

ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ПОЧТИ КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ

Д.В. Калиновский, студент, Е.С. Савин, доцент

кафедра Высшей и прикладной математики

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

e-mail: dcalinovschi@yahoo.com

Получено аналитическое решение уравнения Шредингера для двумерного атома водорода, в котором движение электрона происходит в почти кулоновском поле протона. Получены формулы для собственных значений энергии и собственных волновых функций для случаев дискретного и непрерывного спектра. Обнаружено расщепление энергетических уровней, обусловленное не кулоновским взаимодействием. Определена ширина системы подуровней, образующих тонкую структуру.

Ключевые слова: двумерный атом водорода, некулоновское взаимодействие, уравнение Шредингера, собственная энергия, собственная функция.

В работе [1] в нерелятивистском случае решены различные вопросы, связанные с двумерным атомом водорода, под которым понимали такую систему из электрона и протона, движение в которой электрона вокруг протона происходит в силу внешних ограничений в плоскости. Центральную силу между электроном и протоном считали кулоновской функцией притяжения.

В настоящей работе рассматривается двумерная задача о движении электрона в почти кулоновском поле атомного ядра. Данная задача представляет непосредственный физический интерес, в частности, в сильно анизотропных кристаллах. Движение электрона происходит в плоскости, причем потенциальная энергия взаимодействия зависит только от расстояния до центра, но имеет лишь приближенно кулоновский вид [2]. Отметим, что до настоящего времени проводится экспериментальная проверка закона Кулона. Если выяснится, что закон Кулона не является точным законом «обратных

квадратов», то важнейшее предположение квантовой электродинамики – масса покоя фотона должна быть равной нулю [3] – будет ошибочным.

Пусть потенциальная энергия электрона, движущегося в поле ядра с зарядом Ze , дается формулой

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r), \quad (1)$$

где первое слагаемое справа – кулоновское притяжение

$$U_1(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Второе слагаемое представим в виде

$$U_2(r) = \frac{\gamma}{r^2},$$

где γ – константа ($\gamma > 0$). В полярной системе координат уравнение Шредингера, описывающее движение электрона в поле неподвижного ядра атома, будет иметь вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{Ze^2}{r} + \frac{\gamma}{r^2} \right] \psi(r, \varphi) = E \psi(r, \varphi), \quad (2)$$

где m – масса электрона.

Используя разделение переменных

$$\psi(r, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi), \quad (3)$$

получим

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -l^2. \quad (4)$$

$$\frac{1}{R} \left(r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\gamma}{r^2} \right) = l^2. \quad (5)$$

Решение уравнения (4), удовлетворяющее условию однозначности, есть функция

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi}, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

При решении радиального уравнения (5) рассмотрим сначала состояния, принадлежащие дискретному энергетическому спектру. Согласно [4] эти состояния отвечают финитному

движению электрона и, следовательно, их энергия отрицательна, $E < 0$.

Введем новую переменную $\rho = \alpha r$ и обозначения

$$\alpha^2 = \frac{8m|E|}{\hbar^2}, \quad \lambda = \frac{2mZe^2}{\hbar^2}, \quad \nu_0 = \frac{2m}{\hbar^2} \gamma. \quad (7)$$

Тогда уравнение (5) переписывается в виде

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l^2 + \nu_0}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (8)$$

На больших расстояниях ($\rho \rightarrow \infty$) асимптотическое поведение $R(\rho)$ будет определяться уравнением

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R = 0.$$

Исчезающее на бесконечности решение это-

го уравнения ведет себя как $R \sim e^{-\frac{\rho}{2}}$. При $\rho \rightarrow 0$ решение уравнения, следующего из (8)

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l^2 + \gamma_0}{\rho^2} R = 0,$$

ищем в виде $R \sim \rho^s$. После подстановки получим уравнение, определяющее параметр s : $s^2 = l^2 + \gamma_0$, из которого следует, что $s = \pm \sqrt{l^2 + \gamma_0}$. Для того, чтобы $R(\rho)$ стремилось к нулю при $\rho \rightarrow 0$, надо взять только одно решение

$$s = \sqrt{l^2 + \gamma_0}.$$

Следуя [4], будем искать решение уравнения (8) в виде

$$R = \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} \omega(\rho). \quad (9)$$

