ЛЕКЦИЯ 14

Задача двух тел в квантовой механике. Движение в центральном поле. Атом водорода

14.1. Задача о движении частицы в центральном потенциале

Центральный потенциал симметричен относительно поворотов вокруг любой оси, в частности — вокруг оси z. Следовательно, при движении частицы в центральном потенциале должны сохраняться проекция на ось z момента количества движения $\hat{L}_z$ и квадрат момента количества движения $\hat{L}^2$.

Энергия частицы E также буде сохраняться. Таким образом, величины

$$\hat{L}_z, \quad \hat{L}^2, \quad E$$

составляют полный набор физических величин, определяющих состояние системы.

Решение уравнения Шредингера для движения в центральном поле будем искать в виде

$$\Psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{14.1}$$

, где $R(r)$ — радиальная составляющая волновой функции;

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — сферическая часть волновой функции.

На прошлой лекции было получено, что сферическая функция $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ является собственной функцией операторов $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$. Таким образом, независимо от потенциала угловая часть будет универсальна. Аналогом этого в классической механике является то, что движение в центральном поле всегда плоское.

Будем искать решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

где Ψ определяется выражением (14.1).

Подставляя выраженную таким образом волновую функцию Ψ в уравнение Шредингера, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}\right\}RY_{lm} + VRY_{lm} = ERY_{lm} \tag{14.2}$$

Ранее на лекциях было получено, что сферические функции являются собственными функциями угловой части оператора Лапласа:

$$-\Delta_{\theta,\varphi}Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm} \quad\Rightarrow\quad \Delta_{\theta,\varphi}Y_{lm} = -l(l+1)Y_{lm}$$

Раскрыв скобки в уравнении (14.2), получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)Y_{lm} - \frac{l(l+1)}{r^2}RY_{lm}\right\} + VRY_{lm} = ERY_{lm},$$

и, поскольку на Y_{lm} теперь можно сократить, получим уравнение только для радиальной части волновой функции (14.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R\right\} + V(r)R = ER,$$

Радиальную составляющую волновой функции удобно искать в виде

$$R(r)=\frac{u(r)}{r},$$

где $u(r)$ — некоторая функция r.

В этом случае

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{\frac{u(r)}{r}}{dr}\right)=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\cdot\left(\frac{du}{dr}\cdot\frac{1}{r}-\frac{u}{r^2}\right)\right)=$$
$$=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r\frac{du}{dr}-u\right)=\frac{1}{r^2}\left(r\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{du}{dr}-\frac{du}{dr}\right)=\frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2}$$

Следовательно, уравнение Шредингера примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\frac{u(r)}{r}\right\}+V(r)\frac{u(r)}{r}=E\frac{u(r)}{r},$$

и, сокращая на $1/_r$ и объединяя в левой части члены, пропорциональные $u(r)$, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2}+\left\{V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u=Eu. \tag{14.3}$$

Получившееся уравнение представляет собой аналог уравнения для движения частицы в одномерном случае, однако к потенциалу $V(r)$ появляется добавка

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \tag{14.4}$$

называемая **центробежным потенциалом**.

Таким образом, решение задачи о движении частицы в центральном поле необходимо искать в виде

$$\Psi=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

В этом уравнение движения частицы сведется к одномерному уравнению для функции $u(r)$, с **эффективным потенциалом**, который равен сумме исходного потенциала $V(r)$ и центробежного потенциала:

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

Как уже было сказано ранее, несмотря на произвольность центрального потенциала, угловая зависимость определяется сферическими функциями $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ универсально для всех центральных потенциалов. Аналогично этому в классической механике в любом центральном поле движение всегда происходит в некоторой плоскости.

На прошлой лекции было получено, что сферические функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ выражаются с помощью присоединенных полиномов Лежандра.

В классической механике уравнение движения имеет вид

$$\mu\ddot{\vec{r}}=-\vec{\nabla}V.$$

Умножив это уравнение векторно на $\vec{r}$, получим следующее уравнение:

$$\mu[\vec{r} \times \ddot{\vec{r}}] = 0, \tag{14.5}$$

поскольку градиент центрального потенциала сонаправлен с вектором $\vec{r}$.

