Естественно сделать замену $z = \dfrac{x}{b}$. Тогда

$$\begin{aligned} \psi_n(bz) &= \left(\frac{-i}{\sqrt{2}}\right)^n \left(\frac{d}{dz} - z\right)^n \psi_0(bz), \quad \text{или} \\ \psi_n(bz) &= \left(\frac{-i}{\sqrt{2}}\right)^n \left(\frac{d}{dz} - z\right)^n e^{-\frac{z^2}{2}}. \end{aligned} \tag{2.10}$$

Определение. Полиномы Эрмита $H_n(x)$ определяются из следующих соотношений:

$$\frac{d^n e^{-x^2/2}}{dx^n} = (-1)^n e^{-x^2/2} H_n(x).$$

При этом

1) $\int H_n(x) H_m(x) e^{-x^2/2}\, dx = 0$ при $n \neq m$;
2) $\int H_n^2(x) e^{-x^2/2}\, dx = n!\sqrt{2\pi}$;
3) $H_{n+1}(x) = xH_n(x) - \dfrac{d}{dx} H_n(x)$.

Система $\{H_n(x)\}$ полна в пространстве $L_{2,\rho}(\mathbb{R})$ с $\rho = e^{-x^2/2}$.

4. Движение в трехмерном пространстве

Момент импульса

Пространство изотропно. Это означает, что все направления в нем должны быть эквивалентны. Поэтому гамильтониан замкнутой системы не меняется при поворотах. То есть $VH\psi = HV\psi$, где V — оператор поворота. Если это свойство выполняется для бесконечно малого поворота, то оно будет выполняться и для любого поворота. Найдем вид генератора бесконечно малого поворота.

Пусть $\delta\vec{\varphi}$ — вектор бесконечно малого поворота, направленный по оси поворота и равный по величине углу поворота. Тогда $\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi}, \vec{r}]$. Это верно для радиус-вектора $\vec{r}_a$ любой частицы a. Получаем

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \psi(r_1 + \delta r_1, r_2 + \delta r_2, \ldots) - \psi(r_1, r_2, \ldots) = \\ &= \sum_a \delta r_a \nabla_a \psi = \delta\vec{\varphi} \sum [\vec{r}_a, \vec{\nabla}_a]\psi. \end{aligned}$$

Оператор $1+\delta\varphi\sum[r_a,\nabla_a]$ и есть оператор бесконечно малого поворота.

Введем оператор $\vec{M}=\sum\limits_a[\vec{r}_a,\vec{p}_a]$, где $p_a=\dfrac{\hbar}{i}\nabla_a$. Из условия $V^{-1}HV=H$ и $V=1+i\delta\vec{\varphi}\dfrac{\vec{M}}{\hbar}$ следует, что $[H,\vec{M}]=0$.

Получаем, что полный момент импульса замкнутой системы сохраняется: $\dfrac{d\vec{M}}{dt}=0$.

Мы можем в дальнейшем рассматривать одну частицу. Так как операторы, относящиеся к разным частицам, коммутируют, то все коммутационные соотношения, верные для одной частицы, будут верны и для системы частиц.

Введем операторы проекций момента импульса $L_i=-i[r,\nabla]_i$ $\left(L_i=\dfrac{1}{\hbar}M_i\right)$ и оператор квадрата момента импульса $L^2=L_1^2+L_2^2+L_3^2$.

В координатном представлении имеем

$$\begin{aligned}
L_1&=i\left(x_3\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_3}\right),\\
L_2&=i\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_1}\right),\\
L_3&=i\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_2}\right).
\end{aligned}\tag{2.11}$$

Операторы L_i и L^2 удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{aligned}
&1.\ [L_i,L_j]=i\varepsilon_{ijk}L_k;\\
&2.\ [L^2,L_i]=0.
\end{aligned}\tag{2.12}$$

Из (2.12) следует, что проекции момента импульса не являются одновременно измеряемыми величинами. Одновременно могут быть измерены только квадрат момента импульса и одна из его проекций. Обычное соглашение состоит в том, что измеряемая проекция момента импульса — это $L_3=L^z$. Удобно ввести следующие операторы: $L_+=L_1+iL_2$, $L_-=L_1-iL_2$.

