Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις X: Η Εξίσωση Schrödinger για σωμάτιο σε κεντρικό δυναμικό.

1. Ακτινική εξίσωση

Η εξίσωση Schrödinger για ένα σωμάτιο το οποίο κινείται κάτω από τη επίδραση κεντρικών δυνάμεων θα έχει, σε σφαιρικές συντεταγμένες, τη μορφή:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\mathrm{L}}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\psi_{\{\alpha\}}(r,\theta,\varphi)=E\psi_{\{\alpha\}}(r,\theta,\varphi) \tag{10.1}$$

Στην εξίσωση αυτή γράψαμε μ τη μάζα του σωματιδίου (για να μην γίνει σύγχυση με τον κβαντικό αριθμό m), σημειώσαμε με το περιληπτικό όνομα $\{a\}$ το σύνολο των δεικτών που είναι απαραίτητοι για τον πλήρη καθορισμό της κατάστασης του σωματιδίου (ξέρουμε ότι μόνο η στροφορμή χρειάζεται δύο δείκτες, τους ℓ, m) και γράψαμε:

$$\hat{\mathrm{L}}^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{10.2}$$

Αφού οι διαφορικοί τελεστές που εμφανίζονται στην εξ. (10.1) δεν μπλέκουν την ακτινική με τις γωνιακές μεταβλητές μπορούμε να ψάξουμε για λύσεις με τη μορφή

$$\psi_{\{a\}}(r,\theta,\varphi)=R_{\{a\}}(r)\Upsilon_{\{a\}}(\theta,\varphi) \tag{10.3}$$

Όπως έχουμε ήδη δει, αντικατάσταση στην (10.1) μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι οι συναρτήσεις $\Upsilon_{\{a\}}$ πρέπει να είναι ιδιοσυναρτήσεις του διαφορικού τελεστή (10.2). Αυτές τις έχουμε ήδη βρει ως τις σφαιρικές αρμονικές:

$$\hat{\mathrm{L}}^2\Upsilon_{\ell m}(\theta,\varphi)=\hbar^2\ell(\ell+1)\Upsilon_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{10.4}$$

Με την εξ. (10.4) είναι εύκολο να δούμε ότι η ακτινική εξάρτηση της (10.3) θα προσδιορίζεται από την εξίσωση:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R_{E\ell}(r)=0 \tag{10.5}$$

Στην εξίσωση αυτή σημειώσαμε ρητά τους δύο δείκτες από τους οποίους θα καθορίζεται (προφανώς λόγω της (10.5)) η ακτινική συνάρτηση $R(r)$: τον δείκτη E, που αναφέρεται στην ενέργεια και τον δείκτη ℓ που αναφέρεται στο μέτρο της τροχιακής στροφορμής. Να παρατηρήσουμε αμέσως ότι η κυματοσυνάρτηση του σωματίου εξαρτάται και από τον κβαντικό αριθμό m σε αντίθεση με τις επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας (οι οποίες θα προκύψουν από την ανάλυση της εξ.(10.5)) που είναι ανεξάρτητες από το m. Αυτό σημαίνει ότι θα υπάρχουν $2\ell+1$

διαφορετικές μεταξύ τους καταστάσεις οι οποίες θα έχουν την ίδια ενέργεια. Με άλλα λόγια θα έχουμε (ελάχιστο δυνατό) εκφυλισμό τάξης $2\ell+1$ των ενεργειακών επιπέδων.

Να σημειώσουμε ακόμα ότι το ενεργό δυναμικό (δηλ. αυτό που τελικά καθορίζει τις δυνάμεις) είναι

$$V_\ell(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \tag{10.6}$$

Ο δεύτερος όρος στην παραπάνω σχέση είναι ένα απωστικό "κεντροφυγικό δυναμικό" το οποίο οφείλεται στην τροχιακή στροφορμή.

