3.7. Движение в центральном поле

3.7.1. Уравнение Шредингера в центральном поле.

Центральное (или *центрально-симметричное*) поле является полем, потенциальная энергия которого зависит только от модуля разности координат взаимодействующих частиц. Движение в центральном поле было уже рассмотрено в классической механике. Это очень важная задача в физике, поскольку проблема системы двух взаимодействующих тел сводится к решению задачи о движении одной частицы в поле центральных сил. В микромире в качестве примера таких задач можно привести задачи об атоме водорода, одноэлектронных ионах He^+, Li^{+2},..., о позитронии (система, состоящая из электрона и позитрона) и ряда других объектов.

Итак, рассматриваем потенциальную энергию (в квантовой механике обычно ее называют *потенциалом*) системы двух тел: $U\left(\left|\vec{r}_2-\vec{r}_1\right|\right)$. Потенциал зависит от относительного расстояния двух взаимодействующих тел. Обычно в такой задаче переходят в систему отсчета, связанную с центром масс двух частиц и разделяют поступательное движение центра масс системы из двух частиц и их относительное движение. Относительное движение – это задача о движении одной частицы приведенной массы в поле центральных сил (см раздел Механика 1.5 и 1.14).

Если масса одного тела значительно больше массы другого $M >> m_0$, то можно считать, что центр масс находится в центре массивной частицы и рассматривать движение одной частицы массы m_0 в поле $U(r)$, где r – ее расстояние от второй, более массивной частицы.

Рассматривается стационарное уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\hat{\nabla}^2+U\left(r\right)\right]\psi\left(\vec{r}\right)=E\psi\left(\vec{r}\right) \tag{3.7.1}$$

В сферической системе координат оператор Лапласа имеет вид:

$$\hat{\nabla}^2\equiv\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}\equiv\hat{\nabla}_r^2+\frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}, \tag{3.7.2}$$

где угловая часть оператора Лапласа, называемая иногда оператором Лежандра, имеет вид:

$$\hat{\Lambda}=\frac{\partial}{Sin\theta\partial\theta}\left(Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{Sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{3.7.3}$$

Отметим важное обстоятельство: оператор Лежандра $\hat{\Lambda}$ не зависит от радиуса r и конкретного вида потенциала $U(r)$. Это позволяет разделить уравнение Шредингера на две части: одна зависит только от радиуса r, другая – от угловых переменных θ и φ. Убедимся в этом, если представим волновую функцию в виде произведения двух функций:

$$\psi\left(r,\theta,\varphi\right)=R\left(r\right)\mathrm{Y}\left(\theta,\varphi\right). \tag{3.7.4}$$

Такой вид волновой функции приводит к разделению переменных в уравнении Шредингера. Представим (3.7.1) в более удобном виде:

$$\left(\hat{\nabla}_r^2+\frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}\right)\psi+k^2\left(r\right)\psi=0, \tag{3.7.5}$$

где величина k^2 (квадрат волнового числа в рамках классической механики)

$$k^2\left(r\right)=\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E-U\left(r\right)\right) \tag{3.7.6}$$

зависит только от радиуса r.

Умножим последнее уравнение Шредингера (3.7.5) на $\frac{r^2}{\psi}=\frac{r^2}{R\cdot\mathrm{Y}}$ и, сокращая соответствующие части волновой функции, получаем:

$$\underbrace{\frac{r^2}{R\left(r\right)}\hat{\nabla}_r^2R\left(r\right)+r^2k^2\left(r\right)}_{\text{зависит только от } r}=\underbrace{-\frac{1}{\mathrm{Y}\left(\theta,\varphi\right)}\hat{\Lambda}\mathrm{Y}\left(\theta,\varphi\right)}_{\text{зависит только от } \theta,\varphi} \tag{3.7.7}$$

Поскольку левая и правая части в уравнении (3.7.7) зависят от разных переменных (каждая часть только от своей переменной), то они равны постоянной – *постоянной разделения* λ.

$$\frac{r^2}{R(r)}\hat{\nabla}_r^2 R(r) + r^2 k^2(r) = \lambda = -\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\varphi)}\hat{\Lambda}\mathrm{Y}(\theta,\varphi)$$

3.7.2. Уравнение для радиальной части.

Рассмотрим уравнение для радиальной части, которое приобретает вид:

$$\hat{\nabla}_r^2 R + k^2 R = \frac{\lambda}{r^2} R$$

Или, подставляя $\hat{\nabla}_r^2$ из (3.7.2) и k^2 из (3.7.6), получаем подробнее

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{\lambda}{r^2}\right]R(r) = 0 \tag{3.7.8}$$

Производя дифференцирование и вводя (3.7.6), получаем следующее уравнение для радиальной части волновой функции:

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R = 0 \tag{3.7.9}$$

Уравнение для радиальной части волновой функции зависит от потенциала $U(r)$. Поэтому чтобы решать это уравнение необходимо знать конкретный вид центрального потенциала.

В радиальном уравнении обычно делается следующая замена:

$$R(r) = \frac{1}{r}\chi(r), \tag{3.7.10}$$

Новая функция вводится для того, чтобы избавиться от первой производной в радиальном уравнении. Вычисляя производные и подставляя их в (3.7.9), получаем уравнение для радиальной функции χ:

$$R' = \frac{\chi'}{r} - \frac{\chi}{r^2}, \quad R'' = \frac{\chi''}{r} - \frac{2\chi'}{r^2} + \frac{2\chi}{r^3}$$

$$\chi'' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)\chi = 0 \tag{3.7.11}$$

Решение этого уравнения для атома водорода рассмотрим ниже.

3.7.3. Уравнение для угловой части.

Угловая часть волновой функции также получается из (3.7.7):

$$-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\hat{\Lambda}Y(\theta,\varphi) = \lambda$$

$$\hat{\Lambda}Y(\theta,\varphi) + \lambda Y(\theta,\varphi) = 0 \tag{3.7.12}$$

Записывая явный вид оператора Лежандра (3.7.3), имеем:

$$\frac{1}{Sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(Sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)Y(\theta,\varphi) + \frac{1}{Sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y(\theta,\varphi) + \lambda Y(\theta,\varphi) = 0 \tag{3.7.13}$$

$$Y_\theta'' + ctg\theta Y_\theta' + \frac{1}{Sin^2\theta}Y_\varphi'' + \lambda Y = 0 \tag{3.7.14}$$

Получили уравнение для угловой части волновой функции $Y(\theta,\varphi)$ частицы в центрально-симметричном поле. *Уравнение для угловой части не зависит от конкретного вида потенциала $U(r)$ и для всех центральных полей имеет одно и то же решение*. Поэтому имеет смысл рассмотреть его решение в общем виде.