Поэтому это уравнение мы будем писать просто в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\boldsymbol{r})\psi = \mathscr{E}\psi. \tag{26.8}$$

ЗАДАЧА

Дейтрон состоит из связанных протона и нейтрона. Они удерживают друг друга посредством короткодействующих *ядерных сил*. Потенциальную функцию взаимодействия можно аппроксимировать пространственной потенциальной ямой прямоугольной формы с глубиной $-U_0$ и радиусом a (расстояние между центрами протона и нейтрона). Дейтрон имеет *только одно* связанное состояние. Энергия связи дейтрона, измеренная экспериментально, составляет 2,225 МэВ. Этого недостаточно для определения двух неизвестных U_0 и a. Зададим $a = 2\cdot 10^{-13}$ см (это недалеко от истины). Мы не настаиваем, что это есть точное значение a. Наша цель — привести только схему расчета. Из этих данных определить глубину потенциальной ямы $-U_0$.

Решение. Представляет интерес только относительное движение протона и нейтрона. Поэтому можно воспользоваться уравнением (26.8), понимая под m приведенную массу системы. Если пренебречь различием масс протона и нейтрона, то приведенная масса будет $m/2$, где m — масса одной из частиц (например, протона). В дальнейших вычислениях используются следующие постоянные:

$$mc^2 = 938{,}28 \text{ МэВ}, \quad \hbar c = 1{,}97329\cdot 10^{-11} \text{ МэВ}\cdot\text{см}.$$

Так как у дейтрона только одно связанное состояние, то его энергия в этом состоянии $\mathscr{E} = -2{,}225$ МэВ. Это позволяет по формулам (24.6) и (24.12) найти η. Только в формуле (24.6) m следует заменить на $m/2$. Это дает

$$\eta^2 = -m\mathscr{E}a^2/\hbar^2 = -mc^2\mathscr{E}a^2/\hbar^2c^2 = 0{,}21437 \qquad \eta = 0{,}463099.$$

Величину ξ находим из уравнения

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg}\xi.$$

Сначала решаем это уравнение грубо графически, пользуясь крайней левой кривой на рис. 46, *б*. Затем уточняем решение аналитически с использованием интерполирования. Таким путем без труда находим

$$\xi = 1{,}81993.$$

Искомая глубина потенциальной ямы

$$-U_0 = \frac{\hbar^2c^2}{mc^2a^2}(\xi^2+\eta^2) = 36{,}61 \text{ МэВ}.$$

§ 27. Квантование водородоподобного атома в сферически симметричном случае

1. Приведем еще один пример на квантование энергии атомной системы. Речь идет о водородоподобном атоме. Рассмотрим частный случай, когда волновая функция ψ электрона в атоме *сферически симметрична*, т. е. зависит только от радиуса r — расстояния электрона от атомного ядра. Такой случай не предусматривался старой теорией Бора. В ней всякое движение электрона вокруг ядра происходило по *плоским орбитам* и, следовательно, не могло быть сферически симметричным. Но в

квантовой механике, в которой нет представления о движении электронов по орбитам, нет никаких препятствий для реализации сферически симметричных состояний атома. Из сферической симметрии следует, что в таких состояниях должна обращаться в нуль величина, соответствующая тому, что в классической механике называется моментом количества движения. В теории Бора нулевым моментом количества движения обладал бы электрон, движущийся прямолинейно вдоль радиуса. При таких движениях он неизменно претерпевал бы столкновения с атомным ядром. Старая теория Бора не давала удовлетворительного решения возникавшей здесь трудности, — чтобы избежать столкновений с ядром, она просто исключала возможность радиальных движений электрона. Понятно, что в квантовой механике подобной трудности не возникает.