2. <u>Ελεύθερο σωμάτιο</u>

Η εξ. (10.5) δεν είναι εύκολο να μελετηθεί στη γενική της μορφή. Για το λόγο αυτό θα ξεκινήσουμε από την περίπτωση του **ελευθέρου σωματίου**:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] R_{k\ell}(r) = 0 \tag{10.7}$$

Εδώ για λόγους ευκολίας γράψαμε $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}E$ ($E>0$) και αλλάξαμε αντίστοιχα και τον δείκτη της ακτινικής συνάρτησης από *E* σε *k*. Σημειώνεται ότι ο δείκτης *k* είναι συνεχής.

Για να συνεχίσουμε θα κάνουμε την αλλαγή

$$R_{k\ell}(r) = r^\ell \chi_{k\ell}(r) \tag{10.8}$$

και θα ξαναγράψουμε την εξ.(10.7):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2(\ell+1)}{r}\frac{d}{dr} + k^2\right)\chi_{k\ell}(r) = 0 \tag{10.9}$$

Αν παραγωγίσουμε την εξίσωση αυτή ακόμη μια φορά θα πάρουμε

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2(\ell+1)}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{2(\ell+1)}{r^2}\right)\frac{d}{dr}\chi_{k\ell}(r) = 0 \tag{10.10}$$

Η τελευταία επέμβαση που θα κάνουμε είναι να γράψουμε $\frac{d}{dr}\chi_{k\ell}(r) = rf_{k\ell}(r)$ οπότε η (10.10) θα γίνει:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2(\ell+2)}{r}\frac{d}{dr} + k^2\right)f_{k\ell}(r) = 0 \tag{10.11}$$

Αν τώρα συγκρίνουμε τις εξισώσεις (10.9) και (10.11) βλέπουμε ότι

$$\chi_{k,\ell+1}(r) = cf_{k\ell}(r) \Rightarrow \chi_{k,\ell+1} = c\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\chi_{k\ell}(r) \tag{10.12}$$

Εφαρμόζοντας επανειλημμένα την τελευταία θα πάρουμε

$$\chi_{k\ell}(r) = c^{\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}\chi_{k0}(r) \quad \Rightarrow \quad R_{k\ell}(r) = c^{\ell}r^{\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}R_{k0}(r) \tag{10.13}$$

Για να βρούμε την εξ. $R_{k0}(r)$ λύνομε την (10.7) για $\ell = 0$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2\right)R_{k0}(r) = \frac{1}{r}\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right)[rR_{k0}(r)] = 0 \tag{10.14}$$

Η γενική λύση της τελευταίας εξίσωσης είναι:

$$rR_{k0}(r) = A\sin(kr) + B\cos(kr) \tag{10.15}$$

Είναι λογικό να ζητήσουμε η κυματοσυνάρτηση να είναι πεπερασμένη στο όριο $r \to 0$ και επομένως επιλέγουμε τη λύση

$$R_{k0}(r) = A\frac{\sin(kr)}{r} \tag{10.16}$$

Η τελευταία σχέση αν συνδυαστεί με το αποτέλεσμα (10.13) θα μας δώσει τη ζητούμενη ακτινική συνάρτηση:

$$R_{k\ell}(r) = Ac^{\ell}r^{\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}\frac{\sin(kr)}{r} \tag{10.17}$$

Τις σταθερές που εμφανίστηκαν θα τις προσδιορίσουμε από τη συνθήκη ορθογωνιότητας των ακτινικών συναρτήσεων

$$\int_0^{\infty} drr^2 R^*_{k'\ell'}(r)R_{k\ell}(r) = \delta(k-k')\delta_{\ell\ell'} \tag{10.18}$$

(εδώ λάβαμε υπόψη το ότι ο δείκτης k είναι συνεχής).

