



УДК 517.937

Ю.В. Трубников, Н.Е. Трубникова

## Квазишаровые решения уравнения Шредингера

В данной работе получено выражение для потенциальной энергии, содержащее в качестве частных случаев случай кулоновского поля и случай трехмерного осциллятора. Для построения класса решений уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом разработан эффективный алгоритм нахождения коэффициентов полиномов Чебышева-Лагерра.

Рассмотрим дифференциальное уравнение Шредингера

$$\Delta\psi + b[E - U(r)]\psi = 0, \quad (1)$$

где  $\Delta$  — оператор Лапласа,  $b = \frac{2\mu}{\hbar^2}$ ,  $\mu$  — масса электрона,  $\hbar$  — постоянная

Планка, а в качестве потенциалов возьмем множество функций

$$U = U(r) = \frac{1}{b} [a^2 k^2 r^{2k-2} - ak(2m+k+1)r^{k-2} + bE], \quad (2)$$

в которых  $a, k$  — произвольные положительные числа,  $m$  — натуральное число или нуль.

В частности, если

$$k = 1, \quad a = \frac{\mu e^2}{(m+1)\hbar^2}, \quad E = -\frac{1}{2(m+1)^2} \cdot \frac{\mu e^4}{\hbar^2}. \quad (3)$$

где  $e$  — заряд электрона, то

$$U(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\mu^2 e^4}{(m+1)^2 \hbar^4} - \frac{\mu e^2}{(m+1)\hbar^2} \cdot 2(m+1)r^{-1} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{2(m+1)^2} \cdot \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \right] = \\ = \frac{\mu e^4}{2(m+1)^2 \hbar^2} - \frac{e^2}{r} - \frac{\mu e^4}{2(m+1)^2 \hbar^2} - \frac{e^2}{r},$$

т.е. возникает кулоновское поле.

В другом частном случае, если

$$k = 2, \quad E = \omega\hbar \left( m + \frac{3}{2} \right) \quad (m = 0, 1, 2, \dots), \quad a = \frac{\mu\omega}{2\hbar},$$

то

$$U(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\mu^2 \omega^2}{4\hbar^2} \cdot 4r^2 - \frac{\mu\omega(2m+3)}{\hbar} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \left( m + \frac{3}{2} \right) \omega\hbar \right] =$$

$$= \frac{\mu \omega^2}{2} r^2 - \frac{\hbar \omega}{2} (2m+3) + \frac{\hbar \omega}{2} (2m+3) = \frac{\mu \omega^2}{2} r^2 - \frac{\mu \omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2).$$

Последнее выражение является потенциальной энергией изотропного осциллятора [1].

Рассмотрим далее дифференциальное уравнение

$$r^2 R''(r) + 2rR'(r) + [b(E-U)r^2 - m(m+1)]R(r) = 0. \quad (4)$$

**Лемма 1.** *Функции вида*

$$R_1(r) = c_1 r^m e^{-ar^k}, \quad (5)$$

где  $c_1$  – произвольная постоянная, являются решениями уравнения (4).

**Доказательство.** Так как (при  $c_1 = 1$ )

$$R_1'(r) = m r^{m-1} e^{-ar^k} - a k r^{m+k-1} e^{-ar^k} = (m r^{m-1} - a k r^{m+k-1}) e^{-ar^k}, \quad (6)$$

$$R_1''(r) = [m(m-1)r^{m-2} + a k(-2m-k+1)r^{m+k-2} + a^2 k^2 r^{m+2k-2}] e^{-ar^k}. \quad (7)$$

Подставляя выражения (6) и (7) в уравнение (4) и учитывая, что

$$b(E-U) = a k(2m+k+1)r^{k-2} - a^2 k^2 r^{2k-2}, \quad (8)$$

получаем

$$[m(m-1)r^m + a k(-2m-k+1)r^{m+k} + a^2 k^2 r^{m+2k} + 2m r^m - 2a k r^{m+k} + a k(2m+k+1)r^{m+k} - a^2 k^2 r^{m+2k} - m(m+1)r^m] e^{-ar^k} = [(m^2 - m + 2m - m^2 - m)r^m + a k(-2m - k + 1 - 2 + 2m + k + 1)r^{m+k} + (a^2 k^2 - a^2 k^2)r^{m+2k}] e^{-ar^k} \equiv 0.$$

Лемма доказана.

