ЛЕКЦИЯ 6

ОПЕРАТОР НА МОМЕНТА НА ИМПУЛСА. ДВИЖЕНИЕ НА ЧАСТИЦА В СФЕРИЧНОСИМЕТРИЧНО ПОЛЕ

1. Оператор на момента на импулса

В класическата механика моментът на импулса (моментът на количеството на движение) се определя така:

$$\vec{L} = \mathrm{r} \times \vec{p} \ ,$$

където r е радиус-вектора (определен спрямо някаква точка O) на частица с импулс $\vec{p}$.

В квантовата механика, съгласно Постулат 2, ***операторът на момента на импулса*** е

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\mathrm{r}} \times \hat{\vec{p}} \ . \qquad (7,1)$$

Операторите на проекциите на момента на импулса върху съответните координатни оси, съгласно (7,1), са

$$\hat{L}_x = \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \qquad (7,2а)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \qquad (7,2б)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \qquad (7,2в)$$

Операторът на квадрата на момента на импулса е

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \ . \qquad (7,3)$$

1.1 Комутационни съотношения

Операторите на различните проекции на момента на импулса не комутират помежду си (вж. (2,53)) и, следователно, $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$ не могат едновременно да имат определени стойности с изключение на състоянието, в което моментът на импулса е нула, т.е. $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = \langle L_z \rangle = 0$. За пресмятане, например, на комутатора $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right]$ трябва да отчетем, че операторите на разноименните координати и операторите на разноименните компоненти на импулса комутират помежду си, а операторите на едноименните такива – не комутират и удовлетворяват съотношенията (2,52).

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = (\hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y)(\hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z) - (\hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z)(\hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y) =$$
$$= \hat{y}\,\hat{p}_x(\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\,\hat{p}_z) - \hat{x}\,\hat{p}_y(\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\,\hat{p}_z) = i\hbar(\hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z\ .$$

От последното равенство, чрез циклична замяна на индексите x, y и z , се получават още две аналогични равенства. Така получаваме следните комутационни съотношения за операторите на компонентите на момента на импулса :

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z\ , \qquad (7{,}3а)$$

$$\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x\ , \qquad (7{,}3б)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = \hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y\ , \qquad (7{,}3в)$$

Лесно може да се установи, че всеки от операторите на компонентите на момента на импулса комутира с квадрата на момента на импулса :

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}^2\right] = \hat{L}_x\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_x = 0\ , \qquad (7{,}4а)$$

$$\left[\hat{L}_y, \hat{L}^2\right] = \hat{L}_y\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_y = 0\ , \qquad (7{,}4б)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}^2\right] = \hat{L}_z\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_z = 0\ . \qquad (7{,}4в)$$

Нека да установим, например, (7,4а). Операторите $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_x^2$ очевидно комутират. Прибавяме и изваждаме в дясната част на (7,4а) комбинациите $\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z$. Изнасяме $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$ пред и зад скоби. Така получаваме :

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}^2\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_y^2\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{L}_z^2 - \hat{L}_z^2\hat{L}_x =$$
$$= \hat{L}_y(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x) + (\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x)\hat{L}_y + \hat{L}_z(\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x) + (\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x)\hat{L}_z =$$
$$= i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z = 0\,.$$

От комутационните съотношения (7,4) следва, че всяка от проекциите и квадрата на момента на импулса могат да бъдат измерени едновременно в състояние, което се явява обща собствена функция на оператора на съответната проекция и $\hat{L}^2$.

1.2. Собствени стойности и собствени функции на $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$

Нека решим уравненията за собствините стойности и собствените функции на операторите $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$, т.е.

$$\hat{L}_z \Psi = L_z \Psi \ , \tag{7,5}$$

и

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \Psi \ . \tag{7,6}$$

За решаването на тези две уравнения е удобно да преминем в сферични координати:

$$\left| \begin{array}{l} x = r\sin\theta\cos\varphi \,, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi \,, \quad z = r\cos\theta \,; \\ \qquad 0 < r < \infty \,, \quad 0 \le \theta \le \pi \,, \quad 0 \le \varphi < 2\pi \,. \end{array} \right. \tag{7,7}$$

Сферичните координати се изразяват чрез декартовите по следния начин:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \ , \quad \theta = \arccos\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \ , \quad \varphi = \mathrm{arctg}\frac{y}{x} \cdot \tag{7,8}$$