Τον συντελεστή A μπορούμε να τον υπολογίσουμε από την περίπτωση $\ell = 0$:

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} drr^2 R^*_{k'0}(r)R_{k0}(r) &= |A|^2\int_0^{\infty} dr\sin(k'r)\sin(kr) = \frac{|A|^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dr\sin(k'r)\sin(kr) = \\
&= \frac{|A|^2}{4}\int_{-\infty}^{\infty} dr\left[\cos r(k-k') - \cos r(k+k')\right] = \\
&= \frac{|A|^2}{4\cdot 2}\int_{-\infty}^{\infty} dr\left[e^{ir(k-k')} - e^{ir(k+k')} + e^{-ir(k-k')} - e^{-ir(k+k')}\right] = \\
&= \frac{|A|^2}{4}2\pi\left[\delta(k-k') - \delta(k+k')\right] \quad \Rightarrow \quad |A| = \sqrt{\frac{2}{\pi}}
\end{aligned} \tag{10.19}$$

Για τη σταθερά c είναι αρκετό να θεωρήσουμε την περίπτωση $\ell = 1$. Ο υπολογισμός θα μας οδηγήσει στο αποτέλεσμα $|c| = \frac{1}{k}$. Ως συνήθως η κανονικοποίηση δεν μπορεί να προσδιορίσει την φάση των σταθερών αυτών. Η σύμβαση που ακολουθείται συνήθως είναι να διαλέξουμε

$$A=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\quad \text{και}\quad c=-\frac{1}{k} \tag{10.20}$$

Μετά από την ανάλυση αυτή έχουμε βρει για το ακτινικό μέρος της κυματοσυνάρτησης:

$$R_{k\ell}(r)=\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}\,j_\ell(kr) \tag{10.21}$$

όπου

$$j_\ell(\rho)=(-\rho)^\ell\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell\frac{\sin\rho}{\rho} \tag{10.22}$$

είναι οι λεγόμενες **σφαιρικές συναρτήσεις Bessel** .

Για πληρότητα να αναφέρουμε ότι αν δεν είχαμε θέσει την απαίτηση η λύση μας να είναι πεπερασμένη στην αρχή (αυτό θα μπορούσε να συμβαίνει, για παράδειγμα, αν το σωμάτιο ήταν ελεύθερο από μια απόσταση και μετά) θα έπρεπε να κρατήσουμε και τους δύο όρους στη σχέση (10.15) με τους συντελεστές να προσδιορίζονται από τις συνοριακές απαιτήσεις του συγκεκριμένου προβλήματος που θα αντιμετωπίζαμε. Αν αντί για τον πρώτο είχαμε κρατήσει τον δεύτερο όρο το αποτέλεσμα στο οποίο θα καταλήγαμε θα ήταν

$$R_{k\ell}(r)=\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}\,n_\ell(kr) \tag{10.23}$$

όπου

$$n_\ell(\rho)=(-1)^\ell\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell\frac{\cos\rho}{\rho} \tag{10.24}$$

είναι οι λεγόμενες **σφαιρικές συναρτήσεις Neumann**.

Μπορεί κανείς να εισαγάγει και τις **σφαιρικές συναρτήσεις Hankel πρώτου και δευτέρου είδους**

$$h_\ell^{(\pm)}(\rho)=n_\ell(\rho)\pm ij_\ell(\rho)=(-1)^\ell\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell\frac{e^{\pm i\rho}}{\rho} \tag{10.25}$$

Όλες οι παραπάνω συναρτήσεις (επομένως και οι γραμμικοί συνδυασμοί τους) είναι λύσεις της βασικής εξίσωσης (10.7). Ποια από όλες θα διαλέξουμε σε κάποιο συγκεκριμένο πρόβλημα εξαρτάται από τις συνοριακές απαιτήσεις που το συνοδεύουν.

