

## 2.5. Общие свойства движения в центральном поле

*Центральным* называется поле, в котором потенциальная энергия частицы зависит только от расстояния до силового центра и не зависит от направления радиуса вектора  $\mathbf{r}$ :  $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$ .

Задача о движении микрочастицы в постоянном центральном поле является трехмерной и требует решения стационарного уравнения Шредингера в частных производных. Однако сферическая симметрия гамильтониана позволяет кардинально упростить задачу.

Исследуем движение точечной частицы с массой  $m$  в центральном поле. Гамильтониан удобно представить в сферических координатах. Вспомогательный вид оператора Лапласа в сферической системе координат, имеем:

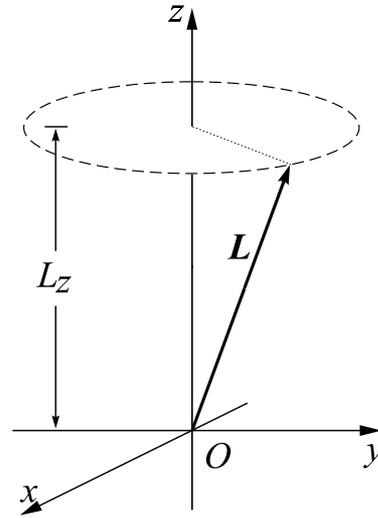


Рис. 2.5.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r). \quad (2.44)$$

Данная форма гамильтониана представляется наиболее удобной для исследования общих свойств движения в центральном поле.

Прежде всего, найдем интегралы состояния. *Полная энергия*  $E$  является интегралом состояния для всякого стационарного состояния. В сферической системе координат операторы  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и  $\hat{L}_z$  действуют только на *угловые переменные* (см. (2.29), (2.30)). Поэтому *специфически для центрального поля* интегралами состояния будут также  $\mathbf{L}^2$  и  $L_z$  вследствие коммутации соответствующих операторов с гамильтонианом (2.44). Таким образом, в центральном поле имеется три интеграла состояния. Число указанных интегралов состояния равно числу степеней свободы частицы. Все они независимы и измеримы совместно. Поэтому данные интегралы состояния образуют *полный набор*. Их достаточно для максимально полного описания движения частицы в центральном поле.

Стационарное уравнение Шредингера с гамильтонианом (2.44)

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (2.45)$$

является трехмерным дифференциальным уравнением в частных производных. Стандартным математическим методом разделения переменных все три переменные можно разделить. Здесь, однако, более

удобным будет отделение угловых переменных из *физических соображений*.

Поскольку операторы (2.44),  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  коммутируют друг с другом, у них есть общие собственные функции. Поэтому будем искать такие решения уравнения Шредингера (2.45), которые автоматически удовлетворяют и уравнениям (2.31), (1.50). Так как  $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$  — собственные функции и для  $\hat{L}^2$ , и для  $\hat{L}_z$ , решение (2.45) следует искать в виде:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi), \quad (2.46)$$

где  $R(r)$  — неизвестная *радиальная волновая функция*. Множитель  $r^{-1}$  введен для дальнейшего удобства (исключения первой производной в уравнении для  $R(r)$ ). При выборе функции  $\psi$  в виде (2.46) автоматически фиксируются определенные значения  $L^2$  и  $L_z$ .

После подстановки (2.46) в (2.45) и преобразований с учетом (2.31) приходим к *радиальному уравнению Шредингера* для функции  $R(r)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} R_{El}(r) + \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r). \quad (2.47)$$

По своей структуре оно является уравнением Шредингера для *более простого одномерного движения* этой частицы в поле с эффективной потенциальной энергией

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r), \quad (2.48)$$

отличающейся от  $V(r)$  дополнительным центробежным отталкиванием (рис. 2.6).

Эффективный потенциал (2.48) не зависит от магнитного квантового числа  $m$ , поэтому радиальная волновая функция в уравнении (2.47) определяется только *полной энергией и квадратом орбитального момента, но не его проекцией* (в уравнении (2.47) к функции добавлены соответствующие квантовые числа). Полная энергия, в свою очередь, тоже не будет зависеть от магнитного квантового числа, так что в *центральной поле все стационарные состояния*

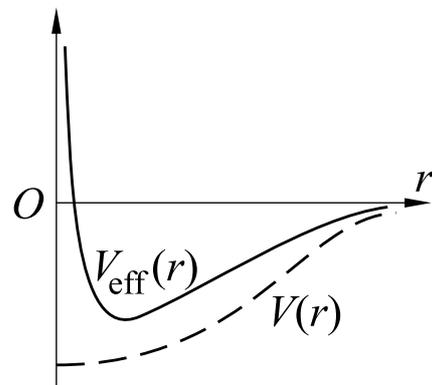


Рис. 2.6.

