ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ (СФЕРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ)

Сферические координаты

$$x = r\sin\theta\cos\varphi$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi$$

$$z = r\cos\theta$$

$$dv = dxdydz = r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$$

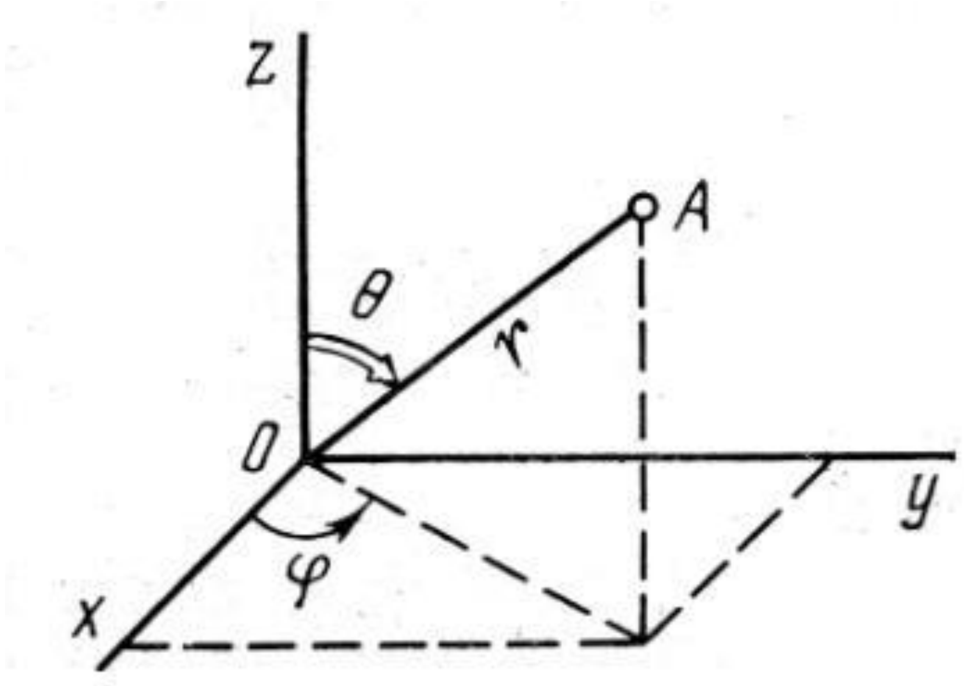


Рис. 2. Декартова и сферическая системы координат

Связь декартовой системы координат со сферической системой координат.

Оператор Лапласа в сферических координатах

$$\nabla^2 = \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2}{d\varphi^2}$$

Уравнение Шредингера

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Psi}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Psi}{d\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + 2\frac{1}{r}\Psi + 2E\Psi = 0$$

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Волновую функцию ищем в следующем виде

Уравнение Шредингера

$$\frac{\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+2\left(\frac{1}{r}+E\right)R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)=-\frac{R(r)\Phi(\varphi)}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta}\right)-\frac{R(r)\vartheta(\theta)}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

Помножим обе части этого уравнения на $\frac{r^2}{R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)}$ и получим

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+2\left(\frac{1}{r}+E\right)r^2=-\frac{1}{\vartheta(\theta)\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta}\right)-\frac{1}{\Phi(\varphi)\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

Уравнение Шредингера

Получаем уравнение после преобразования

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+2\left(\frac{1}{r}+E\right)r^2R(r)-cR(r)=0$$

Где с- константа и равна

$$-\frac{1}{\vartheta(\theta)\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta}\right)-\frac{1}{\Phi(\varphi)\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=c$$

или

$$\frac{\sin\theta}{\vartheta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta}\right)+c\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m^2\Phi(\varphi)=0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta}\right)+\left(c-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\vartheta(\theta)=0$$

:

Уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + m^2\Phi(\varphi) = 0 \longleftrightarrow \Phi(\varphi) = Ae^{\pm im\varphi}$$