3. **<u>Εναλλακτική λύση</u>**

Το αποτέλεσμα (10.21) μπορεί να παραχθεί και με άλλους τρόπους. Εδώ θα αναφέρουμε έναν που παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον και βρίσκει εφαρμογές στη σκέδαση σωματιδίων. Θα ξεκινήσουμε από την απλή σκέψη ότι ήδη ξέρουμε τη λύση της ελεύθερης εξίσωσης Schrödinger σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$\Psi\left(\vec{r}\right)=\frac{1}{\left(2\pi\right)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{10.26}$$

(το άνυσμα $\vec{k}$ έχει μέτρο $\left|\vec{k}\right|^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}E=k^2$). Αφού οι συναρτήσεις που εισάγαμε με τη σχέση (10.3)

$$\Psi_{k\ell m}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{k\ell}\left(r\right)\Upsilon_{\ell m}\left(\theta,\varphi\right) \tag{10.27}$$

φτιάχνουν ένα πλήρες σύνολο, είναι προφανές ότι μπορούμε να αναλύσουμε τη συνάρτηση (10.26) στη βάση που σχηματίζουν οι (10.27), δηλ. μπορούμε να γράψουμε:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}=\sum_{\ell,m}a_{k\ell m}R_{k\ell}\left(r\right)\Upsilon_{\ell m}\left(\theta,\varphi\right) \tag{10.28}$$

Επειδή το σωμάτιο έχει καθορισμένη ενέργεια είναι φανερό ότι μόνο όροι με καθορισμένο k θα εμφανίζονται στο παραπάνω ανάπτυγμα.

Από την εξίσωση αυτή (στην οποία ο παράγοντας κανονικοποίησης $\left(2\pi\right)^{-3/2}$ έχει ενσωματωθεί στις σταθερές a) θα προσπαθήσουμε να προσδιορίσουμε την ακτινική συνάρτηση. Μπορούμε να απλοποιήσουμε λίγο τα πράγματα θεωρώντας ότι το άνυσμα $\vec{r}$ είναι στην κατεύθυνση του άξονα z αφού αυτό δεν πρόκειται να επηρεάσει την ακτινική εξάρτηση. Επομένως ξαναγράφουμε την (10.28) με τη μορφή:

$$e^{ikr\cos\theta}=\sum_{\ell}a_{k\ell}R_{k\ell}\left(r\right)\Upsilon_{\ell 0}\left(\theta\right)=\sum_{\ell}a_{k\ell}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}R_{k\ell}\left(r\right)P_{\ell}\left(\cos\theta\right) \tag{10.29}$$

για το τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε τη γνωστή μορφή των σφαιρικών αρμονικών και γράψαμε

$$P_{\ell}\left(u\right)=\frac{\left(-1\right)^{\ell}}{2^{\ell}\,\ell!}\frac{d^{\ell}}{du^{\ell}}\left(1-u^2\right)^{\ell} \tag{10.30}$$

Όπως είδαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, τα πολυώνυμα Legendre – ικανοποιούν τη σχέση ορθογωνιότητας:

$$\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta P_{\ell'}\left(\cos\theta\right)P_{\ell}\left(\cos\theta\right)=\int_{-1}^{1}duP_{\ell'}\left(u\right)P_{\ell}\left(u\right)=\frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'} \tag{10.31}$$

Μπορούμε να εκμεταλλευθούμε τη σχέση αυτή: πηγαίνοντας στην εξίσωση (10.29) βλέπουμε ότι

$$\int_{-1}^{1}due^{ikru}P_{\ell'}\left(u\right)=\sum_{\ell}a_{k\ell}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}R_{k\ell}\left(r\right)\int_{-1}^{1}duP_{\ell'}\left(u\right)P_{\ell}\left(u\right)=\sqrt{\frac{1}{\pi(2\ell'+1)}}a_{k\ell'}R_{k\ell'}\left(r\right) \tag{10.32}$$

Έχουμε βρει λοιπόν ότι:

$$R_{k\ell}\left(r\right)=\frac{1}{a_{k\ell}}\sqrt{\pi\left(2\ell+1\right)}\int_{-1}^{1}due^{ikru}P_{\ell}\left(u\right) \tag{10.33}$$

Για να συνδεθούμε με τα προηγούμενα αποτελέσματα ας μελετήσουμε το ολοκλήρωμα που εμφανίζεται στην τελευταία σχέση:

$$I_\ell = \int_{-1}^{1} due^{ikru} P_\ell(u) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^{1} due^{ikru} \frac{d^\ell}{du^\ell}\left(1-u^2\right)^\ell \tag{10.34}$$

