Шевчук Інна,
студентка V курсу, спеціальність «Фізика та математика»
Науковий керівник – ***Грищук В. В.,***
кандидат фізико-математичних наук, доцент

РУХ ЧАСТИНКИ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИМЕТРИЧНОМУ ПОЛІ

Центрально-симетричним називають таке потенціальне поле, в якому потенціальна енергія частинки залежить лише від відстані до силового центру [2]. Якщо взаємодію двох частинок можна описати потенціалом

$$U = U(|\vec{r_1} - \vec{r_2}|) \qquad (1),$$

де r_1 та r_2 координати частинок з масами m_1 і m_2, то задача про рух таких частинок в квантовій механіці, як і в класичній, зводиться до задачі про рух частинки в центрально-симетричному полі. Гамільтоніан такої системи:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(|\vec{r_1} - \vec{r_2}|) \qquad (2),$$

де $\hat{p}_1 = -i\hbar\nabla_1, \hat{p}_2 = -i\hbar\nabla_2$.

Ввівши нові змінні, а саме, радіус-вектори центра мас та взаємної відстані гамільтоніан перепишемо у вигляді:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \qquad (3),$$

де $\hat{P}_1 = -i\hbar\nabla_R$ – оператор імпульсу центра мас, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ - оператор імпульсу відносного руху частинок, $M = m_1 + m_2$, $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ – зведена маса, $r = |\vec{r_1} - \vec{r_2}|$.

Отже, гамільтоніан складається з двох незалежних частин: перший доданок є оператором кінетичної енергії системи як цілого й описує вільний рух системи центра мас з хвильовою функцією частинки φр(R), два інші доданки описують відносний рух частинок із хвильовою функцією $\psi(r)$ [1]. Повна хвильова функція є їхнім добутком. Тому підстановка цього виразу в стаціонарне рівнянні Шредінгера $\widehat{H}\psi = E\psi$ приводить до рівняння для однієї частинки маси m з координатою r, що рухається в полі $U = U(r)$:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right\}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (4),$$

внаслідок сферичної симетрії потенціалу, зручно перейти від декартових координат x, y, z до сферичних r, θ, φ. В нових координатах вираз для лапсасіана матиме вигляд:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad (5).$$

Вираз в квадратних дужках – оператор квадрата моменту кількості руху $\hat{L}^2$ у сферичних координатах. Рівняння Шредінгера матиме вигляд:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hat{L}^2}{2mr} + U(r)\right\}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (6).$$

Змінні в рівнянні розділяються, і, відповідно до цього, хвильові функції зображаються як добуток функції $R(r)$, яка залежить лише від r, на хвильову функцію $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$, що залежить лише від кутових змінних і є власною функцією операторів $\hat{L}^2$ та $\hat{L}_z$ [3].

$$\psi(r) = R(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)(7),$$

де $R = R(r)$ – радіальна функція.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R + U(r)R = ER \qquad (8).$$

(8) - радіальне рівняння Шредінгера, для якого умова нормування:

$$\int_0^\infty r^2 R^2(r) = 1.$$

Після підстановки $rR(r) = \chi(r)$ отримаємо одновимірне рівняння Шредінгера:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + U_l(r)\right\}\chi = E\chi \qquad (9),$$

З ефективною потенціальною енергією $U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ за умови, що $0 \le r < \infty$. Другий доданок у цьому виразі – відцентрова енергія, яка має відштовхувальний характер і не дозволяє частинці впасти на силовий центр. Функція χ нормується без вагового множника:

$$\int_0^\infty \chi^2(r)dr = 1.$$

Дослідивши поведінку функції χ на малих і великих відстанях, отримаємо, що при $r \to 0\chi = const * r^{l+1}$, а при $r \to \infty\chi \sim \exp\left[-r\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}\right]$.

Отже, для зв'язаних станів з урахуванням поведінки функції χ на малих та великих відстанях радіальну функцію записуємо у вигляді:

$$R(r) = r^l e^{-r\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}}\omega(r) \qquad (10).$$

Такий запис забезпечує необхідну поведінку функції R на границях області значень r, $0 \le r < \infty$. Функція $\omega(r)$відповідає за характер радіальної функції в області проміжних значень r, який, зрозуміло, диктується конкретним виглядом потенціальної енергії $U = U(r)$.

Дуже важливим випадком руху в центрально-симетричному полі являється рух в кулонівському полі, де потенціальна енергія $U = -\frac{\alpha}{r}$.

Рівняння (8) для радіальних функцій матиме вигляд:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{\alpha}{r}\right)R = 0 \quad (11).$$

В якості одиниць вимірювання маси, довжини і часу виберемо відповідно $m, \frac{\hbar^2}{m\alpha}, \frac{\hbar^3}{m\alpha^2}$ [4]. Рівняння (11) в нових одиницях набуде вигляду:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{r}\right)R = 0 \qquad (12)$$

Замість параметра E і змінної r введемо нові величини $n = \frac{1}{\sqrt{-2E}}, \rho = \frac{2r}{n}$

Після підстановки нових величин рівняння (12) набуде вигляду:

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0. \qquad (13)$$

При малих ρ розв'язок пропорційний ρ^l. Для вияснення асимптотичної поведінки R при великих ρ опускаємо члени з $\frac{1}{\rho}$ і $\frac{1}{\rho^2}$, отримуємо рівняння $R'' = \frac{R}{4}$, звідки $R = e^{-\rho/2}$.

Отже, $R = \rho^l e^{-\rho/2}\omega(\rho)$, а рівняння (13) набуде вигляду:

$$\rho\omega'' + (2l + 2 - \rho)\omega' + (n - l - 1)\omega = 0(14)$$

З рівняння (14) можна зробити висновок, що число n повинно бути цілим і додатнім, а число l повинно задовольняти умові $n \geq l + 1$.

Література

1. Савельев И. В. Основы теоретической физики: квантовая механика / Савельев И. В – М. : Гл. ред. физ-матем лит-ры изд-ва «Наука», 1977. – Т. II.
2. Ландау Л. Д. Теоретическая фізика: квантовая механика (нерелятивистская теория) / Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. – [6-е изд.]. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2004. – Т. III.
3. Вакарчук І. О. Квантовамеханіка / І. О. Вакарчук. – [3-тє вид., доп.]. – Львів : ЛНУ іменіІвана Франка, 2007.
4. Елютин П. В. Квантовая механика / Елютин П.В., Кривченков В.Д. – М. : Наука, 1976.