Векторное произведение в уравнении (14.5) может быть записано следующим образом:

$$\mu[\vec{r} \times \ddot{\vec{r}}] = \frac{d}{dt}\mu[\vec{r} \times \mu\dot{\vec{r}}],$$

поскольку

$$\mu[\dot{\vec{r}} \times \mu\dot{\vec{r}}] = 0.$$

С другой стороны, по определению момента количества движения:

$$\mu[\vec{r} \times \mu\dot{\vec{r}}] = \vec{L} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\mu[\vec{r} \times \mu\dot{\vec{r}}] = \frac{d}{dt}\vec{L} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{L} = \text{const}.$$

Скалярное произведение момента количества движения и радиус-вектора $\vec{r}$ равно нулю:

$$\vec{L} \cdot \vec{r} = 0,$$

поскольку

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] \perp \vec{r}.$$

Следовательно, движение будет происходить в плоскости, перпендикулярной вектору момента количества движения $\vec{L}$ (см. рис. 14.1).

Пусть выбрана цилиндрическая система координат $K(r, \varphi, z)$. В этом случае энергию E можно записать следующим образом:

$$E = \frac{\mu}{2}\big(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^b igr), \tag{14.6}$$

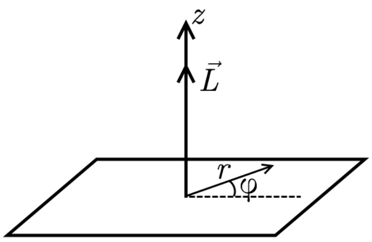

Рис. 14.1.

где $\dot{r}$ — радиальная скорость;

$r\dot{\varphi}$ — трансверсальная скорость.

С другой стороны, поскольку величина $\vec{L}$ сохраняется, то

$$L = \mu r \cdot r\dot{\varphi} = \mu r^2\dot{\varphi}. \tag{14.7}$$

Уравнения (14.6), (14.7) составляют систему уравнений для плоского движения в классической механике:

$$\begin{cases} E = \dfrac{\mu}{2}\big(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\big) \\ L = \mu r^2\dot{\varphi} \end{cases}$$

Выразив из второго уравнения системы $\dot{\varphi}$

$$\dot{\varphi} = \frac{L}{\mu r^2}$$

и подставив в первое, получим следующее выражение для энергии

$$E = \frac{\mu}{2}\dot{r}^2 + \frac{\mu}{2}\frac{r^2L^2}{\mu^2r^4} + V(r) = \frac{\mu\dot{r}^2}{2} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r). \tag{14.8}$$

В выражении (14.4)

$$\hbar^2 l(l+1) = L^2,$$

поэтому

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} = \frac{L^2}{2\mu r^2},$$

что в точности соответствует добавке (второму слагаемому), возникающему в (14.8) из-за наличия трансверсальной скорости.

Напомним метод решения задачи о движении частицы в центральном поле в классической механике. Выразив из выражения для энергии (14.8) величину $\dot{r}$, получим:

$$\dot{r} = \pm\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E - V(r) - \frac{L^2}{2\mu r^2}\right)} = \frac{d\vec{r}}{dt}. \tag{14.9}$$

Это позволяет получить уравнение, определяющее зависимость от времени радиус-вектора:

$$\frac{dt}{dr} = \pm\frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E - V(r) - \frac{L^2}{2\mu r^2}\right)}},$$

найти функцию

$$t = T(r),$$

и, записав функцию, обратную к ней, получить зависимость

$$r = r(t).$$

Затем, выразив из уравнения (14.6) $\dot{\varphi}$, получим:

$$\dot{\varphi} = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{L}{\mu\, r^2(t)}, \tag{14.10}$$

что позволяет получить функцию

$$\varphi = \varphi(t).$$

Поделив выражение (14.10) на (14.9), получим уравнение траектории:

$$\frac{d\varphi}{dr} = \pm\frac{\frac{L}{\mu r^2}}{\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E - V(r) - \frac{L^2}{2\mu r^2}\right)}} \quad \Rightarrow \quad \varphi = \Phi(r),$$

и, разрешая это уравнение, получим функцию

$$r = R(\varphi).$$

Рассмотрим подробнее уравнение (14.3). Расстояние r, очевидно лежит в следующих пределах:

$$0 \leqslant r < +\infty.$$

Рассмотрим поведение решения (14.3) на обоих концах этого интервала. Пусть вначале

$$r \to 0.$$

Будем считать, что при выполнении этого условия

$$V(r) < \frac{\text{const}}{r^{2-\varepsilon}}, \qquad r \to 0,$$

то есть потенциалом можно пренебречь по сравнению с центробежной энергией.