Легко проверить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} 1.\ & [L_+, L_-] = 2L_3; \\ & [L_3, L_+] = L_+; \\ & [L_3, L_-] = -L_-. \end{aligned} \tag{2.13}$$

2. $L^2 = L_+L_- + L_3^2 - L_3 = L_-L_+ + L_3^2 + L_3$.

Полезно также получить выражения для этих операторов в сферических координатах

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi, \\ y = r\sin\theta\sin\varphi, \\ z = r\cos\theta. \end{cases}$$

Результат имеет вид

$$\begin{aligned} 1.\ & L_3 = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}; \\ 2.\ & L_+ = e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]; \\ & L_- = e^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]; \\ 3.\ & L^2 = -\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]; \\ 4.\ & \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}L^2. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Отсюда следует, что оператор L^2 равен, с точностью до множителя, угловой части оператора Лапласа.

Спектр операторов $\mathbb{L}^2$ и L_3

Найдем собственные значения операторов $\mathbb{L}^2$ и L_3. Рассмотрим подпространство, соответствующее одному фиксированному собственному значению оператора $\mathbb{L}^2$. Обозначим его A, т. е. $\mathbb{L}^2\psi = A\psi$. Пусть ψ_M — собственный вектор L_3 из этого подпространства с собственным значением M, т. е. $L_3\psi_M = M\psi_M$. Из координатного представления $\left(L_3 = -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ получаем, что $\psi_M = f(r,\theta)e^{iM\varphi}$, а из однозначности ψ_M следует, что $M = 0, \pm 1, \ldots$ целое.

$$\left(\left(\mathbb{L}^2 - L_3^2\right)\psi_M, \psi_M\right) = \left(A\psi_M - M^2\psi_M, \psi_M\right) = A - M^2,$$

с другой стороны,

$$\left(\left(\mathbb{L}^2 - L_3^2\right)\psi_M, \psi_M\right) = \left(L_1^2\psi_M, \psi_M\right) + \left(L_2^2\psi_M, \psi_M\right) = \\ = (L_1\psi_M, L_1\psi_M) + (L_2\psi_M, L_2\psi_M) \geqslant 0.$$

Поэтому $|M| \leq \sqrt{A}$. Получаем, что собственные значения оператора L_3 на нашем пространстве ограничены сверху и снизу.

Обозначим $M_{\max} = L$. Из задачи предыдущего параграфа следует, что

(а) $L_3(L_+\psi_M) = (L_+L_3 + L_+)\psi_M = (M+1)L_+\psi_M$, т. е. $L_+\psi_M = \psi_{M+1}$ и, также, $L_-\psi_M = \psi_{M-1}$;
(б) $L_+\psi_L = 0$ и $\mathbb{L}^2\psi_L = \left(L_-L_+ + L_3^2 + L_3\right)\psi_L = L(L+1)\psi_L$, т. е. $A = L(L+1)$;
(в) $L_-\psi_{-L} = 0$.

Получаем, что собственное подпространство с фиксированным собственным значением $L(L+1)$ оператора $\mathbb{L}^2$ имеет размерность $2L + 1$ и набор собственных значений оператора L_3 на нём $\mathcal{L} = \{-L, \ldots, L-1, L\}$.

Говорят, что уровень энергии, соответствующий моменту L, $(2L + 1)$-*кратно вырожден*. Об это вырождении обычно говорят как о *«вырождении по направлениям момента»*, и считают его не случайным.

Если же собственному значению оператора (например, $\mathbb{L}^2$ или H) соответствует не одно подпространство, т. е. инвариантное подпространство данного уровня раскладывается в сумму нескольких неприводимых, то физики называют такое вырождение *случайным*.