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi)$$

$$A = Ae^{\pm im2\pi}, e^{\pm im2\pi} = 1$$

m=0, $\pm1, \pm2\ldots$

Из условия нормировки $\int_0^{2\pi}\Phi^*(\varphi)\Phi(\varphi)d\varphi = A^2\int_0^{2\pi}e^{im\varphi}e^{-im\varphi}d\varphi = A^2 2\pi = 1 \longleftrightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm im\varphi}, m = 0, \pm1, \pm2\ldots$$

Уравнение Шредингера

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta}\right)+\left(c-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\vartheta(\theta)=0$$

Замена переменных

$$\xi=\cos\theta, \qquad d\xi=-\sin\theta d\theta \qquad -1\le\xi\le 1,$$

После замены переменных

$$(1-\xi^2)\vartheta''-2\xi\vartheta'+\left(c-\frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\vartheta=0$$

Решение в виде полинома Лежандра

$$\vartheta(\xi)=P_l^{|m|}(\xi),\ \xi=\cos\theta,$$

$$P_l^{|m|}=\frac{1}{2^l l!}\left[1-(\cos\theta)^2\right]^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{(d\cos\theta)^{l+|m|}}\left(\cos^2\theta-1\right)^l$$

$$\vartheta_{0,0}=\frac{1}{2}\sqrt{2} \qquad \vartheta_{2,0}=\frac{1}{4}\sqrt{10}\left(3\cos^2\theta-1\right)$$

$$\vartheta_{1,0}=\frac{1}{2}\sqrt{6}\cos\theta \qquad \vartheta_{2,\pm1}=\frac{1}{2}\sqrt{15}\cos\theta\sin\theta$$

$$\vartheta_{1,\pm1}=\frac{1}{2}\sqrt{3}\sin\theta \qquad \vartheta_{2,\pm2}=\frac{1}{4}\sqrt{15}\sin^2\theta$$

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)=\left[\frac{1}{2\pi}\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi},$$

$$l=0,1,2....;\ m=-l...0..l$$

Выражение для волновой функции зависящей от двух углов

,

Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции, E<0

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+(2E+\frac{2}{r}-\frac{(l+1)l}{r^2})R(r)=0$$

$R(r)=e^{-\mu r}r^l\sum_j b_j r^j$ Решение следует искать в виде ряда $\mu=(-2E)^{\frac{1}{2}}, E<0$

b_j коэффициенты

Решение возможно если ряд $\sum_j b_j r^j$ сходится. Ряд $\sum_j b_j r^j$ близок к $e^{2\mu r}$ Тогда получаем

$R(r)\sim e^{-\mu r}r^l e^{2\mu r}=r^l e^{\mu r}$ $2\mu(j+l+1)=2, j=0,1,2...$ -условие разрыва ряда

Решение уравнения Шредингера для радиальной части волновой функции, E<0

$$E = -\frac{1}{2n^2}$$

или в единицах СИ

$$E = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2n^2\hbar^2}$$

$$R(r) = \left[\left(\frac{2}{n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-r/n}\left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right),$$

$L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right)$ - присоединенный полином Лагерра

$$L_1^0 = 1 \qquad L_3^0 = 2 - 4r + r^2$$

$$L_2^0 = 1 - 2r \qquad L_3^1 = -4 + 2r$$

$$L_2^1 = -2 \qquad L_3^2 = 2$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

$$l = 0,1,2\ldots; m = -l\ldots0\ldots l$$

$$l \le n-1, l = 0,1,\ldots n-1$$

$$R_{1,0} = 2\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$R_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)$$