Тогда уравнение (14.3) принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}u = 0,$$

поскольку правой частью также можно пренебречь при малых r.

Получим дифференциальное уравнение второго порядка

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u = 0 \quad \Rightarrow \quad r^2\frac{d^2u}{dr^2} = l(l+1)u, \tag{14.11}$$

решение которого будем искать в виде:

$$u = cr^{\nu}.$$

Подставляя это решение в (14.11), получим:

$$\nu(\nu-1)r^2cr^{\nu-2} = l(l+1)cr^{\nu} \quad \Rightarrow \quad \nu(\nu-1) = l(l+1).$$

Их этого соотношение, не решая квадратное уравнение относительно ν легко видеть, что

$$\nu_1 = l+1, \qquad \nu_2 = -l.$$

Следовательно, решение уравнения (14.11) будет иметь следующий вид:

$$u \to c_1r^{l+1} + c_2\frac{1}{r^l}, \qquad r \to 0.$$

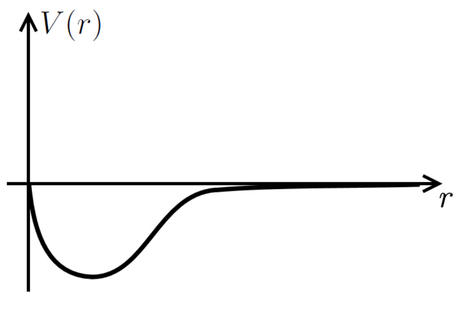

Рис. 14.2.

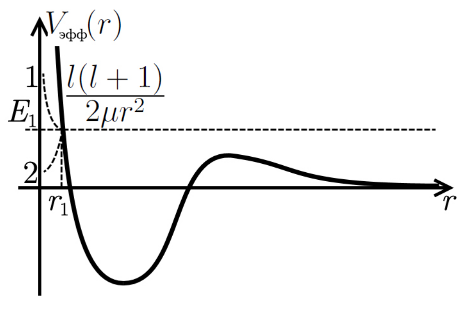

Рис. 14.3.

Второе слагаемое в этом выражении не имеет физического смысла, поскольку оно сингулярно в нуле при

$$l \geqslant 0 > -1,$$

поскольку, согласно выполненной замене переменных,

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}. \tag{14.12}$$

Всегда можно положить

$$c_2 = 0,$$

и, выбрав одно из решений, избежать сингулярности в начале координат.

Следовательно, вблизи начала координат

$$R(r) \sim r^l.$$

Пусть существует короткодействующий потенциал $V(r)$ (см. рис. 14.2). Вид эффективного потенциала в этом случае представлен на рисунке 14.3: при

$$r \to 0$$

он пропорционален r^{-2}, а на большом удалении от начала координат потенциал стремится к нулю:

$$V_{\text{эфф}} = 0.$$

Пусть есть частица с энергией

$$E_1 > 0.$$

В этом случае в неклассической области

$$r < r_1$$

существует два решения — экспоненциально растущее, соответствующее кривой 1 на рисунке 14.3, и экспоненциально падающее, соответствующее кривой 2 на этом же рисунке.

В дальнейшем будет получено, что если существует экспоненциально растущее решение, то оно растет по отношению к логарифму величины r, то есть зависимость от r — степенная. Падающее решение, соответствующее (14.12), затухает под центробежный барьер.

Для короткодействующего потенциала $V(r)$ центробежный потенциал вновь проявит себя на больших расстояниях, и, если энергия достаточно мала, то этот потенциал не позволит приблизиться на малые расстояния, на которых действует потенциал $V(r)$. Таким образом, для короткодействующих потенциалов центробежный потенциал ограничивает возможность взаимодействия с большими орбитальными моментами.

