IX. ČÁSTICE VE SFÉRICKY SYMETRICKÉM POLI

V této kapitole si blíže všimneme kvantověmechanických stavů částice nacházející se v centrálně (sféricky) symetrickém poli, tj. v poli, v němž potenciální energie částice $V(r)$ závisí pouze na její vzdálenosti r od zvoleného počátku. Tato úloha velice úzce souvisí s problémem momentu hybnosti, který jsme řešili v předchozí kapitole. Skutečnost, že $V(r)$ je invariantní (nemění se) vzhledem k libovolné rotaci soustavy kolem počátku, vede totiž k tomu, že hamiltonián částice komutuje se všemi složkami operátoru $\vec{\mathcal{L}}$. To ale znamená, že operátory $\mathcal{H}$, $\mathcal{L}^2$, $\mathcal{L}_z$ musí mít společný soubor vlastních funkcí a tudíž úhlová část vlastních funkcí $\mathcal{H}$ bude rovna již známým sférickým funkcím $Y_l^m(\theta,\varphi)$. Zbývá proto určit závislost vlastních funkcí $\mathcal{H}$ na proměnné r.

1. Obecné charakteristiky řešení

1.1) Zopakování poznatků z klasické mechaniky

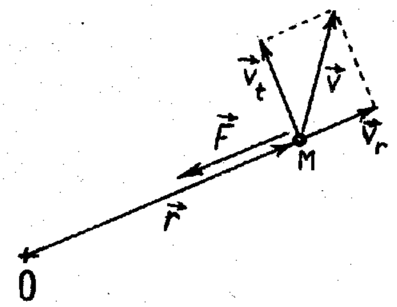
Síla působící na částici v bodě M ($\overline{OM}=\vec{r}$) potenciálního pole $V(\vec{r})$ je dána vztahem (gradient potenciálu viz dod.E)

$$\vec{F} = -\nabla V(\vec{r})$$

V našem případě ($V=V(r)$)

$$\vec{F} = -\nabla V(r) = -\frac{dV}{dr}\cdot\frac{\vec{r}}{r} \,, \tag{1}$$

takže síla $\vec{F}$ vždy míří do počátku O (obr.28).



Obr.28
Částice v potenciálovém poli sféricky symetrickém vzhledem k počátku O. $\vec{v}_t$ je tangenciální a $\vec{v}_r$ radiální složka rychlosti částice $\vec{v}$.

Moment hybnosti částice $\vec{L}$ vzhledem k bodu O je $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$; v VIII.1 jsme si již ukázali, že v centrálním poli je $d\vec{L}/dt=0$ a pohyb částice se proto děje v rovině kolmé k $\vec{L}$.

Rozložme nyní rychlost částice $\vec{v}$ na složku tangenciální $\vec{v}_t$ a radiální $\vec{v}_r$ (obr.28). Velikost $\vec{v}_r$ je

$$v_r = \frac{dr}{dt} \tag{2}$$

Velikost tangenciální složky v_t je možné vyjádřit takto:

$$r\,|\vec{v}_t| = |\vec{r}\times\vec{v}| \tag{3}$$

S přihlédnutím k (3) je možné velikost $\vec{L}$ psát (μ je hmotnost částice)

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \mu\vec{v}| = \mu r |\vec{v}_t| \qquad (4)$$

Celková energie částice je

$$E = \frac{1}{2}\mu\vec{v}^2 + V(r) = \frac{1}{2}\mu\vec{v}_r^2 + \frac{1}{2}\mu\vec{v}_t^2 + V(r) \qquad (5)$$

Využijeme-li (4), můžeme ji zapsat takto

$$E = \frac{1}{2}\mu v_r^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) , \qquad (6)$$

takže klasický hamiltonián soustavy je

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \qquad (7)$$

kde

$$p_r = \mu \frac{dr}{dt} \qquad (8)$$

je hybnost sdružená s r a L^2 se musí vyjádřit v proměnných r, θ, φ a s nimi sdružených hybnostech p_r, p_θ, p_φ. Ukáže se, že (viz např. [8]; zde odvození neprovádíme, protože vyjádření operátoru $\mathcal{L}^2$ ve sférických souřadnicích jsme již získali v (VIII.7))

$$L^2 = p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta} p_\varphi^2 \qquad (9)$$