2. Пусть Ze — заряд ядра. Естественно записать уравнение Шредингера в полярных координатах. В рассматриваемом случае сферической симметрии оно будет

$$\frac{d^2\psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr}+\left(\frac{q}{r}-\beta^2\right)\psi=0, \tag{27.1}$$

где введены обозначения

$$\beta^2=-2m\mathscr{E}/\hbar^2, \quad q=2mZe^2/\hbar^2 \tag{27.2}$$

Введем новую функцию $u(r)$ по формуле

$$\psi=\frac{u(r)}{r}e^{-\beta r}.$$

Тогда

$$\frac{d^2u}{dr^2}-2\beta\frac{du}{dr}+\frac{q}{r}u=0. \tag{27.3}$$

Ищем решение этого уравнения в виде ряда

$$u=\sum_{k=\gamma}^{\infty}a_kr^k, \tag{27.4}$$

где γ — постоянное число, пока что не определенное. Подставляя (27.4) в (27.3) и приравнивая члены с одинаковыми степенями, придем к соотношениям

$$\gamma(\gamma-1)=0, \tag{27.5}$$

$$k(k+1)a_{k+1}-2\beta ka_k+qa_k=0 \quad \text{при} \quad k\neq\gamma. \tag{27.6}$$

Из (27.5) следует, что либо $\gamma=0$, либо $\gamma=1$. Первая возможность исключается, так как при $\gamma=0$ нулевой член ряда (27.4), т. е. a_0, был бы отличен от нуля. А в таком случае функция ψ при $r=0$ обращалась бы в бесконечность как a_0/r, что противоречит общим требованиям, накладываемым на ψ в особых точках. Таким образом, разложение (27.4) должно начинаться с $k=1$, а это значит, что $\gamma=1$.

Исследуем теперь поведение ряда (27.4) на бесконечности. Из (27.6) получаем

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2\beta k - q}{k(k+1)}. \tag{27.7}$$

Отсюда следует, что при $k \to \infty$

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \to \frac{2\beta}{k+1}.$$

Сравним разложение (27.4) с разложением показательной функции:

$$e^{2\beta r} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(2\beta r)^k.$$

Коэффициенты c_k последнего разложения асимптотически ведут себя на бесконечности так же, как и коэффициенты a_k, ибо

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{2\beta}{k+1}.$$

Значит, на бесконечности сумма ряда (27.4) асимптотически ведет себя как показательная функция $e^{+2\beta r}$, а волновая функция $\psi(r)$ — как $e^{\beta r}/r$, т. е. при произвольно выбранном значении $\mathscr{E}$ функция $\psi(r)$ при $r = \infty$ обращается в бесконечность. Этого не будет только для таких значений $\mathscr{E}$, при которых ряд (27.4) обрывается, т. е. переходит в сумму конечного числа членов. Пусть, например, при $k = n$ числитель формулы (27.7) $2\beta k - q = 0$. Тогда, как видно из (27.7), a_{n+1} и все последующие коэффициенты будут равны нулю, т. е. ряд (27.4) оборвется. Следовательно, n-й энергетический уровень определится условием $2\beta n - q = 0$. Используя его, из (27.2) находим

$$\mathscr{E} = -mZ^2e^4/2\hbar^2n^2, \tag{27.8}$$

что совпадает с соответствующей формулой теории Бора.

Изложенным еще не решается задача о спектре водородного и водородоподобного атомов, даже в ее наиболее грубой постановке. Чтобы объяснить спектральные серии, необходимо схему энергетических уровней дополнить *правилами отбора* при излучении фотонов. Оказывается, что переходы между найденными нами уровнями энергии, соответствующими сферически симметричным состояниям водородоподобного атома, являются *запрещенными*, т. е. не сопровождаются (дипольным) излучением. Для объяснения спектральных серий необходимо рассмотреть сферически несимметричные состояния водородоподобного атома и установить *правила отбора*. Это будет сделано ниже (см. § 39).