Пример 14.1. Рассмотрим случай, когда

$$V(r) = 0.$$

В этом случае эффективный потенциал равен центробежному (см. рис. 14.4). Пусть есть частица с некоторой энергией E. В этом случае, если рассматривать движение частицы как одномерное, частица, набегающая из зоны больших расстояний на потенциальный барьер, будет испытывать отражение в точке остановки A.

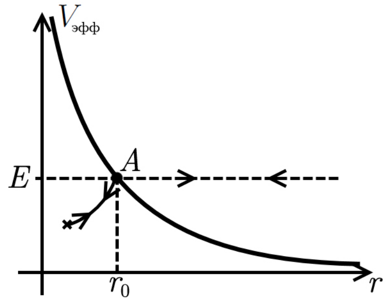

Рис. 14.4.

Пусть частица движется параллельно некоторой оси с некоторым прицельным расстоянием b (см. рис. 14.5). Если потенциал отсутствует, то частица движется свободно и, следовательно, расстояние до оси не изменяется. Расстояние до точки O,

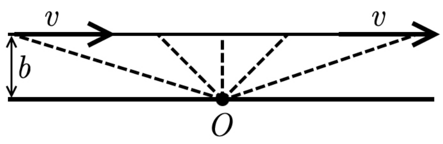

Рис. 14.5.

наоборот, вначале уменьшается, а затем, наоборот, увеличивается, то есть точка O соответствует точке остановки.

Легко проверить, что такое рассмотрение верное. Если прицельное расстояние равно b, то момент количества движения частицы выражается формулой

$$L = \mu b v,$$

и, следовательно, центральный и эффективный потенциал окажутся равными:

$$V_{\text{эфф}} = \frac{L^2}{2\mu r^2} = \frac{\mu^2 b^2 v^2}{2\mu r^2} = \frac{\mu b^2 v^2}{2r^2} = \frac{\mu v^2}{2}\frac{b^2}{r^2}.$$

В точке остановки A на рисунке 14.4 энергия частицы равна центробежному потенциалу, поэтому выполняется равенство:

$$E = \frac{\mu v^2}{2} = \frac{\mu v^2}{2}\frac{b^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{b^2}{r^2} = 1,$$

и, следовательно,

$$b^2 = r^2,$$

то есть равенство энергии частицы и эффективного потенциала достигается при некотором

$$r_0 = b.$$

С точки зрения квантовой механики, в одномерном случае это условие означает, что частица, дойдя до некоторой точки остановки с координатой r_0, затухает под барьер, затем отражается и распространяется в обратном направлении. Различие с классической задачей состоит в том, что в классической механике частица не может проникнуть под барьер.

Исследуем теперь поведение функции $R(r)$ на больших расстояниях. При этом потенциал приобретает значение V_0, не обязательно равное нулю:

$$r \to \infty, \qquad V(r) \to V_0.$$

Пренебрегая центральным потенциалом, получим, согласно (14.3), общий вид уравнения Шредингера в этом случае:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + V_0 u = Eu. \tag{14.13}$$

Легко видеть, что существует два различных случая, при которых решение будет принципиально отличаться. В первом случае, когда

$$E > V_0,$$

уравнение (14.13) принимает следующий вид:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k^2u = 0, \qquad k^2 = \frac{2\mu(E - V_0)}{\hbar^2} > 0.$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$u = A_1e^{ikr} + A_2e^{-ikr}.$$

Очевидно, что это решение можно выбрать так, чтобы оно было действительным. В этом случае никаких ограничений с физической точки зрения нет, то есть будет существовать, как говорилось ранее в примере 14.1, падающая волна

$$\Psi_{\text{пад}} \sim e^{-ikr}$$

и отраженная волна

$$\Psi_{\text{отр}} \sim e^{ikr}.$$

Совершенно другая ситуация наблюдается, когда

$$E < V_0.$$

В этом случае существуют два решения, одно из которых — экспоненциально растущее, а другое — экспоненциально падающее. Уравнение (14.13) в этом случае примет вид:

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \varkappa^2u = 0, \qquad \varkappa^2 = \frac{2\mu(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0.$$