Напомним, что шаровыми функциями [2] называются функции вида

$$U_{m,l} = r^m Y_{m,l}(\theta, \varphi), \quad (9)$$

где при фиксированном  $m$  функция  $Y_{m,l}(\theta, \varphi)$  может принимать любое из значений

$$Y_{m,l}(\theta, \varphi) = \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos \alpha)^m \cos l \alpha \, d\alpha \cdot \cos l \varphi \quad (l = 0, 1, 2, \dots, m); \quad (10)$$

$$Y_{m,l}(\theta, \varphi) = \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos \alpha)^m \cos l \alpha \, d\alpha \cdot \sin l \varphi \quad (l = 1, 2, \dots, m). \quad (11)$$

Линейная зависимость всех  $2m+1$  функций (10) и (11) следует из того, что зависимость этих функций от  $\varphi$  содержится в множителях  $\cos l \varphi$  и  $\sin l \varphi$  и что не может существовать линейной зависимости между этими последними функциями, поскольку они ортогональны между собой на промежутке  $(-\pi, \pi)$ .

**Теорема 1.** *Функции  $\psi$  вида*

$$\psi(r, \theta, \varphi) = c_1 r^m e^{-ar^k} Y_{m,l}(\theta, \varphi), \quad (12)$$

где  $c_1$  – произвольная постоянная, являются решениями уравнения (1).

**Доказательство.** Используя выражение оператора Лапласа в сферических координатах, приведем уравнение (1) к виду

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + b(E - U)r^2 \psi = 0. \quad (13)$$

Далее применяем метод разделения переменных, т.е. ищем решение уравнения (1) в виде произведения

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi), \quad (14)$$

которое подставляем в уравнение (1), тогда

$$Y \cdot \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) R + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \cdot R + b(E - U)r^2 R Y = 0. \quad (15)$$

После деления обеих частей уравнения (15) на  $\tilde{R} \tilde{Y}$  получаем

$$\left[ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + b(E - U)r^2 \right] + \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] \cdot \frac{1}{Y} = 0. \quad (16)$$

Поскольку переменные разделены, то

$$\frac{1}{R} \cdot \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + b(E - U)r^2 = A, \quad (17)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -AY. \quad (18)$$

В теории специальных функций доказывается, что уравнение (18) имеет ограниченные решения только при  $A = m(m+1)$  ( $m=0,1,2,\dots$ ). Это и есть сферические функции. При таких значениях  $A$  уравнение (17) приводится к виду

$$r^2 R''(r) + 2rR'(r) + [b(E - U)r^2 - m(m+1)]R(r) = 0,$$

что совпадает с уравнением (4).

Таким образом, результат теоремы следует из леммы 1.

Теорема 1 доказана.

В случае кулоновского потенциала уравнение (4) приводится к виду

$$r^2 R''(r) + 2rR'(r) + [\lambda r^2 + cr - m(m+1)]R(r) = 0 \quad (m=0,1,2,\dots), \quad (19)$$

где  $c = \frac{2\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2}$  ( $Z=1,2,3,\dots$ ); выбор величины  $\lambda$  будет проведен в процессе доказательства теоремы 2.

**Лемма 2.** Если решение уравнения (19) имеет вид

$$R(r) = e^{-ar} P(r), \quad (20)$$

где  $P(r)$  – некоторый многочлен переменной  $r$ , то многочлен  $P(r)$  должен удовлетворять уравнению

$$r^2 P''(r) + 2(r - ar^2)P'(r) + [r^2(a^2 + \lambda) + (c - 2a)r - m(m+1)]P(r) = 0. \quad (21)$$

**Доказательство.** Действительно,

$$R'(r) = -ae^{-ar} P(r) + e^{-ar} P'(r), \quad (22)$$

$$R''(r) = a^2 e^{-ar} P(r) - 2ae^{-ar} P'(r) + e^{-ar} P''(r). \quad (23)$$

и подставляя выражения (22) и (23) в левую часть уравнения (19), получаем уравнение (21).