Подставляя (9) в (8), получаем уравнение для $\omega(\rho)$:

$$\rho \omega'' + (2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1 - \rho) \omega' + (\lambda - \sqrt{l^2 + \gamma_0} - \frac{1}{2}) \omega = 0. \quad (10)$$

Решением этого уравнения, которое при $\rho = 0$ должно быть конечным, является вырожденная гипергеометрическая функция

$$\omega = AF(-\lambda + \sqrt{l^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2}, 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1, \rho), \quad (11)$$

где A – константа.

Функция $R(\rho)$ (9) будет удовлетворять условию на бесконечности, если $\omega(\rho)$ (11) является полиномом. Это возможно, если выполняется условие

$$-\lambda + \sqrt{l^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2} = -p, p = 0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

С учетом выражений (11) и (12) радиальная волновая функция (9) примет вид

$$R_{p,l}(\rho) = A \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} F(-p, 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1, \rho). \quad (13)$$

Соотношение (12) определяет дискретные энергетические уровни. Учитывая определение (7) параметра λ , находим

Вычисление нормировочного интеграла

$$A^2 \left[\frac{p! \Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}{\alpha \Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)} \right]^2 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1} (L_p^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}}(\rho))^2 d\rho = 1.$$

можно выполнить, используя рекуррентное соотношение $L_n^{\alpha} = L_n^{\alpha+1} - L_{n-1}^{\alpha+1}$ и условие ортогональности полиномов Лагерра [5]. Для радиальной волновой функции (17) получим

$$R_{p,l} = \frac{\alpha \sqrt{p!}}{\sqrt{\Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1) \Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}} \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} L_p^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}}(\rho). \quad (18)$$

$$R_{p,l} = \frac{\alpha \sqrt{\Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}}{\sqrt{p! \Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1) \Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}} \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} F(-p, 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1, \rho). \quad (19)$$

Учитывая определение полиномов Лагерра [5]

$$E_{p,l} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 \left(\sqrt{l^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2} \right)^2}. \quad (14)$$

При отрицательном значении γ_0 энергетические уровни существуют лишь при $l^2 \geq \gamma_0$. Согласно (14), в отличие от чисто кулоновского случая, уровни энергии зависят от двух квантовых чисел p и l . Существует вырождение p -ого уровня энергии по азимутальному числу l : при заданном p состояния с $\pm l$ обладают одинаковой энергией. Ширина системы энергетических подуровней, образующих тонкую структуру, составляет величину

$$\Delta E_p = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \left[\frac{1}{\left(\sqrt{l^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2} \right)^2} - \frac{1}{\left(p + \sqrt{(p-1)^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2} \right)^2} \right]. \quad (15)$$

Отметим, что для трехмерного атома водорода расщепление уровней энергии обусловлено релятивистским эффектом [2].

Согласно (14) значениям $p=0$ и $l=0$ соответствует низший энергетический уровень (основное состояние) частицы в почти кулоновском поле

$$E_0 = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 \left(\frac{1}{2} \right)^2}. \quad (16)$$

Имеется бесконечное множество уровней между основным состоянием E_0 и значением $E=0$ при $\rho \rightarrow \infty$.

Согласно [5] вырожденную гипергеометрическую функцию можно выразить через полиномы Лагерра, так что

$$R_{p,l} = A \frac{p! \Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}{\Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)} \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} L_p^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}}(\rho). \quad (17)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма – функция.

