Отметим, что атом водорода – хоть и «полезная» с т.з. физики задача, но сложно решаемая. Разберём типичные две задачу с семинаров. Как правило, они рассматриваются в 6-м семестре, но так они по своей природе очень близки к атому водороду и «координатным» квантам, я решил разместить методичку именно в этом разделе.

Задача 1.

Задача о сферически симметричной потенциальной яме:

$$\begin{cases} U(r) = 0, \text{если } r < R \\ U(r) = +\infty, \text{если } r > R \end{cases}$$

По форме мне она напоминает круглый орех в шоколадной конфете: частица заперта в «орехе», и в «шоколад» она войти не может ☺

Подставим это в

$$\begin{cases} -\frac{\frac{h^2}{2m} d^2u}{dr^2} + U_{\text{эфф}}(r)u(r) = Eu(r) \\ u(0) = 0, \qquad u(+\infty) = 0 \end{cases}$$

Получим… а тут я специально напишу сначала правильно:

$$\begin{cases} -\frac{\frac{h^2}{2m} d^2u}{dr^2} = Eu(r) \\ u(0) = 0, \qquad u(R) = 0 \end{cases}$$

Это же привычная бесконечно глубокая яма длиной R! Немедленно выписываем решение:

$$E = \frac{(hk_n)^2}{2m}, k_n = \frac{\pi}{L}n, u_n(r) = \sin(k_n r)$$

Где ошибка? Мы забыли, что не U(r), а $U_{\text{эфф}}(r)$. Должно быть:

$$\begin{cases} -\frac{\frac{h^2}{2m} d^2u}{dr^2} + \frac{h^2 * l(l+1)}{2mr^2}u(r) = Eu(r) \\ u(0) = 0, \qquad u(R) = 0 \end{cases}$$

А как такое решать?

Тут нам нужно откатиться чуть назад:

$$\begin{cases} -\frac{h^2}{2m}\Delta\Psi = E\Psi \\ \Psi(\text{в центре шара}) \text{ конечна}, \qquad \Psi(\text{на сфере } r = R) = 0 \end{cases}$$

И вспомнить, что это же классическая задача Ш-Л (задача 2 в моей ММФ-ной терминологии), решение которой уже выводится на ММФ:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = N\frac{1}{\sqrt{r}}J_{l+\frac{1}{2}}(k_n r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

где k_n - такие числа, что

$$J_{l+\frac{1}{2}}(k_n * R) = 0$$

N – нормировочная константа.

Главное, что вы должны унести с курса ММФ – это множество готовых решений, которые вы должны уметь отыскивать ☺

Конструкцию $\frac{1}{\sqrt{\xi}}J_{l+\frac{1}{2}}(\xi)$ часто обозначают как $j_0(\xi)$ – т.н. шаровые функции.

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x},$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x},$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - 1\right)\frac{\sin x}{x} - \frac{3\cos x}{x^2},$$

$$j_3(x) = \left(\frac{15}{x^3} - \frac{6}{x}\right)\frac{\sin x}{x} - \left(\frac{15}{x^2} - 1\right)\frac{\cos x}{x}$$

и Неймана[5]:

$$y_0(x) = -j_{-1}(x) = -\frac{\cos x}{x},$$

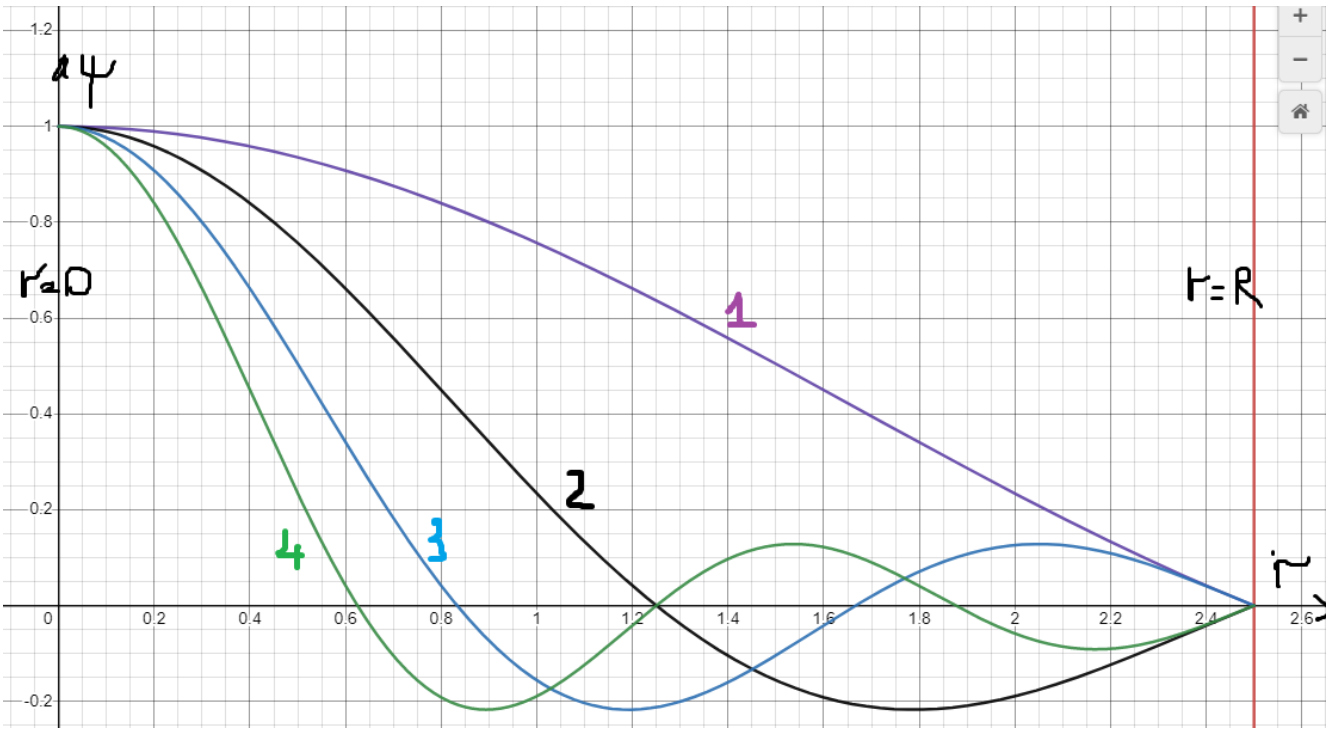
$$y_1(x) = j_{-2}(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$