Диференцираме r, θ и φ по x, y и z :

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi \,, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{xz}{r^2\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r} \,,$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\sin\varphi \,, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{yz}{r^2\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r} \,,$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta \,, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{r^2} = -\frac{\sin\theta}{r} \,,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \,,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \,,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \,.$$

Като използваме намерените производни, получаваме:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \ , \tag{7,9а}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \ , \tag{7,9б}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \tag{7,9в}$$

Заместваме (7,7) и (7,9) в (7,2) и получаваме операторите на проекциите на момента на импулса върху декартовите оси, изразени в сферични координати :

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot g\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{7,10а}$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot g\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{7,10б}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\cdot \tag{7,10в}$$

За да напишем оператора $\hat{L}^2$ в сферични координати е удобно първо да го представим във вида

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) - i(\hat{L}_y\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y) + \hat{L}_z^2 =$$

$$= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) - \hbar\hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \,. \tag{7,11}$$

Заместваме (7,10) в (7,11) и, след несложни пресмятания, получаваме

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} \,, \tag{7,12}$$

където $\Delta_{\theta,\varphi}$ е тази част от оператора на Лаплас в сферични координати, която зависи от ъгловите променливи θ и φ . Очевидно, операторът $\hat{L}^2$, изразен от (7,12), комутира с оператора $\hat{L}_z$, изразен от (7,10в), което доказахме и по друг начин преди това.

Тъй като операторите (7,10) и (7,12) действат само на функции, зависещи от θ и φ , то вълновата функция е достатъчно да се разглежда в зависимост само от тези ъгли, т.е.

$$\Psi = \Psi(\theta,\varphi) \,. \tag{7,13}$$

Уравнението за собствените функции и собствените стойности на оператора $\hat{L}_z$ (7,5) , съгласно (7,10в), има вида

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = L_z\Psi \,. \tag{7,14}$$

Разделяме променливите в това уравнение чрез полагането

$$\Psi(\theta,\varphi) = \Xi(\theta)\Phi(\varphi) \tag{7,15}$$

и като интегрираме получаващото се уравнение за $\Phi(\varphi)$, намираме

$$\Phi(\varphi) = C\,\mathrm{e}^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} \; . \tag{7,16}$$

Необходимо е функцията $\Phi(\varphi)$ да удовлетворява стандартните изисквания – да бъде непрекъсната, крайна и еднозначна в целия интервал на изменение на променливата φ . Очевидно е, че първите две изисквания се удовлетворяват, а третото ще бъде удовлетворено, ако е изпълнено

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \; . \tag{7,17}$$

Като имаме предвид (7,16), от последното равенство получаваме

$$\mathrm{e}^{i\frac{L_z}{\hbar}2\pi} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{L_z}{\hbar} = m\,, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \; .$$

Следователно, проекцията на момента на импулса върху оста Oz може да приема само дискретни стойности

$$L_z = m\hbar\,, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \; . \tag{7,18}$$

Числото m се нарича ***магнитно квантово число***.

Собствените функции на оператора $\hat{L}_z$ (7,16), с отчитане на (7,18), са нормирани на единица с условието

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi)\Phi_{m'}(\varphi)\, d\varphi = \delta_{mm'} \; . \tag{7,19}$$

Те имат вида

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\varphi} \; . \tag{7,20}$$

Уравнението за собствените функции и собствените стойности на оператора $\hat{L}^2$ (7,6), съгласно (7,12), има вида

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2}\Psi = 0 \; . \tag{7,21}$$

Полагайки (7,15) в (7,21), с отчитане на (7,20), получаваме диференциалното уравнение за функцията $\Xi(\theta)$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Xi}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Xi = 0 \; , \tag{7,22}$$

където

$$\lambda = \frac{L^2}{\hbar^2} \cdot \qquad (7,23)$$

След диференциране в първия член на (7,22), имаме

$$\frac{d^2\Xi}{d\theta^2} + \cot g\theta \frac{d\Xi}{d\theta} + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right)\Xi = 0 \ . \qquad (7,24)$$

Тук правим смяна на променливите с полагането $\cos\theta = \xi$:

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d}{d\xi}\frac{d\xi}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{d\xi} \, ,$$

$$\frac{d^2}{d\theta^2} = -\cos\theta \frac{d}{d\xi} - \sin\theta \frac{d\xi}{d\theta}\frac{d^2}{d\xi^2} = -\cos\theta \frac{d}{d\xi} + \sin^2\theta \frac{d^2}{d\xi^2} = -\xi \frac{d}{d\xi} + (1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2} \cdot$$

Тогава уравнението (7,24) приема вида:

$$(1-\xi^2)\frac{d^2\Xi}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\Xi}{d\xi} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2} \right)\Xi = 0 \, , \quad -1 \le \xi \le 1 \ . \qquad (7,25)$$

Уравнението (7,25) притежава особени точки $\xi = \pm 1$. Затова търсим решението му от вида

$$\Xi = (1-\xi^2)^\gamma \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \ .$$

За да установим на колко е равно γ, правим смяна на променливата с полагането $\xi = z - 1$, което води до замяна на особената точка $\xi = -1$ с особената точка $z = 0$. След разделяне на диференциалното уравнение (7,25) на $1-\xi^2$ и извършване на указаната смяна на променливата, получаваме

$$\frac{d^2\Xi}{dz^2} - \frac{2(z-1)}{z(2-z)}\frac{d\Xi}{dz} + \left(\frac{\lambda}{z(2-z)} - \frac{m^2}{z^2(2-z)^2} \right)\Xi = 0 \ . \qquad (7,26)$$

Търсим решение на това уравнение от вида

$$\Xi = z^\gamma \left(b_o + b_1 z + b_2 z^2 + \cdots \right) \, , \qquad (7,27)$$

като $\gamma \ge 0$. При $z \to 0$ в (7,27) преобладава члена $z^\gamma b_o$. Като поставим този член в (7,26), отчетем, че $z \to 0$ $(z-1 \approx -1$ и $2-z \approx 2)$ и приравним сумарния коефициент пред $z^{\gamma-2}$ на нула, имаме

$$\gamma(\gamma-1) + \gamma - \frac{m^2}{4} = 0 \, ,$$

откъдето

$$\gamma = \frac{|m|}{2}. \qquad (7,28)$$

Същата стойност за γ се получава, ако заменим особената точка $\xi = 1$ с особената точка $z = 0$, полагайки $\xi = z + 1$. Така, ако отчетем едновременно и двете особени точки $\xi = \pm 1$, то решението на (7,25) можем да търсим във вида

$$\Xi(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \equiv (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} v(\xi) \ . \qquad (7,29)$$

След заместване на (7,29) в (7,25), приведение на подобните членове и съкращаване на $(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}$, получаваме следното уравнение за функцията $v(\xi)$:

$$(1-\xi^2)v'' - 2\xi(|m|+1)v' + \left(\lambda - |m| - |m|^2\right)v = 0 \ . \qquad (7,30)$$

Заместването на реда

$$v = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \qquad (7,31)$$

в (7,30) дава рекурентна формула за коефициентите a_k :

$$a_{k+2} = \frac{(k+|m|)(k+|m|+1)-\lambda}{(k+1)(k+2)} a_k \ . \qquad (7,32)$$

От тук се вижда, че при $k \to \infty$, $\frac{a_{k+2}}{a_k} \to 1$ и сходимостта на реда, чията сума е $v(\xi)$, е под съмнение. По-подробни изследвания на реда показват, че той е разходящ. Изход от тази ситуция е параметърът λ да се подбере така, че степенният ред (7,31) да се превърне в полином. От (7,32) се вижда, че ако $\lambda = l(l+1)$, където $l = 0, 1, 2, \dots$, то редът (7,31), при фиксирани l и $|m|$, се превръща в полином от максимална степен $k_{\max} = l - |m|$. Всички коефициенти на този полином могат да се определят по рекурентната формула (7,32) чрез a_o, ако $a_1 = 0$ или чрез a_1 – ако $a_o = 0$. Коефициентите a_o и a_1 могат да се определят от условието за нормировка. Отчитайки, че $\lambda = l(l+1)$, от (7,23) получаваме

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2. \qquad (7,33)$$

Числото l се нарича ***орбитално квантово число***. Така, собствените стойности на оператора на квадрата на момента на импулса са дискретни.