Решение этого уравнения может быть записано в следующем виде:

$$u = A_1e^{-\varkappa r} + A_2e^{\varkappa r}. \tag{14.14}$$

Решение, пропорциональное $e^{\varkappa r}$, неприемлемо с физической точки зрения, однако в общем случае избавиться от него нельзя, поскольку при

$$r \to 0$$

уже была выбрана константа

$$c_2 = 0.$$

Коэффициенты A_1 и A_2 пропорциональны коэффициентам c_1 и c_2. В частности,

$$A_2 = \alpha_{21}(E)c_1 + \alpha_{22}(E)c_2, \tag{14.15}$$

поэтому, поскольку

$$c_2 = 0, \qquad c_1 \neq 0 \quad \Rightarrow \quad A_2 \neq 0$$

в общем случае.

Экспоненциально растущее решение неприемлемо хотя бы потому, что его нельзя нормировать на единицу.

Следовательно, для произвольной энергии существует математически верное, но физически неприемлемое решение. Решение (14.14) будет физически приемлемо, если в выражении (14.15)

$$\alpha_{21}(E_i) = 0.$$

В этом случае при дискретных значениях энергии

$$E_1, E_2, \ldots, E_i, \ldots$$

решение (14.14) будет иметь физический смысл.

Эта ситуация полностью совпадает с рассмотренной ранее на лекциях задачей о движении частицы в одномерном случае, когда было выдвинуто требование убывания к нулю функции на обоих концах интервала — требование «закрепления» волновой функции на обоих концах.

В радиальном случае закрепление происходит в нуле и на бесконечности. В этом случае при существовании дискретных энергий, отвечающих падающей на бесконечности волновой функции, — связанных состояний, уравнение (14.13) описывает как свободное движение, когда энергии больше потенциала на бесконечности, так и связанные состояния, возникающие, если энергия на бесконечности меньше потенциала V_0.

14.2. Задача двух тел в квантовой механике

Рассмотрим потенциал, отвечающий взаимодействию между частицами. «Закрепленный» в нуле потенциал появляется в том случае, если одна из частицы, например, обладает бесконечно большой массой по сравнению с другой частицей.

Пусть в системе, состоящей из двух частиц 1 и 2, введена система координат с началом в точке O. Радиус-векторы к частицам 1 и 2 обозначим соответственно $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$. Массы частиц 1 и 2 соответственно равны μ_1 и μ_2 (см. рис. 14.6).

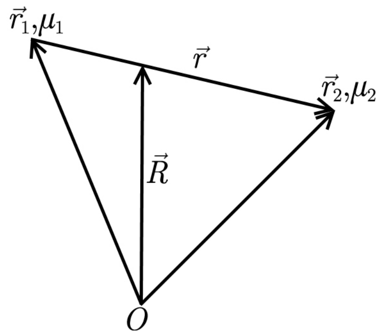

Рис. 14.6.

Гамильтониан системы определяется следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2\mu_1}\Delta_1 + \frac{\hbar^2}{2\mu_2}\Delta_2 + V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|), \qquad (14.16)$$

где $V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$ — потенциал, соответствующий взаимодействию между частицами.

Гамильтониан (14.16) можно разбить на две части следующим образом: введем переменные

$$\begin{cases} \vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \\ \vec{R} = \dfrac{\mu_1\vec{r}_1 + \mu_2\vec{r}_2}{\mu_1 + \mu_2}, \end{cases} \qquad (14.17)$$

где $\vec{r}$ соответствует расстоянию между частицами,

$\vec{R}$ — радиус-вектор центра тяжести системы.

Выразим операторы Лапласа Δ_1 и Δ_2 в (14.16) с помощью введенных переменных $\vec{r}$ и $\vec{R}$. Волновая функция

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

зависит, на самом деле, от шести переменных — трех координат вектора $\vec{r}_1$ и трех координат вектора $\vec{r}_2$.