Лемма 2 доказана.  
Если положить

$$\lambda = -a^2, \quad (24)$$

то уравнение (21) примет вид

$$r^2 P''(r) + 2(r - ar^2)P'(r) + [(c - 2a)r - m(m + 1)]P(r) = 0. \quad (25)$$

**Теорема 2.** Если

$$a = a(m, k) = \frac{c}{2(m + k + 1)} \quad (k = 0, 1, 2, \dots), \quad (26)$$

то решениями уравнения (25) являются функции

$$P_{m,k}(r) = r^m \sum_{j=0}^k b_j(k, m) r^j, \quad (27)$$

в которых коэффициент  $b_k(k, m)$  является произвольным, а остальные коэффициенты находятся по формулам

$$b_{k-q}(k, m) = \frac{(-1)^q (m+k+1)^q}{q! c^q} \left\{ \prod_{s=0}^{q-1} [(m+k-s)(m+k-s+1) - m(m+1)] \right\} b_k(k, m) \quad (q = 1, 2, \dots, k). \quad (28)$$

Функции (20) будут при этом решениями уравнения (19).

Доказательство. Итак, при  $m \geq 1$

$$P_{m,k}(r) = \sum_{j=0}^k b_j(k, m) r^{m+j},$$

тогда

$$\begin{aligned} r^2 P_{m,k}''(r) + 2(r - ar^2)P_{m,k}'(r) + [(c - 2a)r - m(m + 1)]P_{m,k}(r) &= \\ &= \sum_{j=0}^k [(m+j)(m+j-1) + 2(m+j) - m(m+1)] b_j(k, m) r^{m+j} + \\ &= \sum_{j=0}^k [c - 2a - 2a(m+j)] b_j(k, m) r^{m+j+1} = \\ &= \sum_{j=0}^k [(m+j)(m+j+1) - m(m+1)] b_j(k, m) r^{m+j} + \\ &+ c \sum_{j=0}^k \frac{k-j}{m+k+1} b_j(k, m) r^{m+j+1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Заметим, что выбор  $a = a(m, k)$  обеспечивает равенство нулю коэффициента при  $r^{m+k+1}$  в выражении (29). Пусть  $b_k(k, m)$  будет произвольным, тогда, приравнявая нулю коэффициент при  $r^{m+k}$ , получаем

$$[(m+k)(m+k+1) - m(m+1)] b_k(k, m) = -\frac{c[k - (k-1)]}{m+k+1} b_{k-1}(k, m) = -\frac{cb_{k-1}(k, m)}{m+k+1},$$

т.е.

$$b_{k-1}(k, m) = -\frac{1}{c}(m+k+1)[(m+k)(m+k+1)-m(m+1)]b_k(k, m),$$

что совпадает с (28) при  $q=1$ .

Предположим, что коэффициенты  $b_k(k, m), b_{k-1}(k, m), \dots, b_{k-s}(k, m)$  найдены, тогда при  $j=k-s$  в первой сумме выражения (29) и при  $j=k-s-1$  во второй сумме получаем

$$\begin{aligned} & [(m+k-s)(m+k-s+1)-m(m+1)]b_{k-s}(k, m) = \\ & = -c \frac{k-(k-s-1)}{m+k+1} b_{k-s-1}(k, m) = -\frac{c(s+1)}{m+k+1} b_{k-s-1}(k, m), \end{aligned}$$

$$b_{k-s-1}(k, m) = -\frac{1}{c(s+1)}(m+k+1)[(m+k-s)(m+k-s+1)-m(m+1)]b_{k-s}(k, m) \quad (s=0, 1, \dots, k-1). \quad (31)$$

Формула (28) следует непосредственно из равенства (31). Действительно, применяя необходимое число раз равенство (31), получаем

$$\begin{aligned} b_{k-q}(k, m) & = -\frac{1}{cq}(m+k+1)[(m+k-q+1)(m+k-q+2)-m(m+1)]b_{k-q+1}(k, m) = \\ & = -\frac{1}{cq}(m+k+1)[(m+k-q+1)(m+k-q+2)-m(m+1)] \times \\ & \times \frac{(-1)}{c(q-1)}(m+k+1)[(m+k-q+2)(m+k-q+3)-m(m+1)]b_{k-q+2}(k, m) = \dots = \\ & = \frac{(-1)^q (m+k+1)^q}{q!c^q} \left\{ \prod_{s=0}^{q-1} [(m+k-s)(m+k-s+1)-m(m+1)] \right\} b_k(k, m), \end{aligned}$$

что совпадает с равенством (28).

Случай, когда  $m=0$ , рассматривается аналогично.

