ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Е.Л. Гуща, Е.Е. Трофименко

Белорусский национальный технический университет,
кафедра технической физики, г. Минск

Предложен способ решения уравнения Шредингера для атома водорода, основанный на использовании преобразования Лапласа.

Квантование уровней энергии связанных состояний представляет собой самый впечатляющий экспериментальный факт, обусловивший крушение классических представлений и положенный в основу квантовой механики. Квантование энергии является следствием естественных требований, накладываемых на волновую функцию: волновая функция и ее первые пространственные производные должны быть конечны, однозначны и непрерывны.

В курсе физики технических вузов традиционно рассматривается только одна точно решаемая квантовомеханическая задача о частице в бесконечно глубокой потенциальной яме. Квантование энергии в этом случае является следствием требования непрерывности волновой функции на стенках потенциальной ямы. Рассмотрение квантовомеханической задачи об атоме водорода, в которой квантование уровней энергии вытекает из требования ограниченности волновой функции электрона:

$$\psi(r) \underset{r\to\infty}{\to} \frac{e^{-kr}}{r}, \quad k=\sqrt{-2mE}$$

(для простоты мы используем систему единиц, в которой $\hbar = c = 1$), сводится лишь к анализу решения стационарного уравнения Шредингера. Привести же само решение уравнения Шредингера не представляется возможным, прежде всего из-за недостаточной математической подготовки студентов.

В работе предлагается способ решения уравнения Шредингера для атома водорода, основанный на применении преобразования Лапласа, которое в технических вузах достаточно подробно изучается в курсе математики. В этом случае задача сводится к решению дифференциального уравнения первого порядка, которое легко интегрируется в квадратурах.

Рассмотрим для простоты уравнение Шредингера для S-состояний:

$$\left(-\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{k^2}{2m}+\frac{Z\alpha}{r}\right)\phi=0.$$

Здесь использована подстановка $\psi = \phi / r$. После применения преобразования Лапласа

$$\bar{\phi}(s) = \int_0^\infty e^{-sr} \phi(r) dr$$

уравнение приобретает вид:

$$\left(-\frac{s^2}{2m} + \frac{k^2}{2m} \right) \frac{d\bar{\phi}}{ds} - \frac{s}{m} \bar{\phi} + Z\alpha \bar{\phi} = 0,$$

Его решением является функция:

$$\bar{\phi} = \frac{N}{k^2 - s^2} \left(\frac{s-k}{s+k} \right)^{Z\alpha m / k},$$

где N - нормировочный множитель.

Из теории преобразования Лапласа известно, что если функция $\bar{\phi}(s)$ имеет полюса в полуплоскости $\mathrm{Re}\, s > 0$, то ее оригинал $\phi(r)$ экспоненциально растет с увеличением r. Поэтому волновая функция будет ограничена на бесконечности при выполнении условия:

$$\frac{Z\alpha m}{k} = n,$$

где $n = 1, 2, \ldots$, из которого немедленно следует спектр энергии:

$$E_n = -\frac{(Z\alpha)^2 m}{2n^2}.$$

Явный вид волновых функций легко определить, выполнив обратное преобразование Лапласа. Наиболее простой вид лапласовский образ волновой функции имеет для основного состояния:

$$\bar{\phi}_1 = -\frac{N}{(k+s)^2}.$$

Изображение $\bar{\phi}_1$ находится тривиально: $\phi_1 = N r e^{-Zr/a_0}$, где $a_0 = 1/\alpha m$ – первый боровский радиус.

Рассмотренный способ решения уравнения Шредингера легко обобщается на состояния с $l \neq 0$. В работе получены явные выражения для лапласовских образов волновых функций $\bar{\phi}_{nl}$ атома водорода с произвольными значениями n и l. После выполнения обратного преобразования Лапласа волновые функции представлены в стандартном виде через обобщенные полиномы Лагерра.