Да разгледаме полинома $v(\xi) \equiv v_l^{|m|}$ (степента на полинома е $l - |m|$). Ще установим връзка между полиномите $v_l^{|m|}$ и $v_l^{|m|+1}$. За тази цел диференцираме (7,30) и означаваме $v' = u$. Така получаваме

$$(1-\xi^2)\, u'' - 2\xi\,(|m|+2)\, u' + \left[\lambda - (|m|+1) - (|m|+1)^2\right] u = 0 \ . \qquad (7{,}34)$$

Уравнението (7,34) се различава от (7,30) по това, че в него вместо $|m|$ имаме $|m|+1$. От тук следва, че

$$v_l^{|m|+1} = \frac{dv_l^{|m|}}{d\xi} \qquad (7{,}35)$$

и

$$v_l^{|m|} = \frac{d^{|m|} v_l^{|m|=0}}{d\xi^{|m|}} \ . \qquad (7{,}36)$$

Рекурентната формула (7,32) за коефициентите на полинома $v_l^{|m|=0}$ има вида

$$a_{k+2} = \frac{(k-l)(k+l+1)}{(k+1)(k+2)}\, a_k \ . \qquad (7{,}37)$$

Полином от степен l , чиито коефициенти се подчиняват на рекурентната формула (7,37), е известен като полином на Лежандър $P_l(\xi)$ [7,15]. Формулата (7,37) определя $P_l(\xi)$ с точност до произволен константен множител, който се намира като наложим на $P_l(\xi)$ условието

$$P_l(\xi = 1) = 1 \ . \qquad (7{,}38)$$

Тогава (вж. Приложение 3)

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l\, l!} \frac{d^l (\xi^2 - 1)^l}{d\xi^l} \ . \qquad (7{,}39)$$

Ще запишем полинома (7,36) във вида

$$v_l^{|m|} = N_{l\,m} \frac{d^{l+|m|} P_l(\xi)}{d\xi^{l+|m|}} \ , \qquad (7{,}40)$$

където $N_{l\,m}$ е нормировъчна константа, а $\xi = \cos\theta$.

Така, общите собствени функции на операторите $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$, както се вижда от разглеждането до тук, могат да се запишат във вида

$$\Psi_{l\,m}(\theta\,,\,\varphi) = \Xi_{l\,|m|}(\theta)\ \Phi_m(\varphi) \equiv N_{l\,m} (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|} P_l(\xi)}{d\xi^{l+|m|}}\ \mathrm{e}^{i\,m\,\varphi} \equiv$$

$$\equiv N_{l\,m} P_l^m(\xi)\, \mathrm{e}^{i\,m\,\varphi} \ , \qquad (7{,}41)$$

където $P_l^m(\cos\theta)$ са присъединени функции на Лежандър. Те могат да бъдат нормирани, като се използва тяхната ортогоналност (вж. Приложение 3):

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(\xi) P_{l'}^m(\xi)\, d\xi = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'} \tag{7,42}$$

или като отчетем, че $\xi = \cos\theta$,

$$\int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^m(\cos\theta) \sin\theta\, d\theta = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'} \ . \tag{7,43}$$

Произведението от ортогоналните функции $\Phi_m(\varphi)$ и $\Xi_{l|m|}(\theta)$ определя сферичните функции на Лаплас $Y_l^m(\theta, \varphi)$ (вж. Приложение 3). Така

$$\Psi_{lm}(\theta, \varphi) \equiv Y_l^m(\theta, \varphi) \ . \tag{7,44}$$

Функциите $Y_l^m(\theta, \varphi)$ са определени за всяка точка с ъглови координати θ и φ , т.е. за всяка точка от сферична повърхнина с център началото на координатната система. С отчитане на съответните нормировъчни множители (вж. (7,20) и (7,43)) намираме нормировъчния множител N_{lm} . Така, нормираните сферични функции (собствените функции на операторите $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$) имат вида:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-m)!\,(2l+1)}{(l+m)!\,4\pi}} P_l^m(\cos\theta)\, \mathrm{e}^{im\varphi} . \tag{7,45}$$

С използване на нормировките (7,19) и (7,43) се показва, че сферичните функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$ са ортонормирани върху единичната сфера:

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \left(Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi)\right)^* Y_l^m(\theta, \varphi) \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{l_1 l}\delta_{m_1 m} \ . \tag{7,46}$$