Теперь можно найти матричные элементы операторов L_3, L_+ и L_- в этом подпространстве (представлении) в базисе собственных векторов $\psi_M = |M\rangle$ оператора L_3.

$$(L_3)_{MM'} = M\delta_{MM'}, \quad \text{где } M \in \mathcal{L}.$$

$$L(L+1) = \langle M|L_+|M-1\rangle\langle M-1|L_-|M\rangle + M^2 - M = \\ = (\langle M|L_+|M-1\rangle)^2 + M^2 - M.$$

Следовательно,

$$\langle M|L_+|M-1\rangle = \langle M-1|L_-|M\rangle = \sqrt{(L+M)(L-M+1)}.$$

Собственные функции оператора момента

В этом параграфе все большие буквы становятся маленькими: $L = l$, $M = m$.

Пусть $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — собственные функции операторов $\mathbb{L}^2$ и L_3, которые при фиксированном l образуют $(2l+1)$-мерное представление алгебры $\mathfrak{so}(3)$:

$$\begin{cases} \mathbb{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi), \\ L_3 Y_{lm}(\theta,\varphi) = mY_{lm}(\theta,\varphi). \end{cases}$$

Из формул предыдущих параграфов следует, что

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}\theta_{lm}(\theta),$$
$$Y_{ll}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi}\theta_{ll}(\theta),$$
$$\frac{d\theta_{ll}(\theta)}{d\theta} - l\operatorname{ctg}\theta\,\theta_{ll}(\theta) = 0 \qquad (L_+Y_{ll} = 0).$$

Решая последнее уравнение, получаем

$$\theta_{ll}(\theta) = N_l \sin^l\theta.$$

Осталось только воспользоваться равенством $L_-\psi_M = \psi_{M-1}$:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{(2l)!}} (L_-)^{l-m} Y_{ll}(\theta,\varphi).$$

Движение в центрально-симметричном поле

Оператор Шредингера для свободной частицы в трехмерном пространстве в координатном представлении имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta.$$

Уравнение на собственные функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi, \quad E = k^2 > 0$$

имеет решения

$$\psi_{\vec{k}}(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} e^{i\frac{\sqrt{2m}k}{\hbar}(\vec{x},\vec{k})},$$

где $\vec{k} \in S^2$ — вектор на единичной сфере.

Спектр оператора H является положительным, непрерывным и бесконечнократным. Каждому направлению $\vec{k}$ соответствует собственная функция $\psi_{\vec{k}}(x)$. Собственные функции «нумеруются» точками единичной сферы.

Оператор Шредингера для частицы в потенциальном поле в координатном представлении имеет вид $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$.

Как и в классической механике, в квантовой механике к задаче о движении частицы в потенциальном поле сводится задача о движении двух тел.

Рассмотрим систему двух частиц m_1 и m_2 с потенциалом взаимодействия $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$. Оператор Шредингера для такой системы в координатном представлении имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2).$$

Как и в классической задаче, введем переменные:

$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2}, \quad x = x_1 - x_2, \quad M = m_1 + m_2,$$

$$\mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} \text{ — приведенная масса.}$$

В новых переменных

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_X - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x + V(x).$$

В уравнении на собственные значения

$$H\Psi(X, x) = E\Psi(X, x)$$

переменные разделяются, и решение можно искать в виде

$$\Psi(X, x) = \psi(X)\psi_1(x).$$

Функции $\psi(X)$ и $\psi_1(x)$ удовлетворяют уравнениям

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi(X) = \varepsilon\psi(X),$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi_1(x) + V(x)\psi_1(x) = \varepsilon_1\psi_1(x).$$

где $E = \varepsilon + \varepsilon_1$. Первое из этих уравнений есть уравнение на собственные значения оператора Шредингера свободной частицы, а второе совпадает с уравнением Шредингера для частицы массы μ в потенциале $V(x)$.

Как и в классическом случае, наиболее важным является случай центрально-симметричного поля, в котором $V(x) = V(|x|) = V(r)$.