Константу A можно найти из условия нормировки

$$\int_0^\infty R_{p,l}^2 r dr = 1.$$

$$I_n^\alpha(x) = e^x \frac{x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}), n = 0, 1, 2, \dots,$$

приведем в явном виде несколько первых функций R_{pl} :

$$R_{00} = \frac{\alpha}{\sqrt{\Gamma(2\sqrt{\gamma_0}+1)(2\sqrt{\gamma_0}+1)}} \rho^{\sqrt{\gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}}.$$

$$R_{10} = \frac{\alpha}{\sqrt{\Gamma(2\sqrt{\gamma_0}+2)(2\sqrt{\gamma_0}+3)}} \rho^{\sqrt{\gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} (1 + 2\sqrt{\gamma_0} - \rho).$$

$$R_{20} = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{\Gamma(2\sqrt{\gamma_0}+3)(2\sqrt{\gamma_0}+5)}} \rho^{\sqrt{\gamma_0}} e^{-\frac{\rho}{2}} [(1 + 2\sqrt{\gamma_0})(1 + \sqrt{\gamma_0}) - (2 + 2\sqrt{\gamma_0})\rho + \rho^2].$$

Вблизи начала координат радиальная волновая функция R_{pl} имеет вид

$$R_{pl} = \frac{\alpha}{\Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)} \sqrt{\frac{\Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}{p!(2p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}} \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}}.$$

На больших расстояниях, учитывая, что при целочисленном значении параметра p вырожденная гипергеометрическая функция сводится к полиному p -ой степени, получим

$$R_{pl} \approx (-1)^p \frac{\alpha \sqrt{\Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)} \left(\prod_{k=0}^{p-1} (2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1 + k) \right)^{-1}}{\sqrt{p!(2p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1) \cdot \Gamma(2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{p + \sqrt{l^2 + \gamma_0}}.$$

Выражение (18) при $\rho \rightarrow \infty$, учитывая асимптотическое представление полиномов Лагерра для больших значений индекса p [5], принимает вид

$$R_{pl} \approx \frac{\alpha \sqrt{p!} p^{\sqrt{l^2 + \gamma_0} - \frac{1}{4}} \rho^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi \Gamma(p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1) (2p + 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1)}} \cos(2\sqrt{p\rho} - \pi\sqrt{l^2 + \gamma_0} - \frac{\pi}{4}).$$

Средние значения различных степеней r , которые используются при решении различных физических задач, вычисляются по формуле

$$(\bar{r}^k)_{pl} = \int_0^\infty r^{k+1} (R_{pl})^2 dr. \quad (20)$$

Используя для функции $R_{pl}(r)$ представление через вырожденную гипергеометрическую функцию (19), интеграл (20) можно вычислить по формуле (f7) из [4]. Получим

$$(\bar{r}^k)_{pl} = \frac{\Gamma(p+q+1)\Gamma(k+q+2)}{\alpha^k \Gamma^2(q+1) \cdot (2p+q+1) \prod_{s=1}^p (q+s)} \left\{ 1 + \frac{p(k+2)(k+1)}{1^2(q+1)} + \dots + \frac{p(p-1)\dots(-k-p-1)\dots(-k+p-2)}{1^2 \dots p^2 \prod_{s=1}^p (q+s)} \right\}, \quad (21)$$

где $q = 2\sqrt{l^2 + \gamma_0}$.

Приведем некоторые частные случаи выражения (21)

$$(\bar{r})_{pl} = \frac{\Gamma(p+q+1)\Gamma(q+3)}{\alpha \Gamma^2(q+1) (2p+q+1) \prod_{s=1}^p (q+s)} \left[1 + \frac{6p}{q+1} + \frac{6p(p-1)}{(q+1)(q+2)} \right].$$

$$(\bar{r}^{-1})_{pl} = \frac{\alpha \Gamma(p+q+1)}{\Gamma(q+1) (2p+q+1) \prod_{s=1}^p (q+s)}.$$

Перейдем к исследованию стационарных состояний движения электрона в почти кулоновском поле (1) при положительной энергии $E > 0$. Тогда уравнение (8) для функции $R(\rho)$ примет вид

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4} - \frac{l^2 + \gamma_0}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (22)$$

Асимптотическое значение при $\rho \rightarrow \infty$ функции

$$R\rho \sim e^{i\frac{\rho}{2}} \Re e^{-i\frac{\rho}{2}}$$

остается конечным при отличных от нуля значениях A и B . Следовательно, собственные значения энергии при $E > 0$ соответствуют непрерывному спектру.