Ортонормираната система от сферични функции притежава свойството пълнота, т.е. всяка функция $F(\theta, \varphi)$, дефинирана върху сфера, може да се представи като двоен ред по сферични функции, наречен ред на Лаплас

$$F(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_l^m Y_l^m(\theta, \varphi) \ , \tag{7,47}$$

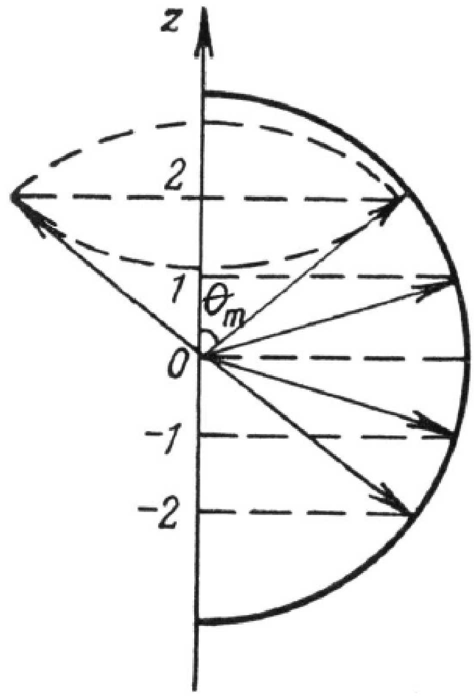
където

$$C_l^m = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} F(\theta, \varphi)\left(Y_l^m(\theta, \varphi)\right)^* \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \ . \tag{7,48}$$

1.3. Пространствено квантуване

Собствените стойности L^2 и L_z се определят от квантовите числа (вж. (7,33) и (7,18)): орбитално l и магнитно m, между които има връзка. Тъй като минималната степен на полинома $v_l^{|m|}$ е $k_{\min} = 0$, то следва $l - |m| \geq 0$, откъдето $|m| \leq l$ или $-l \leq m \leq l$, т.е. при фиксирано l квантовото число m може да приема $2l+1$ стойности : $m = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$. Така, при зададена стойност l , моментът на импулса има $2l+1$ възможни дискретни ориентации спрямо оста Oz ("***пространствено квантуване***"). Косинусите на възможните ъгли между момента на импулса и оста Oz се дават с формулата (фиг. 7.1 – $l = 2, \quad m = -2, -1, 0, 1, 2$)

$$\cos\theta_m = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \cdot \qquad (7,49)$$



фиг. 7.1

Доколкото стойностите на проекциите L_x и L_y на момента на импулса не могат едновременно с L_z да бъдат точно определени, дотолкова посоката на вектора $\vec{L}$ също не може да бъде точно определена. По аналогия с класическата механика, изхождайки от формула (7,49), може да се говори за прецесия на вектора $\vec{L}$ около оста Oz под ъгъл θ_m (вж. фиг. 7.1).

2. Движение на частица в сферичносиметрично поле (поле на централни сили)

2.1. Общи свойства на движението на частица в сферичносиметрично поле. Уравнение на Шрьодингер за радиалната част на вълновата функция

Стационарните състояния на частица, движеща се в сферичносиметрично поле, се описват от уравнението на Шрьодингер с оператор на Хамилтон

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \ , \qquad (7,50)$$

където $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ е разстоянието между частицата и центъра на полето. Отчитайки симетрията на полето, решението на уравнението на Шрьодингер следва да се търси в сферични координати. Тогава (7,50) ще има вида

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\Delta_{\theta,\varphi}+U(r)\ . \tag{7,51}$$

От (7,51) следва, че операторът на квадрата на момента на импулса $\hat{L}^2=-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}$ (вж. (7,12)) и операторът на проекцията на момента на импулса върху произволна ос Oz – $\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ (вж. (7,10в)), комутират с $\hat{H}$. Следователно, системи, които се описват с оператора на Хамилтон (7,51), могат да се намират в стационарни състояния с определена енергия, определена стойност на квадрата на момента на импулса и определена стойност на проекцията на момента на импулса върху произволна ос. Вълновите функции, описващи тези състояния, се явяват едновременно собствени функции на операторите $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$. Времевата зависимост на вълновите функции на стационарните състояния се характеризира с множителя $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ (вж. Лекция 3), където E е енергията на системата.