Представим эту волновую функцию в виде:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(\vec{r}, \vec{R}).$$

Для этого найдем вначале частные производные:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial r_x}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial R_x}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x}(-1) + \frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\mu_1}{\mu_1+\mu_2}\right). \tag{14.18}$$

Аналогично можно показать, что

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial r_x}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial R_x}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\mu_2}{\mu_1+\mu_2}\right). \tag{14.19}$$

Частные производные второго порядка, следовательно, будут иметь следующий вид:

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial X}\frac{\mu_1}{\mu_1+\mu_2} + \frac{\partial^2}{\partial X^2}\frac{\mu_1^2}{(\mu_1+\mu_2)^2}. \tag{14.20}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial X}\frac{\mu_2}{\mu_1+\mu_2} + \frac{\partial^2}{\partial X^2}\frac{\mu_2^2}{(\mu_1+\mu_2)^2}. \tag{14.21}$$

Аналогично можно было бы записать выражения (14.18)– (14.21) для y_1, y_2 и z_1, z_2. Подставим все получившиеся выражения в кинетическую энергию в операторе Гамильтона — два первых слагаемых в уравнении (14.16). Тогда кинетическая энергия окажется равной:

$$\hat{H}_{\text{кин}} = \frac{1}{2\mu_1}\left\{\Delta_r - 2\vec{\nabla}_r\vec{\nabla}_R\frac{\mu_1}{\mu_1+\mu_2} + \Delta_R\frac{\mu_1^2}{(\mu_1+\mu_2)^2}\right\} + \\ + \frac{1}{2\mu_2}\left\{\Delta_r + 2\vec{\nabla}_r\vec{\nabla}_R\frac{\mu_2}{\mu_1+\mu_2} + \Delta_R\frac{\mu_2^2}{(\mu_1+\mu_2)^2}\right\}.$$

Раскрыв скобки в этом выражении, увидим, что слагаемые, пропорциональные произведению градиентов, сокращаются. Следовательно, собирая члены при операторах Лапласа, получим следующее выражение для кинетической энергии:

$$\hat{H}_{\text{кин}} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}\right)\Delta_r + \frac{1}{2}\frac{1}{\mu_1+\mu_2}\Delta_R,$$

поскольку

$$\frac{1}{2\mu_1}\frac{\mu_1^2}{(\mu_1+\mu_2)^2} + \frac{1}{2\mu_2}\frac{\mu_2^2}{(\mu_1+\mu_2)^2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\mu_1}{(\mu_1+\mu_2)^2} + \frac{\mu_2}{(\mu_1+\mu_2)^2}\right) = \frac{1}{2}\frac{1}{\mu_1+\mu_2}.$$

Легко выразить координаты частиц через расстояние между частицами и радиус вектор центра тяжести. Для этого, например, можно решить систему уравнений (14.17) относительно $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$.

Воспользуемся для этих целей более простым методом — геометрическим рассмотрением (см. рис. 14.7). Соотношение длин отрезков AC и CB обратно пропорционально соотношению масс, поэтому

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{\mu_2}{\mu_1+\mu_2}\vec{r} \qquad \vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{\mu_1}{\mu_1+\mu_2}\vec{r}.$$

Проверим эти соотношения. Разность $\vec{r}_2$ и $\vec{r}_1$

$$\vec{r}_2 - \vec{r}_1 = \frac{\mu_1}{\mu_1+\mu_2}\vec{r} - \left(-\frac{\mu_2}{\mu_1+\mu_2}\vec{r}\right) = \vec{r},$$

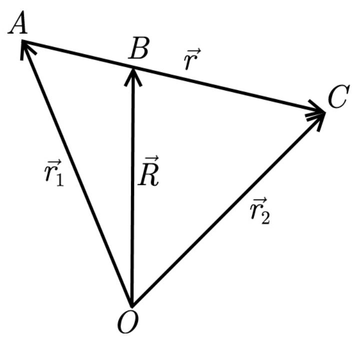

Рис. 14.7.

что соответствует построению.

Кинетическая энергия гамильтониана (14.16) переходит в этом случае в сумму двух членов — кинетической энергии относительного движения и кинетической энергии движения центра тяжести системы.