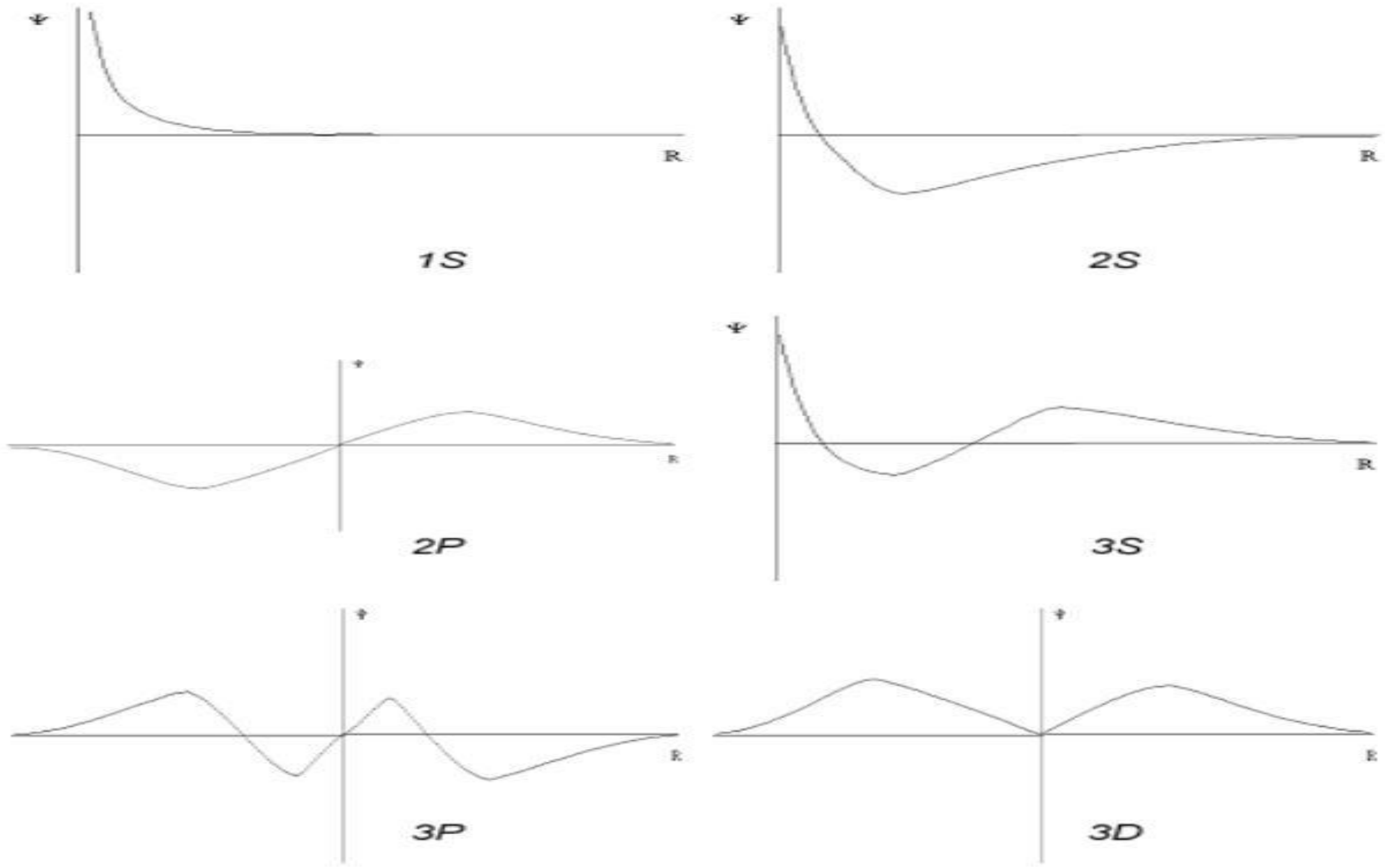
$$R_{2,1} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{r}{a_0}$$

$$R_{3,0} = \frac{2}{3\sqrt{3}}\exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)\left(1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27a_0^2}\right)$$

$$R_{3,1} = \frac{8}{27\sqrt{6}}\left(1/a_0\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)\frac{r}{a_0}\left(1-\frac{r}{6a_0}\right)$$

$$R_{3,2} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(1/a_0\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)r^2$$

Радиальные волновые функции



Решение уравнения Шредингера для радиальной части волновой функции, E>0 (непрерывный спектр)