Така, при определяне на състоянието на частица, движеща се в централно поле, е необходимо да намерим съвместните решения на трите уравнения :

$$\hat{H}\Psi=E\Psi\ ,\qquad \hat{L}^2\Psi=L^2\Psi\ ,\qquad \hat{L}_z\Psi=L_z\Psi\ , \tag{7,52}$$

където в първото уравнение $\hat{H}$ има вида (7,51). Установихме, че при определени дискретни стойности на $L^2=l(l+1)\hbar^2$ и $L_z=m\hbar$ $(l=0,1,\ldots;\ m=-l,\ldots,0,\ldots,l)$, решенията на последните две уравнения се явяват сферичните функции $Y_l^m(\theta,\varphi)$ (7,45). Тъй като операторите $\hat{L}^2=-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}$ и $\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ действат само на ъгловите променливи θ и φ , то последните две уравнения от (7,52) се удовлетворяват също от функцията

$$\Psi=R(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)\ , \tag{7,53}$$

където $R(r)$ е функция на r , наречена ***радиална част на вълновата функция***. Тя трябва да бъде крайна при $r=0$. Както ще видим, нейният вид зависи от енергията E , стойността на L^2 (или l) и потенциалната енергия $U(r)$.

Първото от уравненията (7,52) – уравнението на Шрьодингер, с отчитане на (7,51) и това, че $\hat{L}^2=-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}$, може да бъде записано във вида

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+U(r)\right]\Psi=E\Psi\,. \tag{7,54}$$

Поставяйки функцията (7,53) в (7,54) и отчитайки второто от уравненията (7,52), след несложни преобразувания и съкращаване на общия множител $Y_l^m(\theta,\varphi)$, получаваме

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]R(r)=0\ . \tag{7,55}$$

Това е ***уравнението на Шрьодингер за радиалната част на вълновата функция***. Можем да запишем (7,55) в по-различен вид. Правим смяната

$$R(r)=\frac{u(r)}{r}\,. \tag{7,56}$$

Тогава

$$\frac{dR}{dr}=\frac{u'}{r}-\frac{1}{r^2}u\,,\quad \frac{d^2R}{dr^2}=\frac{u''}{r}-\frac{2}{r^2}u'+\frac{2}{r^3}u\ . \tag{7,57}$$

Като заместим (7,56) и (7,57) в (7,55), получаваме уравнение, което по вид напълно съвпада с едномерното стационарно уравнение на Шрьодингер, описващо частица, намираща се в потенциално поле $U_1(r)$

$$u''(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U_1(r)]\,u(r)=0\ , \tag{7,58}$$

където

$$U_1(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\,. \tag{7,59}$$

Вторият член в (7,59) се нарича ***центробежен потенциал***.

Всяко от стационарните състояния с определена стойност на l е $2l+1$-кратно изродено (съответстват му $2l+1$ стойности на m). Състоянията с $l=0,1,2,3,4,\ldots$ е прието да се означават съответно с малките латински букви $s,p,d,f,g,\ldots$ и т.н. Например: $l=0$ – s-състояние, $l=1$ – p-състояние и т.н.

Операторът на Хамилтон (7,51) комутира с оператора на пространствената инверсия $\hat{P}$ (вж. Лекция 3), имащ две собствени стойности (± 1). Във връзка с това стационарните състояния на разглежданите системи могат да бъдат четни или нечетни. При операцията "инверсия" координатата r не се променя, а ъгловите променливи се преобразуват по закона $\theta\to\pi-\theta$, $\varphi\to\varphi+\pi$. Затова

$$\hat{P}Y_l^m(\theta,\varphi)=Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi)=(-1)^l\,Y_l^m(\theta,\varphi)\ . \tag{7,60}$$

От тук следва, че сферичните функции се явяват собствени функции на оператора на инверсия. Всички състояния с четни l се явяват четни, а състоянията с нечетни l – нечетни.

2.2. Общо изследване на уравнението на Шрьодингер за радиалната част на вълновата функция

Уравнението (7,58) се опростява, ако разгледаме поведението на $u(r)$ на големи разстояния $(r \to \infty)$. Функцията $u(r)$ трябва да бъде непрекъсната, еднозначна и крайна в цялото пространство. Когато $U(r) = C r^{\beta} \quad (-2 < \beta < 0)$, където C е константа, $\lim\limits_{r\to\infty} U(r) = 0$ и уравнението (7,58) приема вида

$$u'' + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0 \ . \qquad (7,61)$$

Разглеждаме два случая.

