<u>Лекция 16.</u> Водородоподобный атом. Уровни энергии и волновые функции

Собственные функции гамильтониана имеют вид $\psi(r,\vartheta,\varphi)=f_l(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$,

причем радиальные функции $\chi_l(r)=rf_l(r)$ удовлетворяют уравнению

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

и граничному условию $\chi_l(r=0)=0$. Введем безразмерную координату $r'=r/a$, где $a=\hbar^2/me^2$ - боровский радиус. В новых переменных

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\xi^2+\frac{2}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l(r)=0$$

где $\xi^2=-E2a/e^2$ - безразмерное собственное значение (которое для состояний дискретного спектра является положительным).

Лекция 16 (2 слайд)

Перейдем к новой неизвестной функции $u(r)$: $\chi_l(r) = r^{l+1}\exp(-\xi r)u(r)$.

Подставляя эту функцию в уравнение, получим

$$ru''(r) + 2u'(r)\big((l+1) - \xi r\big) - u(r)\big(2l+1\big) = 0$$

Ищем решение в виде степенного ряда

$$u(r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n r^n$$

Лекция 16 (3 слайд)

Подставляя ряд в уравнение, получим

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)C_n r^{n-1} + 2(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} nC_n r^{n-1} - 2\xi\sum_{n=0}^{\infty} nC_n r^n - (2l+1)\sum_{n=0}^{\infty} C_n r^n = 0$$

Меняя в первой и второй суммах индекс суммирования и собирая слагаемые с одинаковыми степенями r, получим рекуррентное соотношение для коэффициентов

$$C_{n+1} = \frac{2\xi(l+n+1)-1}{\left(2(l+1)+n\right)(n+1)} C_n$$

Лекция 16 (4 слайд)

Для больших номеров n к
соотношение сводится

$$C_{n+1} \approx \frac{2\xi}{n} C_n$$

и, следовательно, для больших номеров ряд имеет вид

$$u(r) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(2\xi\right)^n}{n!} r^n \to \exp(2\xi r)$$

Таким образом, решение $\chi_l(r) = r^{l+1}\exp(-\xi r)u(r)$ при
расходится

$r \to \infty$.

Следовательно, чтобы существовали ограниченные решения

уравнения, ряд должен точно оборваться на каком-то шаге. Ряд обрывается, если

$$\xi = \frac{1}{l + n_r + 1}$$

Лекция 16 (5 слайд)

где $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ - радиальное квантовое число. Следовательно, собственные значения оператора Гамильтона $E_{n_r l}$ имеют вид

$$E_{n_r l} = -\frac{e^2}{2a(l + n_r + 1)^2}$$

При этом функции $u(r)$ являются многочленами степени n_r (коэффициенты этих многочленов зависят от числа l, которое входит в рекуррентное соотношение (7)). В математике эти многочлены (с определенной нормировкой) называются обобщенными полиномами Лагерра. Найдем несколько первых полиномов.

Лекция 16 (6 слайд)

Сначала для уравнения с $l = 0$.

$l = 0$, $n_r = 0$. $\xi = 1$.

Ряд обрывается на первом слагаемом, если

$u_{n_r=0,l=0}(r) = C_0$, где нулевой коэффициент ряда C_0 может быть выбран любым.

$l = 0$, $n_r = 1$. $\xi = 1/2$.

Ряд обрывается на втором слагаемом, если

$C_1 = -C_0 / 2$, и, следовательно, $u_{n_r=1,l=0}(r) = C_0(1 - r/2)$.

$l = 0$, $n_r = 2$. $\xi = 1/3$.

Ряд обрывается на третьем слагаемом, если

$C_1 = -2C_0/3$, $C_2 = 2C_0/7$, и, следовательно, $u_{n_r=2,l=0}(r) = C_0(1 - 2r/3 + 2r^2/7)$.

Лекция 16 (7 слайд)

Уравнение с $l=1$.

$l=1$, $n_r=0$. $\xi=1/2$.
Ряд обрывается на первом слагаемом, если
$u_{n_r=0,l=1}(r)=C_0$.

$l=1$, $n_r=1$. $\xi=1/3$.
Ряд обрывается на втором слагаемом, если
$C_1=-C_0/6$, $u_{n_r=1,l=1}(r)=C_0(1-r/6)$.

$l=1$, $n_r=2$. $\xi=1/4$.
Ряд обрывается на третьем слагаемом, если
$C_1=-C_0/4$, $C_2=C_0/80$, $u_{n_r=2,l=1}(r)=C_0(1-r/4+r^2/80)$.

Аналогично можно найти решения, отвечающие любым квантовым числам n_r и l.

Лекция 16 (8 слайд)

Уровни энергии частицы в кулоновском поле можно перечислить с помощью одного целого положительного числа $N = l + n_r + 1$: $E_{n_r l} \to E_N$,

при этом, как следует из этого утверждения, имеет место. Состояния с разными l и n_r вырождены, если сумма квантовых чисел l и n_r для этих состояний одинакова. Кратность вырождения находится из следующих рассуждений. Поскольку $l, n_r \geq 0$, для уровня с данным N момент импульса l может принимать N значений от $l = 0$ до $l = N - 1$. При этом для каждого значения l существуют $2l + 1$ состояний, отличающихся проекций момента импульса на ось z. Поэтому данному уровню отвечают

$$G(N) = \sum_{l=0}^{N-1}(2l+1) = 2\sum_{l=0}^{N-1} l + \sum_{l=0}^{N-1} 1 = (N-1)N + N = N^2$$

различных вырожденных собственных состояний.

Лекция 16 (9 слайд)

Построим волновые функции нескольких первых собственных состояний.

$N=1$ (основное состояние). $E_{N=1}=-e^2/2a$. Значению $N=1$ отвечает единственная пара квантовых чисел $n_r=0$ и $l=0$, поэтому основное состояние не вырождено. Волновая функция основного состояния не зависит от углов и имеет вид

$$\psi_{n_r=0,l=0,m=0}(r,\vartheta,\varphi)=C\exp(-r)Y_{00}(\vartheta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\exp(-r)$$

Лекция 16 (10 слайд)

$N=2$ (первый возбужденный уровень). $E_{N=2}=-e^2/8a$. Значению $N=2$ отвечает две пары квантовых чисел $n_r=0$, $l=1$ и $n_r=1$, $l=0$. Поэтому первый возбужденный уровень вырожден. Волновые функции состояний, отвечающих первому возбужденному уровню имеют вид

$$\psi_{n_r=1,l=0,m=0}(r,\vartheta,\varphi)=C\left(1-r/2\right)\exp(-r/2)Y_{00}(\vartheta,\varphi)$$ (одна функция)

$$\psi_{n_r=0,l=1,m}(r,\vartheta,\varphi)=Cr\exp(-r/2)Y_{1m}(\vartheta,\varphi)$$ (три функции)