Замена переменных в комплексном виде

$$n = -\frac{i}{\sqrt{2E}} = -\frac{i}{k}, \qquad \rho = 2ikr, \qquad k = \sqrt{2E}$$

$$R_{kl} = \frac{C_{kl}}{(2l+1)!}(2kr)^l e^{-ikr} F\left(\frac{i}{k} + l + 1,\ 2l+2,\ 2ikr\right),$$ - Радиальная часть волновой функции

C_{kl} - Нормировочный множитель

$$R_{kl} = C_{kl}\frac{(-2kr)^{-l-1}}{2\pi}\oint e^{2ikrt}\left(t+\frac{1}{2}\right)^{\frac{i}{k}-l-1}\left(t-\frac{1}{2}\right)^{-\frac{i}{k}-l-1}dt \qquad (36{,}20)$$

Радиальная часть может быть записана в виде комплексного интеграла по контуру

Решение уравнения Шредингера для радиальной части волновой функции, E>0 (непрерывный спектр)

Решение комплексного интеграла записываем в следующем виде

$$R_{kl} = C_{kl}\,\frac{e^{-\pi/2k}}{kr}\times$$
$$\times\,\mathrm{Re}\left\{\frac{e^{-i\left[kr-\frac{\pi}{2}(l+1)+\frac{1}{k}\ln 2kr\right]}}{\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)}\,G\left(l+1+\frac{i}{k},\ \frac{i}{k}-l,\ -2ikr\right)\right\}. \qquad (36{,}21)$$

$$C_{kl} = 2ke^{\pi/2k}\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\right|.$$

Нормировочный коэффициент

При больших r получаем значение волновой функции

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr+\frac{1}{k}\ln 2kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right),$$
$$\delta_l = \arg\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)$$

Решение уравнения Шредингера для радиальной части волновой функции, E>0 (непрерывный спектр)

$$\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\right| = \left[\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{\pi}{k}}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}}\,\mathrm{sh}^{-1/2}\frac{\pi}{k}.$$

Таким образом,

$$C_{kl} = \left[\frac{8\pi k}{1-e^{-2\pi/k}}\right]^{1/2}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}}$$

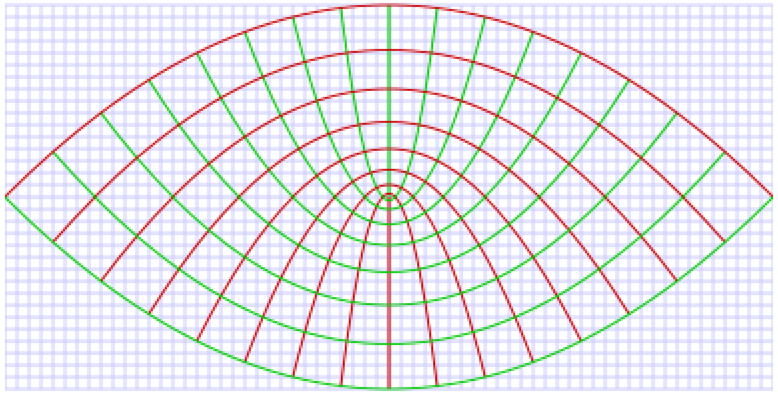
- Нормировочный коэффициент

ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ (ПАРАБОЛИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ)

ПАРАБОЛИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, \qquad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi, \qquad z = \frac{1}{2}(\xi - \eta),$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{1}{2}(\xi + \eta)$$



$$dV = \frac{1}{4}(\xi + \eta)\, d\xi\, d\eta\, d\varphi.$$

- ЭЛЕМЕНТ ОБЪЕМА В ПАРАБОЛИЧЕСКИХ КООРЖДИНАТАХ

$$\boxed{\Delta = \frac{4}{\xi + \eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.}$$

- ОПЕРАТОР Лапласа в параболических координатах

Уравнение Шредингера в параболических координатах

$$\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+$$
$$+2\left(E+\frac{2}{\xi+\eta}\right)\psi=0.$$

$\psi=f_1(\xi)\,f_2(\eta)\,e^{im\varphi},$ - Решение запишем в данном виде

После подстановки волновой функции в уравнение Шредингера и разделения переменных имеем систему