$$y_2(x) = -j_{-3}(x) = \left(-\frac{3}{x^2} + 1\right)\frac{\cos x}{x} - \frac{3\sin x}{x^2},$$

$$y_3(x) = j_{-4}(x) = \left(-\frac{15}{x^3} + \frac{6}{x}\right)\frac{\cos x}{x} - \left(\frac{15}{x^2} - 1\right)\frac{\sin x}{x}$$

обратите внимание, что шаровые функции целого порядка (и только целого!) выражаются через элементарные функции. Об этом должны были говорить на ММФ.

Построим графики. Например, рассмотрим $l = 0$, т.е. $j_0 = \frac{\sin(x)}{x}$. Построим разные ВФ для разных n:



https://www.desmos.com/calculator/h8k3izucw0

А что там с собственным значением – энергией?

$$E_{ln} = \frac{h^2 k_n^2}{2m} + \frac{h^2 * l(l+1)}{2mR^2}$$

Как я получил этот ответ? Энергия (СЗ лапласиана) складывается от СЗ двух слагаемых лапласиана (радиальной и центробежной энергии): $\frac{h^2 * l(l+1)}{2mR^2}$ от $\Delta_{\theta\varphi}$ и $\frac{h^2 k_n^2}{2m}$ от Δ_r. Причём $\frac{h^2 k_n^2}{2m}$ аналогично одномерию (так и $hk = p$, ср. $\frac{p^2}{2m}$).

Очень похоже решается задача с другим потенциалом:

Задача 2.

Очень похоже решается задача с другим потенциалом:

$$U(r) = -R^2/r^2$$

Вот у Кулона было $-1/r$, а тут порядка $-1/r^2$. На самом деле, как мы увидим, этот потенциал проще, потому что он «убивается» о другой порядка $-1/r^2$.

Тогда

$$\begin{cases} -\frac{\frac{h^2}{2m} d^2 u}{dr^2} + \frac{h^2 * l(l+1)}{2mr^2} u(r) - \frac{R^2}{r^2} = Eu(r) \\ u(0) = 0, \qquad u(+\infty) = 0 \end{cases}$$

Смотрите: если бы не красное слагаемое, задача была бы предыдущей. А нельзя ли его как-то объединить с зелёным? Ведь они оба зависят от r как $\frac{1}{r^2}$.
Оказывается, можно.
Тут нужно додуматься сделать замену такую, что

$$\frac{h^2 L(L+1)}{2m} = \frac{h^2 * l(l+1)}{2mr^2} - \frac{R^2}{r^2}$$

Т.е. $L(L+1) = l(l+1) - \frac{2m\,a^2}{h^2}$

Как только мы такую замену сделали, мы получили знакомую нам задачу

$$\begin{cases} -\frac{\frac{h^2}{2m} d^2 u}{dr^2} + \frac{h^2 * L(L+1)}{2mr^2} u(r) = Eu(r) \\ u(0) = 0, \qquad u(+\infty) = 0 \end{cases}$$

А её решение нам уже известно:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = N\frac{1}{\sqrt{r}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_n r) Y_{lm}(\theta,\varphi) = N j_l\left(k_n * \frac{r}{R}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Ой, не так! Нужно l поменять на L:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = N\frac{1}{\sqrt{r}} J_{L+\frac{1}{2}}(k_n r) Y_{lm}(\theta,\varphi) = N j_L\left(k_n * \frac{r}{R}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

(в сферической функции остаётся l - ведь замена возникла только при решении радиальной части).

Аналогично уровни энергии

$$E_{ln} = \frac{h^2 k_n^2}{2m} + \frac{h^2 * l(l+1)}{2mR^2}$$