Асимптотическое значение $R(\rho)$ при $\rho \rightarrow 0$ должно определяться так же, как и в случае отрицательных энергий:

$$R\rho \square \sqrt{l^2 + \gamma_0}.$$

Таким образом, решение уравнения (22)

будем искать в виде

$$R(\rho) = e^{\pm i \frac{\rho}{2}} \rho^s \omega(\rho). \quad (23)$$

Подставляя (23) в (22) получим уравнение для $\omega(\rho)$:

$$\rho \omega'' + (2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1 - i\rho)\omega' + (\lambda - i(\sqrt{l^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2}))\omega = 0.$$

Решением этого уравнения является вырожденная гипергеометрическая функция и, следовательно, радиальные собственные функции непрерывного спектра имеют вид

$$R_{pl}(\rho) = c_{pl} e^{-i \frac{\rho}{2}} \rho^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} F(-\lambda + i(\sqrt{l^2 + \gamma_0} + \frac{1}{2}), 2\sqrt{l^2 + \gamma_0} + 1, i\rho), \quad (24)$$

где c_{pl} - нормировочный множитель, который определяется из условия нормировки на δ -функцию

$$\int_0^\infty R_{pl}^*(r) R_{p'l}(r) r dr = \delta(p - p').$$

В результате получим

$$c_{pl} = \lambda \alpha \sqrt{\frac{2p}{1-e^{-\frac{2\pi}{p}}}} \prod_{n=1}^{\sqrt{l^2 + \gamma_0}} \sqrt{(n + \frac{1}{2})^2 + \frac{1}{p^2}}.$$

В почти кулоновском поле отталкивания

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r} - \frac{\gamma}{r^2}.$$

полная энергия электрона может быть только положительной. В таком поле уравнение Шредингера может быть формально получено из уравнения для поля (1) изменением знака у r . Поэтому волновые функции стационарных состояний получаются непосредственно из (24) посредством такой же замены.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Yang X.L., Guo S.X., Chan F.T., Wong K.W., Ching W.Y., Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. Nonrelativistic theory // Physical Review A. 1991. V. 43. № 3. P. 1186–1192.
2. Шифф. Л. Квантовая механика. М.: ИЛ, 1959. 473 с.
3. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969. 432 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Изд-во физ.-мат. лит-ры, 1963. 702 с.
5. Лебедев Н.Н. Специальные функции и их приложения. М.: Изд-во физ.-мат. лит-ры, 1963. 358 с.

THE ELECTRON MOTION IN THE PRACTICALLY COULOMB FIELD

D.V. Kalinovsky[@], E.S. Savin

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technology, Moscow, 119571 Russia

[@]Corresponding author e-mail: dcalinovschi@yahoo.com

If the motion of the electron around the proton is constrained in a plane by certain external conditions, then such a system is called the two-dimensional hydrogen atom. In this paper the Schrödinger equation for the 2-D hydrogen atom in the almost Coulomb field is solved. Traditionally the studies of the 2-D hydrogen atom have been carried out, because it is a good approximation for the analysis of the motion of the electron in anisotropic crystals. Furthermore, a different application of the 2-D case is the motion with relativistic velocities. In this paper we will examine the 2-D hydrogen atom in the almost Coulomb field, i.e., to the potential energy of the Coulomb field value which is $U(r) = -a/r$ the term γ/r^2 will be added. One can explain the nature of the term by examining the relativistic case. Below the formulas for the radial and angular parts of the wave function were evaluated. The term for the energetic levels of the hydrogen atom for specific quantum numbers was given. We calculated the values of several specific radial functions for different quantum numbers, as well as the values of the radial function at the origin of coordinates and wide apart. A number of mean values for different powers of r was calculated. For the continuous spectrum the radial eigenfunctions were calculated.

Key words: *two-dimensional hydrogen atom, noncoulomb interaction, Schrödinger equation, energy eigenvalues, eigenfunctions.*