы ни был выбор N «относительных частиц», произведение их приведенных масс $\mu_1\mu_2\ldots\mu_N$, сумма их кинетических энергий $\sum_j \boldsymbol{\omega}_j^2/2\mu_j$ и сумма их моментов импульса $\sum_j[\boldsymbol{\rho}_j\boldsymbol{\omega}_j]$ остаются неизменными: уравнения (45а), (45б) и (45д) (задача 7).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Показать, что определяемый уравнением (6) эрмитов оператор радиального импульса p_r удовлетворяет уравнению

$$p_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right).$$

2. Рассматривается частица, движущаяся в центрально-симметричном потенциале $V(r)$ и обладающая некоторым числом связанных состояний. Показать, что основным состоянием является состояние s. Показать также, что если существует связанное состояние с моментом импульса L, то существует связанное состояние, принадлежащее каждому из значений l момента импульса, где $l < L$, и что если обозначить с помощью E_l наиболее низкий уровень энергии, приналежащий l, то $E_0 < E_1 < \ldots < E_L$.

3. Выписывая явно соотношения ортогональности и замкнутости, показать, что собственные функции свободной частицы

$$k\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,Y_l^m(\theta,\ \varphi)\,j_l(kr),$$

зависящие от непрерывного индекса $k(0 < k < \infty)$ и целых индексов l и $m(l \geqslant 0,\ -l \leqslant m \leqslant l)$, образуют полную ортогональную систему.

Для этого следует доказать соотношение

$$\int_0^\infty j_l(kr)\,j_l(k'r)\,r^2\,dr = \frac{1}{2}\,\frac{\pi}{k^2}\,\delta(k-k'),$$

принимая во внимание, что функция $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$ в сферических координатах имеет вид

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = (r^2\sin\theta)^{-1}\,\delta(r-r')\,\delta(\theta-\theta')\,\delta(\varphi-\varphi').$$

Показать, что если (k, θ_k, φ_k) — сферические координаты вектора $\boldsymbol{k}$, то

$$\int e^{-i\boldsymbol{kr}}Y_l^m(\theta,\ \varphi)\,j_l(k'r)\,d\boldsymbol{r} = \frac{2\pi^2}{k^2}(-i)^l\,Y_l^m(\theta_k,\ \varphi_k)\,\delta(k-k').$$

4. Вычислить коммутаторы каждой из составляющих $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ с компонентой $\boldsymbol{ul}$ момента импульса $\boldsymbol{l} = [\boldsymbol{rp}]$ вдоль направления единичного вектора $\boldsymbol{u}$. Показать, что они могут быть записаны в общем виде:

$$[(\boldsymbol{ul}),\ \boldsymbol{p}] = \frac{\hbar}{i}\,[\boldsymbol{up}], \qquad [(\boldsymbol{ul}),\ \boldsymbol{r}] = \frac{\hbar}{i}\,[\boldsymbol{ur}].$$

Вывести отсюда, что всякая компонента $\boldsymbol{l}$ коммутирует со скалярными величинами $\boldsymbol{p}^2$, $\boldsymbol{r}^2$ и $\boldsymbol{rp}$.

5. Какому условию должны удовлетворять характеристические параметры прямоугольной потенциальной ямы V_0 и a из § 10, чтобы: а) не существовало ни одного связанного s-состояния; б) существовало заданное число связанных s-состояний? Имеется ли связь между числом связанных s-состояний и числом узлов радиальной функции, соответствующей нулевой энергии? Те же вопросы для случая произвольного l.

6. Радиальное уравнение для частицы в поле центрально-симметричного потенциала $V(r)$ рассматривается методом ВКБ. Чтобы применение метода было оправданным, требуется не только, чтобы потенциал $V(r)$ мало изменялся на расстояниях порядка длины волны, но и чтобы $l \gg 1$. Опыт показывает — и этому можно дать некоторое теоретическое обоснование (см. *Langer, loc. cit.* в сноске VI. 9) —, что метод дает хорошие результаты и при малых значениях l, если заменить $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$ в выражении $l(l+1)/r^2$ (так называемый центробежный барьер) радиального уравнения. Показать, что после этой модификации метод ВКБ при любых l правильно дает:

а) асимптотическую форму $\sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right)\Big/r$ свободной сферической волны ($V(r) = 0$);

б) спектр атома водорода ($V(r) = -e^2/r$);

в) спектр изотропного гармонического осциллятора $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ (строгие решения задач на собственные значения б) и в) содержатся, соответственно, в гл. XI и XII).

7. В системе из $N+1$ частицы осуществляется отделение движения центра масс двумя различными путями. Векторы положения $\rho'_1, \ldots, \rho'_N$ «относительных частиц», полученные вторым путем, связаны с векторами положения $\rho_1, \ldots, \rho_N$, полученными первым путем, линейным соотношением

$$\rho'_j = \sum_{k=1}^{N} A_{jk}\rho_k.$$

Пусть $\mu_1, \ldots, \mu_N$ и $\mu'_1, \ldots, \mu'_N$ — приведенные массы этих «относительных частиц». Показать, что матрица $(N \times N)$ с элементами

$$U_{jk} = \mu'^{1/2}_j A_{jk} \mu_k^{-1/2}$$

является ортогональной.

8. Рассматривается двумерное уравнение Шредингера в случае, когда потенциальная энергия $V(r)$ зависит только от радиальной переменной ($x = r\cos\vartheta$, $y = r\sin\vartheta$). Доказать тождество

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}.$$

Из этого результата вывести, что существует полная система собственных функций вида

$$\psi(r, \theta) = f(r)\, e^{il\theta},$$

причем радиальная часть является решением уравнения

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

обращающимся в нуль в начале координат.

Замечание. Если $V = 0$, то этим регулярным решением является функция Бесселя $J_{|l|}(kr)$, где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.