Введем приведенную массу частиц следующим образом:

$$\frac{1}{\mu_1}+\frac{1}{\mu_2}=\frac{1}{\mu} \quad\Rightarrow\quad \mu=\frac{\mu_1\mu_2}{\mu_1+\mu_2}, \tag{14.22}$$

а суммарную массу частиц, в свою очередь, обозначим следующим образом:

$$M=\mu_1+\mu_2. \tag{14.23}$$

Оператор гамильтона (14.16) в этом случае примет вид:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}}-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}}+V(r),$$

где второе слагаемое соответствует движению центра инерции, а остальные два — относительному движению.

Воспользуемся методом разделения переменных, известным из курса уравнений математической физики. Пусть в общем случае некоторый гамильтониан зависит от двух переменных:

$$\hat{H}=\hat{H}_1(\xi)+\hat{H}_2(\eta).$$

В этом случае частное решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi=E\Psi \tag{14.24}$$

можно представить в виде произведения двух функций:

$$\Psi=\varphi(\xi)\phi(\eta). \tag{14.25}$$

Действительно, подставляя волновую функцию в таком виде в уравнение Шредингера (14.24), получим:

$$\phi(\eta)\hat{H}_1(\xi)\varphi(\xi)+\varphi(\xi)\hat{H}_2(\eta)\phi(\eta)=E\varphi(\xi)\phi(\eta).$$

Поделив это выражение на $\varphi(\xi)\phi(\eta)$ и опуская обозначения зависимости функций от переменных, получим:

$$\frac{\hat{H}_1\varphi}{\varphi}+\frac{\hat{H}_2\phi}{\phi}=E.$$

В этом выражении первое слагаемое зависит только от переменной ξ, а второе — только от переменной η. Следовательно, их сумма будет равна константе только в том случае, когда каждое из них является константой.

Обозначив эти константы следующим образом:

$$\frac{\hat{H}_1\varphi}{\varphi}=E_1, \qquad \frac{\hat{H}_2\phi}{\phi}=E_2,$$

получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\hat{H}_1\varphi}{\varphi} = E_1 \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_1\varphi = E_1\varphi \\ \dfrac{\hat{H}_2\phi}{\phi} = E_2 \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_2\phi = E_2\phi \\ E = E_1 + E_2. \end{cases}$$

Таким образом, в случае, когда оператор Гамильтона представляет собой сумму двух операторов $\hat{H}_1(\xi)$ и $\hat{H}_2(\eta)$, то частное решение можно искать в виде (14.25), а энергия равна сумме энергий каждого из операторов Гамильтона.

В нашем случае

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + V(r) = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(r), \qquad \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} = \frac{\hat{P}^2}{2M},$$

где величины μ и M определяются соответственно соотношениями (14.22) и (14.23).

Для второго гамильтониана решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}_2\phi = E_2\phi$$

может быть сразу выписано, поскольку оно соответствует свободному движению.

Это решение, например, может иметь вид:

$$\psi = e^{\frac{i\vec{P}\vec{R}}{\hbar}}.$$

Для гамильтониана $\hat{H}_1$ решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}_1\varphi = E_1\varphi$$

есть решение задачи о движении частицы в центральном поле.

Таким образом, задача двух тел элементарно разбивается на две задачи. Решение одной из них — решение задачи о свободно движущемся центре тяжести, а решение другой — решение задачи о движении частицы с приведенной массой в центральном поле по отношению к расстоянию между частицами.

Надо понимать, что если, например

$$\mu_2 \gg \mu_1 \quad \Rightarrow \quad \mu_1 \simeq \mu,$$

то есть, например, для системы, состоящей из протона и электрона, в уравнении для центрального поля будет фигурировать только масса электрона, в то время как в уравнении движения центра тяжести масса будет примерно равна массе протона.

Таким образом, задачу двух тел удалось свести к задаче о движении одного тела, движущегося в центральном поле, и движения центра инерции.

Задачу трех тел, однако, нельзя свести к задаче двух тел, равно как и задачу о движении любого числа тел, большего трех. В механике задача трех тел решена только для частных случаев. Аналитического решения этой задачи не существует.

Аналитического решения для трех тел не существует и в квантовой механике. Например, задача об атоме гелия, состоящего из протона и двух электронов, не решена аналитически, однако ее численное решение известно с высокой степенью точности и подтверждается экспериментами.