V hamiltoniánu (7) je kinetická energie vyjádřena součtem dvou členů: radiální kinetické energie a kinetické energie spojené s rotací kolem O. Využijeme-li toho, že v centrálním poli je $\vec{L}$ integrálem pohybu ($d\vec{L}/dt=0$ takže $\vec{L}$=konst), je v (7) L^2 pouze parametrem a H pak závisí pouze na proměnné r. Dostáváme se tím k jednorozměrné úloze (s r měnícím se od 0 do $+\infty$) o pohybu částice s hmotností μ v "efektivním potenciálovém poli"

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} \qquad (10)$$

1.2) Kvantověmechanická formulace

Stacionární Schrödingerova rovnice pro naši úlohu je

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (11)$$

Vyjádříme-li Laplaceův operátor ∇^2 ve sférických souřadnicích, dostaneme (viz např. [13])

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\mathrm{tg}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \qquad (12)$$

S $\mathcal{L}^2$ ve sférických souřadnicích podle (VIII.7) je kvantověmechanický hamiltonián roven

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2\mu r^2}\mathcal{L}^2 + V(r) \qquad (13)$$

Úhlová závislost (určovaná θ, φ) tohoto hamiltoniánu je zcela obsažena v operátoru $\mathcal{L}^2$. Zavedeme-li vhodně operátor $\hat{p}_r$, je přechod od (7) k (13) zřejmý.

Ukážeme nyní, jak postupovat při řešení Schrödingerovy rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2\mu r^2}\mathcal{L}^2 + V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\,\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (14)$$

Protože operátor $\mathcal{L}^2$ působí pouze na úhlové proměnné θ, φ, musí komutovat s každým operátorem, který působí pouze na proměnnou r (totéž platí o operátorech $\mathcal{L}_x$, $\mathcal{L}_y$, $\mathcal{L}_z$ - viz (VIII.6)). Protože samozřejmě komutuje sám se sebou, je z (13) vidět, že

$$[\mathcal{H}, \mathcal{L}^2] = 0 \qquad (15a)$$

$$[\mathcal{H}, \mathcal{L}_z] = 0 \qquad (15b)$$

Jelikož operátory $\mathcal{H}, \mathcal{L}^2, \mathcal{L}_z$ vzájemně komutují, musí mít společný systém vlastních funkcí, které budou společným řešením rovnic

$$\mathcal{H}\ \psi(r,\theta,\varphi) = E\,\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (16a)$$

$$\mathcal{L}^2\ \psi(r,\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\,\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (16b)$$

$$\mathcal{L}_z\ \psi(r,\theta,\varphi) = m\hbar\,\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (16c)$$

Při psaní (16b),(16c) jsme využili toho, že vlastní hodnoty $\mathcal{L}^2$ a $\mathcal{L}_z$ již známe (srov.(VIII.8),(VIII.11) a (VIII.20)). Protože již známe i obecný tvar společných vlastních funkcí $\mathcal{L}^2$, $\mathcal{L}_z$ (jsou to sférické funkce $Y_l^m(\theta,\varphi)$), musí být společné řešení rovnic (16) pro pevné l a m součinem funkce závislé jen na r a sférické funkce $Y_l^m(\theta,\varphi)$, tj.

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\ Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (17)$$

Ať je R(r) jakékoliv, $\psi(r,\theta,\varphi)$ bude řešením (16b),(16c), neboť $\mathcal{L}^2, \mathcal{L}_z$ nepůsobí na r. Zbývá tedy jen určit radiální funkci R(r) tak, aby $\psi(r,\theta,\varphi)$ byla i vlastní funkcí hamiltoniánu $\mathcal{H}$ (tj.řešením (16a)). Rovnici pro R(r) získáme takto: do (16a) dosadíme $\mathcal{H}$ z (13) a funkci ψ ve tvaru (20); protože ψ je vlastní funkcí $\mathcal{L}^2$, nahradíme $\mathcal{L}^2\psi$ pravou stranou z (16b) a rovnici dělíme $Y_l^m(\theta,\varphi)$. Pro radiální funkci R(r) tak obdržíme rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]R(r) = E\,R(r) \qquad (18)$$

Ze zápisu rovnice (18) je zřejmé, že jde o rovnici pro vlastní funkce ($R(r)$) a vlastní hodnoty (E) operátoru v hranatých závorkách; rozlišovat je budeme indexem (kvantovým číslem) k . Protože ale sám operátor obsahuje kvantové číslo l coby parametr, bude na l záviset i $R(r)$ a E, takže bude nutné psát $R_{kl}(r)$ a E_{kl} a

$$\psi_{klm}(r,\theta,\varphi) = R_{kl}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi) \quad .$$