1) $E > 0$. Полагаме $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$. Тогава (7,61) може да бъде записано във вида

$$u'' + k^2 u = 0 \ . \qquad (7,62)$$

Неговото общо решение е

$$u = C_1 \, e^{ikr} + C_2 \, e^{-ikr}$$

и, следователно

$$R(r) = \frac{C_1}{r} e^{ikr} + \frac{C_2}{r} e^{-ikr} . \qquad (7,63)$$

Като отчетем хармоничната зависимост на вълновите функции от времето, получаваме

$$R(r,t) = \frac{C_1}{r} e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - kr\right)} + \frac{C_2}{r} e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t + kr\right)} . \qquad (7,64)$$

Двата члена в (7,64) описват сферични вълни с амплитуди, които се изменят обратно пропорционално с разстоянието. Първата вълна може да се интерпретира като разходяща, а втората – като сходяща. Втората описва частица, движеща се към центъра на полето, а първата – в противоположната посока. Тъй като имаме стационарни състояния, ако вземем сфера с център центъра на полето, то вероятностите за преминаване на частица през тази сфера, в двете противопложни посоки, са еднакви, т.е.

$$|C_1| = |C_2| \ . \qquad (7,65)$$

С отчитане на (7,65), решението (7,64) може да се представи във вида

$$R(r,t) = A \frac{\sin(kr + \alpha)}{r} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} , \qquad (7,66)$$

т.е. $R(r,t)$ е стояща вълна. Вероятността да намерим частицата в безкрайност в сферичен слой с дебелина dr е

$$w\,dr = 4\pi r^2 dr\,|R(r)|^2 = 4\pi A^2 \sin^2(kr+\alpha)\,dr \ . \tag{7,67}$$

Тази вероятност е различна от нула. Известно е, че в поле на централни сили, макротелата могат да се движат по конични сечения – окръжност, елипса, парабола и хипербола. Разгледаният случай съответства на движение по парабола или хипербола – така наречените ***инфинитни движения***.

2) $E < 0$. Означаваме

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\mathrm{x}^2 \, . \tag{7,68}$$

Общото решение на (7,61), при $E < 0$, има вида

$$u = C_1' \,\mathrm{e}^{-\mathrm{x}r} + C_2' \,\mathrm{e}^{\mathrm{x}r} \tag{7,69}$$

и

$$R(r) = \frac{C_1'}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{x}r} + \frac{C_2'}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{x}r} . \tag{7,70}$$

От тук се вижда, че в качеството на търсеното частно решение трябва да вземем първото събираемо, тъй като, при $r \to \infty$, второто събираемо расте неограничено. Така, $C_2' = 0$ и

$$R(r) = \frac{C_1'}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{x}r} . \tag{7,71}$$

От (7,71) следва, че ако $E < 0$, вероятността да намерим частицата на безкрайно голямо разстояние от центъра на полето е равна на нула, т.е. тя се движи в ограничена област. Този случай съответства на така нареченото ***финитно движение*** на макротела в поле на централни сили по елипса или окръжност.

Сега ще разгледаме поведението на радиалната част на вълновата функция близо до центъра на полето, т.е. при $r \to 0$. Тогава в уравнение (7,58) членът с коефициент $\dfrac{l(l+1)}{r^2}$ преобладава над членовете с коефициенти $\dfrac{2mE}{\hbar^2}$ и $\dfrac{2m}{\hbar^2}U(r)$, ако $U(r) = Cr^{\beta}$, $-2 < \beta < 0$. Уравнението (7,58) в този случай може да се запише във вида

$$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2}u = 0 \ . \tag{7,72}$$

Това уравнение има особена точка $r = 0$. Решението му търсим във вид на степенен ред

$$u = r^{\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k \ . \qquad (7{,}73)$$