Уравнение Шредингера для движения частицы в центрально-симметричном поле имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\psi = 0. \tag{2.15}$$

Будем искать стационарные состояния в виде

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

т. е. рассматривать волновые функции с фиксированным значением момента l и его проекции m:

$$H\Psi = E\Psi, \quad L^2\Psi = l(l+1)\Psi, \quad L_3\Psi = m\Psi.$$

Вспомнив (7.4.4), получаем

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]R(r)=0. \quad (2.16)$$

Заметим, что уравнение (2.16) не содержит значения проекции момента m, что соответствует $(2l+1)$-кратному вырождению по направлению момента.

Движение в кулоновом поле

Кулоновым, как и в классике, называется потенциал вида $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r}$. Уравнение (2.16) примет вид

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+\frac{\alpha}{r}\right]R=0. \quad (2.17)$$

При замене $r=\dfrac{\hbar^2}{m\alpha}r_1$, $E=\dfrac{m\alpha^2}{\hbar^2}E_1$ уравнение (2.17) преобразуется в

$$R''+\frac{2}{r}R'-\frac{l(l+1)}{r^2}R+2\left(E+\frac{1}{r}\right)R=0. \quad (2.18)$$

Рассмотрим поведение решения $R(r)$ в двух случаях.

(1) $r\to 0$, $R(r)\to r^{\alpha}$.

При $r\to 0$ главными являются первые три члена уравнения (2.18). Приравнивая нулю коэффициенты в (2.18) при $r^{\alpha-2}$, получаем

$$\alpha(\alpha-1)+2\alpha-l(l+1)=0 \quad (2.19)$$

или $\alpha(\alpha+1)=l(l+1)$. Следовательно, $\alpha=l$ или $\alpha=-(l+1)$. Отсутствие расходимости при $x=0$ диктует выбор

$$\alpha=l.$$

(2) $r\to\infty$.

При $r\to\infty$ главными являются члены

$$R''+2ER=0, \quad \text{т. е.} \quad R(r)=e^{\pm\sqrt{-2E}\,r}f(r).$$

При отрицательных значениях спектра $E < 0$ отсутствие расходимости при $r \to \infty$ диктует выбор знака

$$R(r) = e^{-\sqrt{-2E}\,r} f(r).$$

Обозначим $n = \dfrac{1}{\sqrt{-2E}}$ (пока это только обозначение, но скоро будет показано, что n — целое).

Будем искать решение

$$R_{nl}(r) = r^l e^{-\sqrt{-2E}\,r} W(r). \tag{2.20}$$

Подставляя (2.20) в (2.18), получаем уравнение на $W(r)$:

$$W'' + \left[(2l+1)\frac{1}{r} + 2\left(-\sqrt{-2E}\right)\right] W' + \\ + \left[(2l+1)\left(-\sqrt{-2E}\right)\frac{1}{r} + \frac{2}{r}\right] W = 0. \tag{2.21}$$

Уравнение (2.21) является вырожденным гипергеометрическим уравнением, про которое известно, что решение (2.21), имеющее постоянный предел при $r \to 0$ и растущее не быстрее степени на ∞, существует при $-(-2E)^{-1/2} = n$ целом. Получаем, что $E = -\dfrac{1}{2n^2}$, где n — целое. Вспомнив замену, сделанную в уравнении (2.17), получаем дискретный спектр кулонового потенциала:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}. \tag{2.22}$$

Скрытая симметрия в кулоновой задаче

Положим $m = 1$, $\alpha = 1$, $\hbar = 1$. Заметим, что получив ответ в безразмерном виде, правильный ответ можно восстановить из соображений размерности, замечая, что

$$[L] = \frac{\hbar^2}{m\alpha}, \quad [T] = \frac{\hbar^3}{m\alpha^2}, \quad [M] = m, \quad [E] = \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}.$$

Гамильтониан кулоновой задачи равен $\widehat{H} = \dfrac{\widehat{p}^{\,2}}{2} - \dfrac{1}{r}$, где $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$.