Пример 14.2. Космический аппарат, с помощью которого была обнаружена угловая анизотропия реликтового излучения и, следовательно, получены данные о возрасте Вселенной и другие важные космологические данные располагался во второй лагранжевой точке Земли.

Двигаясь вокруг Солнца на расстоянии примерно $1{,}5 \cdot 10^6$ километров от Земли, космический аппарат располагался таким образом, что Земля всегда закрывала его от Солнца, поскольку при измерении температуры реликтового излучения точность должна была достигать 10^{-3} К.

14.3. Атом водорода

Исходя из предыдущих соображений, рассмотрим модель атом водорода, в котором протон и электрон связаны кулоновскими силами взаимодействия. На самом деле будем рассматривать не только атом водорода, но водородоподобный атом, ядро которого может состоять из нескольких нуклонов.

Гамильтониан водородоподобного атома имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \tag{14.26}$$

где μ — приведенная масса.

Эффективный потенциал, следовательно, имеет вид:

$$V_{\text{эф}} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

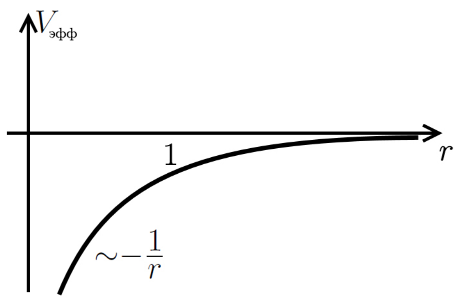

Рис. 14.8.

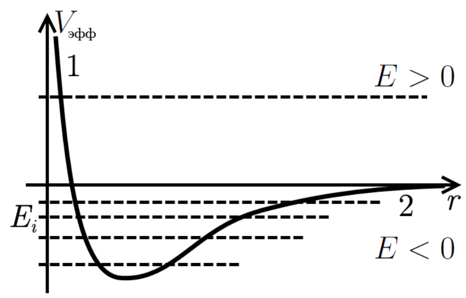

Рис. 14.9.

Вид эффективного потенциала при

$$l = 0$$

представлен на рисунке 14.8.

При

$$l = 1, 2, \ldots$$

вид эффективного потенциала принципиально другой (см. рис. 14.9).

При малых r центробежный потенциал растет быстрее, чем падает кулоновский, поэтому

$$V_{\text{эф}} > 0.$$

С другой стороны, при увеличении r эффективный потенциал резко падает (участок 1 на рисунке 14.9), а при больших значениях r кулоновский потенциал падает медленнее, чем центробежный, поэтому эффективный потенциал стремится к нулю слева (участок 2 на рисунке 14.9).

Соединив эти кривые, получим общий вид эффективного потенциала. Если энергия

$$E > 0,$$

то будут существовать несвязанные решения, описывающие движение несвязанного электрона, испытывающего рассеяния на ядре.

В области отрицательных энергий

$$E < 0,$$

как было показано ранее, могут существовать только дискретные уровни энергии.

На следующей лекции будут получены энергии этих уровней. При решении любой задачи необходимо выбрать естественные для этой задачи переменные, то есть такие переменные, которые позволяют ввести безразмерные величины.

Атомные единицы могут быть введены следующим образом: рассмотрим размерность обоих слагаемых оператора Гамильтона (14.26). Поскольку

$$[p] = \left[\frac{\hbar}{L}\right],$$

то

$$\left[\frac{\hbar^2}{\mu L^2}\right] = \left[\frac{Ze^2}{L}\right].$$

Из этого соотношения несложно определить размерность длины:

$$[L] = \left[\frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}\right].$$

Боровским радиусом при

$$Z = 1$$

называется величина

$$a_{\text{Б}} = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0{,}5 \cdot 10^{-8} \text{ см}.$$

Размерность энергии должна совпадать с размерностью любой из частей потенциала, поэтому

$$[E] = \left[\frac{Ze^2}{L}\right] = \left[\frac{Ze^2}{\hbar^2} \cdot \mu Z e^2\right] = \left[\frac{(Ze^2)^2 \mu}{\hbar^2}\right].$$

При

$$Z = 1$$

характерная энергия оказывается равной

$$E_0 \simeq 27 \text{ эВ}$$