Лекция 15. Движение в центральном поле. Классификация стационарных состояний дискретного спектра

У.Ш. в центральном поле имеет вид:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+U(r)\right)\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r})$$

Будем искать решения этого уравнения в виде произведения функций, зависящих отдельно от r и от ϑ,φ $\psi(r,\vartheta,\varphi)=f(r)g(\vartheta,\varphi)$.

Подставляя это выражение в уравнение, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(g\Delta_r f+\frac{f}{r^2}\Delta_{\vartheta,\varphi}g\right)+U(r)fg=Efg$$

Лекция 15 (2 слайд)

Разделим уравнение на fg и умножим на $2\mu r^2$, получим

$$-\hbar^2 r^2 \Delta_r f(r) + 2\mu r^2 \left(U(r) - E\right) f(r) = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta,\varphi} g(\vartheta,\varphi)$$

Правая часть зависит только от углов, левая - только от модуля радиуса-вектора. Поэтому для того, чтобы равенство удовлетворялось необходимо, чтобы и правая и левая части равнялись бы постоянной.

Обозначим эту постоянную (которая имеет размерность квадрата постоянной Планка) как $\hbar^2\alpha$, где α - некоторое безразмерное число.

Тогда функции $f(r)$ и $g(\vartheta,\varphi)$ удовлетворяют уравнениям

$$\Delta_r f(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(U(r) + \frac{\hbar^2\alpha}{2\mu r^2} - E\right) f(r) = 0$$

$$-\Delta_{\vartheta,\varphi} g(\vartheta,\varphi) = \alpha g(\vartheta,\varphi)$$

Лекция 15 (3 слайд)

Второе уравнение с точностью до множителя $\hbar^2$ совпадает с уравнением на собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента импульса, причем число α - собственное значение оператора $\hat{L}^2$. Поэтому $\alpha = l(l+1)$, где $l = 0,1,2...$ - целое неотрицательное число.

Каждому значению $\alpha = l(l+1)$ отвечают $2l+1$ различных ограниченных решений $g(\vartheta,\varphi)$, отвечающими собственным значениям $m = -l, -l+1, ... l-1, l$. Такими решениями являются сферические функции $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$.

Лекция 15 (4 слайд)

При этом радиальная часть решений $f(r)$ из
должна быть найдена
уравнения $\alpha = l(l+1)$,
то есть из уравнения

$$\Delta_r f(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E \right) f(r) = 0$$

причем необходимо перебрать все возможные значения l.
Из этого же
граниченности решения $f(r)$
уравнения и условия о должно быть
определено и собственное значение E. азом радиальная функция
Таким обр
$f(r)$ E
и собственная энергия определяются разными уравнениями для разных
$f(r)$ l, l: $f(r) \rightarrow f_l(r)$, $E \rightarrow E_l$.
значений то есть, вообще говоря, зависят от

Лекция 15 (5 слайд)

Рассмотрим уравнение для некоторого фиксированного значения момента l. Пере йдем в этом уравнении к новой неизвестной функции $\chi_l(r) = rf(r)$.

Подставляя в уравнение, получим

$$\chi_l''(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right)\chi_l(r) = 0$$

Уравнение для функции $\chi_l(r)$ совпадает с одномерным уравнением Шредингера для ча стицы, движущейся в «одномерном» потенциале

$$U_{эфф}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

называемом «эффективным потенциалом»

Лекция 15 (6 слайд)

Одномерное уравнение Шредингера было подробно исследовано ранее.

$U(r \to \infty) \to 0$.

Воспользуемся результатами этого исследования. Пусть

Тогда при $E > 0$ уравнение для любого l имеет непрерывный спектр собственных значений E.

Лекция 15 (7 слайд)

При $E < 0$ ачениях E,
решения могут существовать только при дискретных зн

причем для этого потенциальная энергия должна представлять собой достаточно l

глубокую «яму». Поскольку для каждого значения момента дискретные
собственные значения и отвечающие им радиальные функции $\chi_l(r)$ определяются

ого значения l
из решения разных уравнений, для кажд существует своя
система собственных значений E_l $\chi_l(r)$.
и собственных функций Перенумеруем
эти собственные значения и соответствующие им собственные функции для

каждого l $n_r = 1, 2, 3, \ldots$,
целым индексом который называется радиальным
квантовым числом.

Лекция 15 (8 слайд)

Таким образом, все дискретные собственные значения и радиальные функции зависят от двух индексов $E \to E_{n_r l}$, $\chi(r) \to \chi_{n_r l}(r)$ - индекс момента l определяет уравнение, из которого находятся собственные значения и радиальные функции, а радиальное квантовое число n_r нумерует решения уравнения с фиксированным l в порядке возрастания энергии. При этом может оказаться, что уравнение для некоторых значений l вообще не имеет дискретных собственных значений. В этом случае уровни энергии $E_{n_r l}$ с таким значением момента в данном потенциале отсутствуют.

Лекция 15 (9 слайд)

Поскольку каждому дискретному собственному значению $E_{n_r l}$
отвечает
единственная радиальная функция $\chi_{n_r l}(r)$,
то каждому дискретному
собственному значению отвечают $2l+1$
различных собственных функций

$$\psi_{n_r lm}(r,\vartheta,\varphi)=\frac{\chi_{n_r l}(r)}{r}\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

отличающихся друг от друга проекцией момента на ось z,
то есть имеет
m.
место вырождение уровней энергии по проекции момента Часто
состояния с одинаковыми квантовыми числами n_r l,
и но разными
m яний.
часто называют мультиплетом состо

Лекция 15 (10 слайд)

В заключение этой лекции приведем терминологию, которая впервые возникла в атомной физике и которая широко используется в квантовой механике, атомной и ядерной физике сегодня. Стационарные состояния с $l=0$ называют s-состояниями, состояния с $l=1$ - p-состояниями, состояния с $l=2$ - d-состояниями, состояния с $l=3$ - f-состояниями и далее по порядку букв латинского алфавита.