Теорема 2 доказана.

Заметим, что формулы (28) дают удобный способ вычисления коэффициентов многочленов Чебышева-Лагерра.

Далее возникает вопрос о том, как пронормировать полученные решения. Так как квадрат  $\Psi$ -функции является плотностью вероятности, то естественно (с учетом якобиана перехода к сферическим координатам) выбрать постоянные  $c(m, k, l)$  так, чтобы выполнялось условие

$$c(m, k, l) \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\lambda \alpha(m, k) r} r^2 P_{m, k}^2(r) (\sin \theta) Y_{m, l}^2(\theta, \varphi) dr d\theta d\varphi = 1. \quad (32)$$

Далее из равенства (24) получаем

$$\lambda = \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot E(m, k) = -\frac{c^2}{4(m+k+1)^2},$$

т.е.

$$E(m, k) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{4\mu^2 Z^2 e^4}{4(m+k+1)^2 \hbar^4} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (m+k+1)^2}. \quad (33)$$

Так как главное квантовое число  $n = m + k + 1$ , то математическое ожидание радиуса  $r = r(n, n-1, 0)$  уровня энергии (33) при  $m = n-1, k = 0$  можно вычислить следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle r(n, n-1, 0) \rangle &= c(n-1, 0, l) \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi r^3 e^{-2\alpha(n-1,0)r} r^{2(n-1)} (\sin\theta) Y_{n-1,l}^2(\theta, \varphi) dr d\theta d\varphi = \\ &= \frac{\int_0^\infty e^{-2\alpha(n-1,0)r} r^{2n+1} dr}{\int_0^\infty e^{-2\alpha(n-1,0)r} r^{2n} dr}. \end{aligned}$$

Для нахождения математических ожиданий радиусов орбит нам потребуется **Лемма 3. Справедливо равенство**

$$\int_0^\infty r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{a^{n+1}}. \quad (34)$$

**Доказательство.** Действительно, [3]

$$\int r^n e^{ar} dr = e^{ar} \left[ \frac{r^n}{a} - \frac{nr^{n-1}}{a^2} + \frac{n(n-1)r^{n-2}}{a^3} - \dots + (-1)^{n-1} \frac{n!r}{a^n} + (-1)^n \frac{n!}{a^{n+1}} \right]. \quad (35)$$

Подставляя вместо  $a$  в правую часть равенства (34)  $-a$  и делая подстановку от 0 до  $\infty$ , получаем равенство (35).

Лемма 3 доказана.

Таким образом,

$$\begin{aligned} \langle r(n, n-1, 0) \rangle &= \frac{\int_0^\infty e^{-2\alpha(n-1,0)r} r^{2n+1} dr}{\int_0^\infty e^{-2\alpha(n-1,0)r} r^{2n} dr} = \frac{(2n+1)! (2a)^{2n+1}}{(2a)^{2n+2} (2n)!} = \\ &= \frac{2n+1}{2\alpha(n-1,0)} = \frac{(2n+1)n}{c} = \frac{(2n+1)n\hbar^2}{2\mu Ze^2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Покажем, что выражение (36) совпадает со второй из формул (1.14) монографии [4].

Действительно, в формуле (1.14)

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{1}{2} [3n^2 - m(m+1)] \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} = \frac{1}{2} [3(m+1)^2 - m(m+1)] \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} = \\ &= \frac{1}{2} [(m+1)(2m+3)] \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} = \frac{1}{2} [n(2n+1)] \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}. \end{aligned}$$

Применяя функции (27), можно вычислить математическое ожидание любого радиуса  $\langle r(m, k, l) \rangle$  или натуральной степени  $s$  радиуса  $\langle r^s(m, k, l) \rangle$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Левиц В.Г.** Курс теоретической физики. – Т. II / **В.Г. Левиц, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин.** – М., 1971. – С. 52.
2. **Смирнов В.** Курс высшей математики. – Т. III, часть вторая. – М., 1974. – С. 480.
3. **Двайт Г.** Таблицы интегралов и другие математические формулы. – М., 1973. – С. 116.
4. **Собельман И.** Введение в теорию атомных спектров. – М., 1977. – С. 318–319.

## S U M M A R Y

*The article deals with the problem of the representation of the potential energy of various fields of force in the form of unity formula.*

*Поступила в редакцию 29.08.2005*