Множителят r^{γ} се въвежда за отстраняване на особеността. Трябва $\gamma > 0$ и да се подбере така, че (7,73) да удовлетворява диференциалното уравнение (7,72). След заместване на (7,73) в (7,72), най-ниската степен на r в уравнението става $\gamma - 2$. Приравнняваме коефициента пред $r^{\gamma-2}$ на нула и получаваме

$$\gamma(\gamma - 1)\, a_o - l\,(l+1)\, a_o = 0 \ ,$$

откъдето

$$\gamma_1 = l + 1 \, , \quad \gamma_2 = -l \ . \qquad (7{,}74)$$

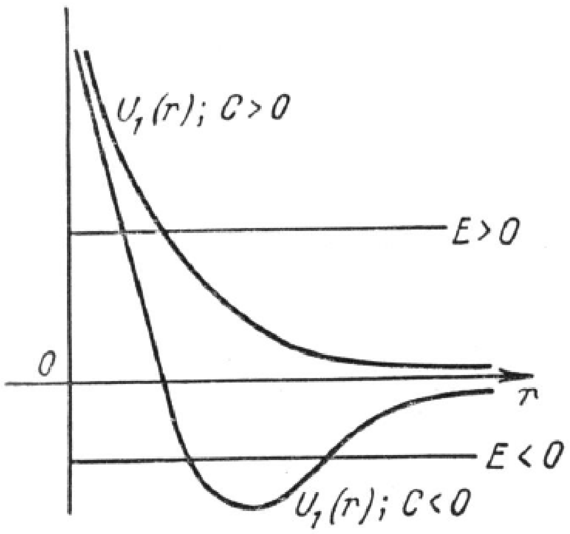
Второто решение ($\gamma_2 = -l$) не удовлетворява изискването $\gamma > 0$. Следователно, решението на диференциалното уравнение (7,55), при $r \to 0$, е

$$R(r) = C_1'' r^l \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k \ . \qquad (7{,}75)$$

Ще покажем, че при $E < 0$ пълната енергия на частицата се квантува. С отчитане на явния вид на $U(r)$, (7,59) добива вида

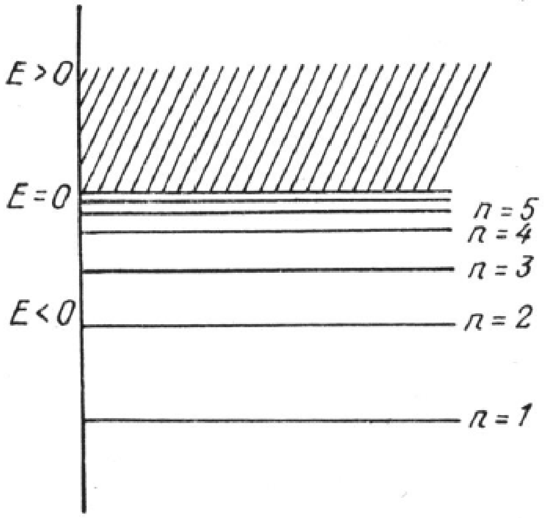
$$U_1(r) = C r^{\beta} + \frac{l\,(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \ , \qquad (7{,}76)$$

където $-2 < \beta < 0$. Ще предположим, че $C < 0$. Тогава функцията $U_1(r)$ притежава минимум. При $r \to 0$, в U_1 преобладава вторият член и $U_1 \to \infty$. При $r \to \infty$, в U_1 преобладава първият член и $U_1 \to 0$, оставайки отрицателна величина (фиг. 7.2).



фиг. 7.2

От фиг. 7.2 се вижда, че при $E > 0$ движението на частица в централно поле в посока към центъра на полето е еквивалентно на едномерно движение на частица към безкрайно висока потенциална бариера, намираща се вляво (при пълно отсъствие на потенциална бариера вдясно). Известно е (вж. Лекция 5), че в този случай, при енергии E по-малки от височината на потенциалната бариера (това условие тук се изпълнява за всяко E), коефициентът на отражение е равен на единица и частицата, отразяваща се от потенциалната бариера, ще се отдалечава в безкрайност при всяка стойност на нейната пълна енергия $E > 0$.



фиг. 7.3

В случая $E < 0$, движението на частица в централно поле в радиално направление наподобява едномерно движение на частица в потенциална яма (вж. фиг. 7.2). В Лекция 5 беше показано, че тогава частицата трябва да притежава дискретен енергетичен спектър. Така, при $E < 0$ енергията на частица, движеща се в централно поле, се квантува (фиг. 7.3).

Да допуснем сега, че в израза за $U_1(r)$ константата $C > 0$ (вж. фиг. 7.2). Тогава $U_1(r)$ не притежава минимум, енергията на частицата $E > 0$ винаги и не се квантува (фиг. 7.3).