В классическом случае в кулоновой задаче существует первый интеграл вида

$$\vec{A} = \frac{\vec{r}}{r} - [\vec{p}, \vec{L}].$$

Рассмотрим аналогичный оператор в квантовой задаче:

$$\widehat{\vec{A}} = \frac{\widehat{\vec{r}}}{r} - [\widehat{\vec{p}}, \widehat{\vec{L}}],$$

где последняя скобка понимается сначала как векторное произведение векторов, а потом — превращение их в операторы, т. е.

$$\begin{aligned}
\widehat{A}_1 &= \frac{x_1}{r} - p_2 L_3 + p_3 L_2, \\
\widehat{A}_2 &= \frac{x_2}{r} - p_3 L_1 + p_1 L_3, \\
\widehat{A}_3 &= \frac{x_3}{r} - p_1 L_2 + p_2 L_1.
\end{aligned}$$

Выполняются следующие соотношения для операторов A_i:

$$\begin{aligned}
[L_i, A_k] &= i\varepsilon_{ijk} A_k, \\
[A_i, A_k] &= -2i\varepsilon_{ijk} H L_k.
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Из соотношений (2.23) или прямым вычислением легко получить, что

$$[H, A_k] = 0. \tag{2.24}$$

Последнее соотношение показывает, что и в квантовой кулоновской задаче $\vec{A}$ является первым интегралом.

Фиксируем уровень энергии $E < 0$, т. е.рассмотрим подпространство $H\psi = E\psi$. На этом подпространстве последнее соотношение (2.23) примет вид

$$[A_i, A_k] = -2Ei\varepsilon_{ijk} L_k. \tag{2.25}$$

Введем новые операторы $\vec{N} = \dfrac{\vec{A}}{\sqrt{-2E}}$. С учетом этой нормировки коммутационные соотношения для L_k и N_k выглядят как соотношения для образующих алгебры $\mathfrak{so}(4)$:

$$\begin{cases} [L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}L_k, \\ [L_i, N_k] = i\varepsilon_{ijk}N_k, \\ [N_i, N_k] = i\varepsilon_{ijk}L_k. \end{cases} \tag{2.26}$$

Мы получили, что пространство состояний с заданной энергией — это пространство представления группы O(4).

На этом подпространстве выполнены соотношения

$$\begin{gathered} \vec{L}\vec{N} = 0, \\ L^2 + N^2 = -1 - \frac{1}{2E}. \end{gathered} \tag{2.27}$$

Алгебра $\mathfrak{o}(4)$ изоморфна $\mathfrak{o}(3) \times \mathfrak{o}(3)$. Действительно, введем операторы

$$\vec{J_1} = \frac{1}{2}(\vec{L} + \vec{N}), \quad \vec{J_1} = \frac{1}{2}(\vec{L} - \vec{N}).$$

Легко проверить, что компоненты каждого из операторов $\vec{J_i}$ коммутируют, как образующие $\mathfrak{so}(3)$, т. е.

$$\begin{aligned} &[J_{1i}, J_{1j}] = i\varepsilon_{ijk}J_{1k}, \\ &[J_{2i}, J_{2j}] = i\varepsilon_{ijk}J_{2k}, \\ &[J_{1i}, J_{2j}] = 0. \end{aligned}$$

Для новых операторов $\vec{J_i}$ соотношения (2.27) примут вид

$$\vec{J_1}^2 = \vec{J_1}^2 = -\frac{1}{4}\left(1 + \frac{1}{2E}\right) = j(j+1).$$

Последнее равенство пока что является только обозначением. Можно показать, повторяя почти дословно рассуждения из предыдущей лекции, что j — целое или полуцелое.

Из соотношений (2.27) следует, что $j_= j_2 = j$ и, кроме того, $E_n = -\dfrac{1}{2(2j+1)^2} = -\dfrac{1}{2n^2}$. Переходя к размерным величинам, имеем $E_n = -\dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$.