3. Для сравнения с теорией Бора найдем еще волновую функцию $\psi_1(r)$ основного состояния в сферически симметричном случае. Так называется стационарное состояние наименьшей энергии. Посмотрим, при каких значениях параметров $\mathscr{E}$ и a_1 уравнению (27.1) удовлетворяет экспоненциальная функция

$$\psi_1(r) = e^{-r/a_1}, \tag{27.9}$$

где $a_1 > 0$. Эта функция не имеет узлов. Поэтому, если $\psi_1(r)$ удовлетворяет уравнению Шредингера (27.1), то она и будет волновой функцией основного состояния. Дифференцируя $\psi_1(r)$ дважды по r и подставляя результаты в (27.1), получим

$$\frac{1}{a_1^2} - \frac{2}{a_1 r} + \frac{q}{r} - \beta^2 = 0.$$

Это соотношение должно выполняться тождественно по r, а потому должно быть

$$1/a_1^2 = \beta^2, \quad 2/a_1 = q,$$

или на основании (27.2)

$$a_1 = \hbar^2/mZe^2, \quad \mathscr{E} = \mathscr{E}_1 = -mZ^2e^4/2\hbar^2. \tag{27.10}$$

Последнее выражение является частным случаем (27.8) при $n = 1$, как и должно быть для основного состояния. Параметр a_1 имеет размерность длины, при $Z = 1$ он обращается в боровский радиус. О физическом смысле этого параметра в квантовой механике будет сказано несколько ниже.

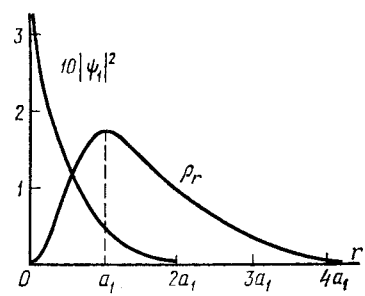

Рис. 49

Функция $\psi_1(r)$ при $r = 0$ обращается в единицу, т. е. остается конечной. Следовательно, при $r = 0$ $u(r) = r\psi_1(r) = 0$, как того требует и общая теория.

Если функция ψ_1 нормирована, то $|\psi_1|^2$ дает объемную плотность вероятности обнаружения электрона в пространстве. Наряду с ней введем *радиальную плотность вероятности* ρ_r. Вероятность обнаружения электрона в сферическом слое между r и $r + dr$ равна объему этого слоя $4\pi r^2 dr$, умноженному на $|\psi_1|^2$, т. е. $4\pi r^2 |\psi_1|^2 dr$. Эту вероятность можно представить в виде $\rho_r dr$. Величина ρ_r и есть радиальная плотность вероятности — произведение $\rho_r dr$ дает вероятность того, что электрон будет обнаружен на расстоянии от ядра между r и $r + dr$. Таким образом,

$$\psi_1 = Ce^{-r/a_1}, \quad \rho_r = 4\pi C^2 r^2 e^{-2r/a_1}.$$

Интегрируя второе выражение по r в пределах от 0 до $+\infty$ и приравнивая результат единице, находим нормировочную постоянную C и таким путем получаем

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{1}{\pi a_1^3}}\, e^{-r/a_1}, \quad \rho_r = \frac{4}{a_1^3} r^2 e^{-2r/a_1}. \tag{27.11}$$

На рис. 49 представлены графики кривых $|\psi_1|^2$ и ρ_r. Ординаты первой кривой увеличены в десять раз. Кривая ρ_r проходит через максимум при $r = a_1$. Следовательно, в квантовой механике радиус первой боровской орбиты надо истолковать как такое расстояние от ядра, на котором вероятность обнаружения электрона максимальна.

ЗАДАЧИ

1. Найти среднее расстояние $\bar{r}$, на каком будет обнаружен электрон от ядра атома, если последний находится в основном состоянии.

Ответ. $\bar{r} = {}^3/_2 a_1$.

2. В той же задаче найти среднее значение $\overline{(1/r)}$ обратного расстояния электрона от ядра.

Ответ. $\overline{(1/r)} = 1/a_1$.

3. Найти средние значения потенциальной $\bar{U}$ и кинетической $\bar{\mathscr{E}}_{\text{кин}}$ энергий основного состояния водородоподобного атома.

Ответ. $\bar{U} = -Ze^2/a_1$; $\bar{\mathscr{E}}_{\text{кин}} = Ze^2/2a_1 = -\bar{U}/2$. Отметим, что такое же соотношение между U и $\mathscr{E}_{\text{кин}}$ получилось бы в классической механике для электрона, движущегося вокруг ядра по всякой круговой орбите.