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\left[\frac{E}{2}\xi-\frac{m^2}{4\xi}+\beta_1\right]f_1=0,$$
$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left[\frac{E}{2}\eta-\frac{m^2}{4\eta}+\beta_2\right]f_2=0,$$

$$\beta_1+\beta_2=1.$$

Решение уравнения Шредингера, E<0 (дискретный спектр)

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2E}}, \qquad \rho_1 = \xi\sqrt{-2E} = \frac{\xi}{n}, \qquad \rho_2 = \frac{\eta}{n},$$

- Замена переменных

В результате после замены получаем уравнение Шредингера относительно f_1

$$\boxed{\frac{d^2 f_1}{d\rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1}\frac{df_1}{d\rho_1} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{1}{\rho_1}\left(\frac{|m|+1}{2} + n_1\right) - \frac{m^2}{4\rho_1^2}\right] f_1 = 0 \qquad (37{,}11)}$$

$$n_1 = -\frac{|m|+1}{2} + n\beta_1, \qquad n_2 = -\frac{|m|+1}{2} + n\beta_2.$$

Решение уравнения Шредингера, E<0 (дискретный спектр)

$$f_1(\rho_1) = e^{-\rho_1/2}\rho_1^{|m|/2} w_1(\rho_1)$$

$$\frac{d^2 f_1}{d\rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1}\frac{df_1}{d\rho_1} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{1}{\rho_1}\left(\frac{|m|+1}{2} + n_1\right) - \frac{m^2}{4\rho_1^2}\right] f_1 = 0 \quad (37,11)$$

$$\rho_1 w_1'' + (|m| + 1 - \rho_1) w_1' + n_1 w_1 = 0.$$

$$w_1 = F(-n_1, \ |m| + 1, \ \rho_1),$$

Решение уравнения Шредингера, E<0 (дискретный спектр)

После нормировки имеем выражение для волновой функции

$$\psi_{n_1 n_2 m} = \frac{\sqrt{2}}{n^2} f_{n_1 m}\left(\frac{\xi}{n}\right) f_{n_2 m}\left(\frac{\eta}{n}\right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

$$f_{pm}(\rho) = \frac{1}{|m|!}\sqrt{\frac{(p+|m|)!}{p!}}\, F(-p, |m|+1, \rho)\, e^{-\rho/2}\rho^{|m|/2}.$$

Волновые функции в параболических координатах, в противоположность волновым функциям в сферических координатах, не симметричны относительно плоскости $z=0$. При $n_1 > n_2$ вероятность нахождения частицы на стороне $z>0$ больше, чем на стороне $z<0$, а при $n_1 < n_2$ — наоборот.

Решение уравнения Шредингера, E>0 (непрерывный спектр)

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\left[\frac{k^2}{4}\xi-\beta_1\right]f_1=0,$$
$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left[\frac{k^2}{4}\eta-\beta_2\right]f_2=0,\quad \beta_1+\beta_2=1.$$

$$m=0$$

$$\psi=f_1(\xi)\,f_2(\eta)$$

Волновая функция записывается в данном виде

$$f_1(\xi)=e^{ik\xi/2},\qquad f_2(\eta)\sim e^{-ik\eta/2}\qquad \psi=e^{-\frac{\pi}{2k}}\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)e^{\frac{ik}{2}(\xi-\eta)}F\left(-\frac{i}{k},\,1,\,ik\eta\right).$$

Собственные значения волновой функции

Решение уравнения Шредингера, E>0 (непрерывный спектр)

Окончательное решение имеет вид

$$\psi = \left[1 + \frac{1}{ik^3 r\,(1-\cos\theta)}\right] \exp\left\{ikz + \frac{i}{k}\ln\left[kr\,(1-\cos\theta)\right]\right\} + \\ + \frac{f(\theta)}{r}\exp\left\{ikr - \frac{i}{k}\ln(2kr)\right\},$$

Волновая функция состоит из суммы двух членов

$$f(\theta) = -\frac{1}{2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}\,\frac{\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)}\exp\left(-\frac{2i}{k}\ln\sin\frac{\theta}{2}\right).$$