Уровни с данной энергией E_n не зависят от l и m и, следовательно, $(2j+1)(2j+1) = n^2$-кратно вырождены. Это случайное вырождение объясняется O(4)-симметрией.

Движение в кулоновом поле. Продолжение

Вернемся к уравнению

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \frac{l(l+1)}{r^2}R + 2(E + 1/r)R = 0.$$

Решим его другим методом. Чтобы избавиться от первой производной, сделаем замену $R(r) = \dfrac{\chi(r)}{r}$ с условием, что $\int |\chi(r)|^2\, dr$ должен сходиться при $r = 0$. Получаем

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r}\right]\chi = -2E\chi.$$

При $r \to \infty$ решение должно иметь асимптотику $\chi \to e^{-\sqrt{-2E}r}$. Сделаем еще замену $\chi(r) = f(r)e^{-r/a}$, где $a = \dfrac{1}{\sqrt{-2E}}$. Получаем

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{a}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{-2}{r}\right] f = 0.$$

Будем искать решение в виде ряда $f(r) = \sum c_s r^s$. Тогда

$$\sum_s \left\{ s(s-1)z^{s-2} - \frac{2s}{a}r^{s-1} - l(l+1)r^{s-2} + 2r^{s-1} \right\} = 0,$$

и мы получаем рекуррентное соотношение

$$c_s[s(s-1) - l(l+1)] = c_{s-1}\left[2\frac{s-1}{a} - 2\right]. \qquad (8.15)$$

Из условия на $\int |\chi(r)|^2\, dr$ следует, что $s = l + 1$.

Рассмотрим теперь асимптотику ряда при больших s. Тогда $\dfrac{c_s}{c_{s-1}} \sim \sim \dfrac{2}{sa}$. Поэтому, если ряд не обрывается при больших s, то он сходится к $\sum \dfrac{1}{s!}\left(\dfrac{2r}{a}\right)^s = e^{2r/s}$, и при больших r получаем $\chi(r) \to e^{r/a}$, что физически неприемлемо.

Ряд оборвется, если для некоторого $s = n + 1$, $(n > l)$ будет выполнено соотношение $\left[2\dfrac{n}{a} - 2\right] = 0$. Тогда $c_{n+1} = c_{n+2} = \ldots = 0$. Отсюда $E = -\dfrac{1}{2n^2}$.

Или, в размерных величинах, $E_n = -\dfrac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$.

Замечание. Формула (2.23) для энергетических уровней в кулоновской задаче позволяет вычислить частоты спектральных линий, например, для атома водорода ($\alpha = e^2$). Из (2.23) и формулы Бора

$$\hbar\omega_{mn} = E_n - E_m, \quad E_n > E_m$$

получается формула

$$\omega_{mn} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad n < m. \tag{2.28}$$

Вычисленные по формуле (2.28) спектральные линии атома водорода с удивительной точностью совпадают со спектральными линиями (серия Лаймана, Бальмера, Пашена и т. д.) реального атома водорода, наблюдаемыми в эксперименте (см. введение ко второй части).

Итак, мы получили, что уровню $E_n = -\dfrac{\mu\alpha^2}{2n^2\hbar^2}$ соответствуют волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = r^l e^{-\sqrt{\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2 n^2}}\, r} P_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где $P_{nl}(r) = f(r)$ — многочлен, коэффициенты которого вычисляются по формуле (8.15), степени $n - l - 1$.

Проверим еще раз, что степень вырождения равна n^2. Для этого нужно подсчитать число функций $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ для данного n. Оно равно $\sum\limits_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$.

Спин электрона

Рассмотрим систему частиц как единое целое, находящееся в определенном состоянии. Она обладает определенной внутренней энергией (собственное значение оператора H) и определенным моментом (собственное значение оператора L^2). Естественно и каждой элементарной частице приписать некоторый «собственный» момент.