оказываются всегда вырожденными по величине  $L_z$  с кратностью  $2l + 1$ .

Важная роль величины  $L^2$  делает целесообразной классификацию стационарных состояний в центральном поле по величине орбитального квантового числа  $l$  (такие состояния называют иногда *орбиталями*). При этом используются *спектроскопические обозначения*. Так, например, состояния с  $l = 0$  называются s-состояниями, состояния с  $l = 1$  — p-состояниями и т.д. (см. табл. 2.1). Данные символы являются первыми буквами соответствующих английских терминов, используемых в описании оптических спектров.

Таблица 2.1

*Спектроскопические символы*

$l$	0	1	2	3	4	...
символ	s	p	d	f	g	...
расшифровка	sharp	principal	diffuse	fundamental	—	—

Все дальнейшее рассмотрение базируется теперь на уже известных свойствах одномерного движения.

Сформулируем, например, граничные условия к уравнению (2.47). Его особой точкой является  $r = 0$ . Поэтому для ограниченности полной волновой функции  $\psi(r, \theta, \varphi)$  в начале координат необходимо потребовать выполнение *первого* граничного условия (см. формулу (2.46), где в знаменателе стоит  $r$ )

$$\boxed{R_{El}(0) = 0.} \quad (2.49)$$

Данный факт согласуется с наличием центробежного отталкивания.

*Второе* граничное условие формулируется для случая  $r \rightarrow \infty$  и определяется характером одномерного движения. В случае *финитного* движения частица не может уйти на бесконечность, так что

$$\boxed{R_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0.} \quad (2.50)$$

В случае *инфинитного* движения условие (2.50) заменяется условием *конечности*, т.е. *ограниченности* решения при всех  $r$ .

Структура *энергетического спектра* определяется как видом потенциала  $V(r)$ , так и характером движения (финитное или инфинитное).

Условие ортонормировки для радиальных функций  $R_{El}(r)$  наиболее просто формулируется опять же с использованием аналогии эффективного потенциала (2.48) с потенциалом *одномерного движения*. Исходя

из свойств радиального уравнения Шредингера (2.47), получаем для финитного движения (дискретного спектра энергий)

$$\int_0^{\infty} R_{E_n', l}(r) R_{E_n, l}(r) dr = \delta_{E_n', E_n} \quad (2.51)$$

(в этом случае функции можно выбрать вещественными); для инфинитного движения (непрерывный спектр энергий)<sup>2</sup>

$$\int_0^{\infty} R_{E'l}(r) R_{El}(r) dr = \delta(E' - E). \quad (2.52)$$

Заметим также, что гамильтониан (2.44) не изменяется при *инверсии* системы координат ( $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$ ), так что интегралом состояния в центральном поле будет и *четность*. Однако, для заданного значения квадрата момента импульса четность не является независимой величиной, а однозначно определяется орбитальным квантовым числом  $l$  (см. (2.40)).

Таким образом, решение квантовомеханической задачи в центральном поле базируется на той же идее, что и в соответствующей классической задаче: вместо трехмерного исследуется более простое одномерное движение в эффективном потенциале. Наиболее существенное физическое различие состоит в том, что значения квантовых интегралов состояния образуют дискретный набор чисел.

Мы уже знакомы с волновой функцией свободного движения с определенным импульсом. Это волна де Бройля (1.4). Вместе с тем, существуют также состояния свободного движения с определенными энергией,  $L^2$  и  $L_z$ . Волновые функции таких состояний имеют следующий вид:

$$\Psi_{Elm_l}(\mathbf{r}) = A j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \varphi),$$

где  $k = p/\hbar, p = \sqrt{2mE}$ ,  $j_l(x)$  — сферическая функция Бесселя (см. приложение Г). Состояния с определенным импульсом и состояния с определенными  $E, L^2$  и  $L_z$  связаны друг с другом соотношением:

$$e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} = 4\pi \sum_{lm_l} i^l j_l(kr) Y_{lm_l}^*(\theta_p, \varphi_p) Y_{lm_l}(\theta, \varphi),$$

где углы  $\theta_p, \varphi_p$  задают направление вектора  $\mathbf{p}$ . Данное соотношение наглядно иллюстрирует совместную неизмеримость импульса и квадрата орбитального момента.

---

<sup>2</sup> Обратим внимание, что нормируется функция  $R_{El}(r)/r$  с весом  $r^2$ .