4. Определить уровни энергии в сферически симметричном состоянии водородоподобного атома по числу узлов волновой функции, подобно тому как это было сделано в § 23 для гармонического осциллятора.

Решение. Волновые функции возбужденных состояний должны иметь узлы, число которых на единицу меньше номера соответствующего стационарного состояния. Этому условию для n-го стационарного состояния удовлетворяет выражение

$$\psi_n(r) = P_{n-1}(r)\, e^{-r/a_n},$$

где a_n — положительная постоянная, а $P_{n-1}(r)$ — полином степени $n-1$, все корни которого вещественны и различны. Необходимо, чтобы функция $\psi_n(r)$ удовлетворяла уравнению Шредингера (27.1). Простым дифференцированием находим

$$\frac{d\psi_n}{dr} = \left(-\frac{1}{a_n} P_{n-1} + P'_{n-1}\right) e^{-r/a_n},$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dr^2} = \left(\frac{1}{a_n^2} P_{n-1} - \frac{2}{a_n} P'_{n-1} + P''_{n-1}\right) e^{-r/a_n}.$$

После подстановки в (27.1) получаем

$$\frac{1}{a_n^2}P_{n-1}-\underline{\frac{2}{a_n}P'_{n-1}}+P''_{n-1}-\underline{\frac{2}{a_n}\frac{P_{n-1}}{r}}+\frac{2P'_{n-1}}{r}+\underline{\frac{qP_{n-1}}{r}}-\beta^2P_{n-1}=0.$$

Это соотношение должно выполняться тождественно по r. Старшую степень r^{n-1} содержат только первое и последнее слагаемые. Поэтому должно быть

$$1/a_n^2=\beta^2, \quad \text{или} \quad 1/a_n=\beta$$

Степень r^{n-2} содержат только подчеркнутые члены. При этом при взятии производной P_{n-1} появляется коэффициент $(n-1)$. С учетом этого

$$-\frac{2(n-1)}{a_n}-\frac{2}{a_n}+q=0, \quad \text{или} \quad \frac{2n}{a_n}=q.$$

Таким образом,

$$a_n=\frac{2n}{q}=n\frac{\hbar^2}{mZe^2}=na_1,$$

$$\mathscr{E}=-\frac{\hbar^2\beta}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}=\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2},$$

что совпадает с ранее полученными результатами.

Недостаток приведенного решения — в том, что мы не исследовали до конца, что наша функция $\psi_n(r)$ действительно является решением уравнения Шредингера. Для небольших n, подобно тому как это было сделано в § 23, нетрудно найти в явном виде полиномы $P_{n-1}(r)$ и соответствующие им постоянные a_n. Таким путем можно убедиться, что функции $\psi_n(r)=P_{n-1}(r)\times\times e^{-r/a_n}$ действительно удовлетворяют уравнению Шредингера. Можно проверить также, что все корни полинома $P_{n-1}(r)$ вещественные и некратные.

§ 28. Потенциальные барьеры

1. К задаче о квантовании энергии в потенциальных ямах примыкает задача о прохождении частицы через потенциальные барьеры. Ограничимся рассмотрением *одномерных потенциальных барьеров*, когда потенциальная функция U зависит только от одной координаты x. Потенциальным барьером такого типа называется ограниченная параллельными плоскостями область пространства, в которой потенциальная функция $U(x)$ больше, чем в примыкающих областях.

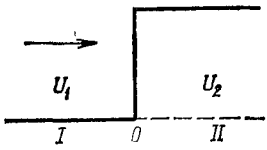

Рис. 50

Начнем с простейшего идеализированного случая *прямоугольного потенциального барьера*, когда одна из его стенок удалена в бесконечность (рис. 50). Такой барьер может быть назван *ступенчатым*, так как потенциальная функция $U(x)$ в этом случае представляется ступенчатой линией:

$$U(x)=\begin{cases} U_1=\text{const} & \text{в области } I, \text{ где } x<0, \\ U_2=\text{const} & \text{в области } II, \text{ где } x>0, \end{cases} \tag{28.1}$$