Стоит еще раз упомянуть опыты Штерна и Герлаха, показавшие, что при включении магнитного поля пучок атомов водорода раздваивается. Это означает, что проекция на направление магнитного поля момента атома водорода в основном состоянии принимает два значения. Абсолютно так же ведет себя и пучок электронов. Поэтому естественно считать, что электрон имеет собственный момент импульса, проекция которого на некоторое направление принимает два значения.

Собственный момент электрона называется *спином*, а момент импульса, связанный с движением электрона в пространстве, называется *орбитальным моментом*.

Полный момент системы частиц является суммой их орбитальных моментов и спинов.

Итак спин — это новая наблюдаемая, принимающая два значения. Следовательно, число состояний электрона должно удвоиться. Мы должны считать, например, что электрон может находиться в двух различных внутренних состояниях, не зависящих от его «внешнего» состояния. Посмотрим, как математически описать эту ситуацию для электрона.

Пусть $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ — пространство состояний электрона и $\Psi(x, y, z) \in \mathcal{H}$. Рассмотрим пространство $H = \mathbb{C}^2$ с базисом $h_1 = \binom{1}{0}$ и $h_2 = \binom{0}{1}$. В этом пространстве и будет действовать наблюдаемая спин. Теперь пространством состояний с учетом спина будет

$$\mathcal{H}_S = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes H.$$

Самосопряженный оператор S, действующий в H, можно представить в виде

$$S = \alpha_0 I + \alpha_1\sigma_1 + \alpha_2\sigma_2 + \alpha_3\sigma_3, \quad \text{где}$$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

матрицы Паули.

Обозначим $s_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$, $j = 1, 2, 3$.

Легко проверить, что s_j удовлетворяют коммутационным соотношениям (2.11)

$$[s_i, s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k\hbar.$$

Таким образом, операторы s_j удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и компоненты углового момента. Поэтому естественно считать, что s_j соответствуют вкладу собственного углового момента. Квадрат оператора $s^2 = s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 = s(s+1)\hbar^2$, где $s = \frac{1}{2}$. Именно в этом смысле говорят, что спин электрона равен $\frac{1}{2}$.

Пространство состояний $\mathcal{H}_S$ естественно представлять как пары функций

$$\Psi(x,y,z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x,y,z) \\ \psi_2(x,y,z) \end{pmatrix},$$

отождествив $\psi(x,y,z) \otimes h_1$ с $\binom{\psi(x,y,z)}{0}$, а $\psi(x,y,z) \otimes h_2$ с $\binom{0}{\psi(x,y,z)}$.

Вектор-функция $\Psi(x,y,z) = \binom{\psi_1}{\psi_2}$ называется спинором. Физики $\Psi(x,y,z)$ записывают как $\Psi(x,y,z,\sigma)$, понимая $\sigma = \frac{1}{2}$ (или «+») как компоненту $\mathcal{H} \otimes h_1$, $\sigma = -\frac{1}{2}$ (или «−») как компоненту $\mathcal{H} \otimes h_2$.

Если сферически-симметричному гамильтониану H соответствует представление ρ_1 в пространстве $\mathcal{H}$ и ρ_2 в пространстве H, то

$$\rho_s(g) = \rho_1(g) \otimes \rho_2(g)$$

представление SO(3) в пространстве $\mathcal{H}_S = \mathcal{H} \otimes H$.

Пусть $\rho_1(g) = e^{-i(L_j a_j)}$, $\rho_2(g) = e^{-is_j a_j}$, где a_j — параметры. Легко проверить, что

$$\left.\frac{\partial \rho_s(g)}{\partial a_j}\right|_{a=0} = -i(L_j \otimes I + I \otimes s_j), \quad j = 1, 2, 3.$$

Следовательно, для системы со сферически-симметричным оператором Шредингера справедлив закон сохранения полного момента импульса $J_j = L_j + s_j$.

5. Теория возмущений

Точному решению уравнения Шредингера

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{2.29}$$

поддаются немногие системы. Однако если $H = H_0 + V$, H_0 — точно решаемая задача, а $V \ll H_0$ — малое возмущение, то задачу с