K diskusi a řešení rovnice (18) je výhodné provést ještě substituci

$$R_{kl}(r) = \frac{u_{kl}(r)}{r} \quad , \tag{19}$$

která po dosazení do (18) a úpravě dá rovnici pro funkce $u_{kl}(r)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{kl}(r) = E_{kl}u_{kl}(r) \tag{20}$$

Všimněte si, že jsme získali rovnici zcela analogickou těm, které jsme měli pro jednorozměrné úlohy v kap.III s tím, že (20) by odpovídala stavům částice s hmotností μ v poli s potenciálem (srov.klasický výsledek (10))

$$V_{ef} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{21}$$

Nesmíme ovšem zapomenout, že, na rozdíl od úloh v kap.III, je v (20) proměnná r pouze z intervalu $0 \leqslant r < +\infty$.

Nebudeme zde provádět rozbor podmínek pro fyzikálně přijatelná řešení rovnice (20) s obecným potenciálem $V(r)$ (viz např. [3]). Pouze si uvědomme, že singulárním bodem, v jehož okolí bude třeba řešení především vyšetřit, je $r=0$. Protože normalizační podmínka pro funkce $u_{kl}(r)$ je [1)]

$$\int_0^\infty u_{kl}^*(r)\, u_{kl}(r)\, dr = 1 \ , \tag{22a}$$

bude muset funkce $u_{kl}(r)$ klesat, pro $r \to 0$, k nule alespoň tak rychle jako r^{-1}, má-li integrál v (22a) konvergovat.

---

1) Potřebujeme nakonec normalizaci (17), tj. splnění

$$\int \psi_{klm}^* \psi_{klm}\, d\tau = 1 \ .$$

Sférické funkce jsou však již normalizovány podle (VIII.33), takže zbývá aby platilo ($d\tau$ je dáno (VIII.5))

$$\int_0^\infty R_{kl}^*(r)\, R_{kl}(r)\, r^2\, dr = 1 \ , \tag{22b}$$

což s (19) dá (22a) (viz ještě dále (48)).

Z druhé strany, pro $r \to \infty$, přejde (20) v rovnici

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u_{kl}}{dr^2} = \left[V(r) - E_{kl}\right] u_{kl}(r) \tag{23}$$

a mají-li existovat vázané stavy, musí být pro rostoucí r rozdíl $(V(r)-E_{kl}) > 0$. Funkce $u_{kl}(r)$ bude tedy pro $r \to \infty$ exponenciálně růst nebo klesat, přičemž rostoucí řešení je opět třeba odmítnout jako fyzikálně nepřijatelné.

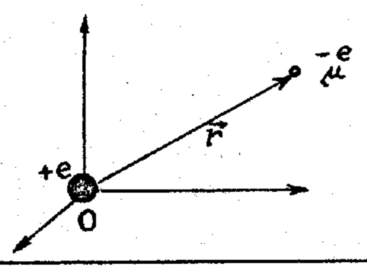
2. Atom vodíku

2.1) Řešení rovnice pro radiální část vlnové funkce

Nejjednodušší atomový systém - atom vodíku - je tvořen elektrostaticky vázanou dvojicí proton-elektron. Z odst.VIII.5.1.2 již víme, že problém dvou částic lze vždy rozdělit na dvě nezávislé úlohy: pohyb těžiště soustavy a pohyb fiktivní částice s redukovanou hmotností $\mu = m_e m_p/(m_e+m_p)$ vzhledem k počátku, který je v těžišti soustavy. V našem případě je hmotnost protonu m_p mnohem větší než hmotnost elektronu m_e. Potom ale

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e+m_p} \approx m_e\left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \tag{23}$$

kde korekční člen $m_e/m_p \approx 1/1800$, takže těžiště soustavy je prakticky v témže místě kde proton a zmíněná fiktivní částice může být s velmi dobrou přesností ztotožněna s elektronem. To je také důvod, proč v dalším budeme (mírně nepřesně) mluvit o částici s hmotností μ jako o elektronu a proton budeme považovat za pevný v počátku souřadnic (obr.29).



Obr.29
K řešení atomu vodíku. Proton s hmotností m_p a nábojem +e považujeme za pevný v počátku a fiktivní částici s hmotností $\mu \approx m_e$ a nábojem -e v dobrém přiblížení ztotožníme s elektronem.

Potenciální energie vzájemného elektrostatického působení v soustavě

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}|} \tag{24}$$

má sférickou symetrii, takže jde o konkrétní případ systémů uvažovaných v předchozím odstavci. Stačí se proto omezit jen na řešení rovnice (18), resp.(20), pro radiální část vlnové funkce.