Αμέσως μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_{-1}^{1} due^{ikru} = 2\frac{\sin(kr)}{kr} = 2j_0(kr) \;, \\ I_1 &= \int_{-1}^{1} duue^{ikru} = \frac{1}{ik}\frac{d}{dr}\int_{-1}^{1} due^{ikru} = -2i\frac{d}{d(kr)}\frac{\sin(kr)}{kr} = 2ij_1(kr) \;, \;\ldots, \\ I_\ell &= 2i^\ell(-1)^\ell(kr)^\ell\left(\frac{1}{kr}\frac{d}{d(kr)}\right)^\ell \frac{\sin(kr)}{kr} = 2i^\ell j_\ell(kr) \end{aligned} \tag{10.35}$$

και επομένως

$$R_{k\ell}(r) = \frac{i^\ell}{a_{k\ell}}\sqrt{4\pi(2\ell+1)}\,j_\ell(kr) \tag{10.36}$$

τον δε συντελεστή κανονικοποίησης θα τον προσδιορίσουμε από τη συνθήκη ορθογωνιότητας:

$$\int_0^\infty drr^2 R^*_{k'\ell}(r) R_{k\ell}(r) = \delta(k-k')$$

Αντικαθιστώντας την (10.36) παίρνουμε

$$\frac{4\pi(2\ell+1)}{|a_{k\ell}|^2}\int_0^\infty drr^2 j_\ell(k'r)\,j_\ell(kr) = \frac{4\pi(2\ell+1)}{|a_{k\ell}|^2}\frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k') = \delta(k-k') \tag{10.37}$$

Για το πρώτο βήμα στην (10.37) χρησιμοποιήσαμε τη σχέση (10.21) η οποία οδηγεί στο συμπέρασμα:

$$\int_0^\infty drr^2 j_\ell(k'r)\,j_\ell(kr) = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k') \tag{10.38}$$

Επομένως (και διαλέγοντας τη φάση των a έτσι ώστε η ακτινική συνάρτηση να είναι πραγματική)

$$a_{k\ell} = i^\ell \pi\sqrt{2\frac{2\ell+1}{k^2}} \tag{10.39}$$

Μετά από αυτά έχουμε βρει ότι η ακτινική συνάρτηση είναι

$$R_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}\,j_\ell(kr)$$

ενώ το ανάπτυγμα (10.29) έχει πάρει την τελική του μορφή:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_\ell i^\ell(2\ell+1)\,j_\ell(kr)\,P_\ell(\cos\theta) \tag{10.40}$$

4. <u>Μελέτη των λύσεων</u>

Αν και δεν μπορούμε να δώσουμε γενικούς κανόνες, είναι χρήσιμο να δούμε τη συμπεριφορά της ακτινικής εξίσωσης για μια ευρεία γκάμα δυναμικών.

Η αφετηρία μας θα είναι η εξίσωση

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-V_\ell\left(r\right)\right)\right]R_{E\ell}\left(r\right)=0 \tag{10.41}$$

όπου

$$V_\ell\left(r\right)=V\left(r\right)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ell\left(\ell+1\right)}{r^2} \tag{10.42}$$

Όταν $r\to 0$ και αφού $r^2V\left(r\right)\to 0$ είναι προφανές ότι το ενεργό δυναμικό θα κυριαρχείται από το κεντροφυγικό δυναμικό (υπό την προϋπόθεση ότι $\ell\neq 0$) και η λύση της εξ.(10.41) είναι γνωστή:

$$R_{k\ell}\left(r\right)=\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}j_\ell\left(kr\right)=\left(-1\right)^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{r^\ell}{k^\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell\frac{\sin\left(kr\right)}{r} \tag{10.43}$$

Η λύση αυτή αφορά στο πρόβλημά μας μόνο όταν $r\to 0$ και επομένως θα πρέπει να βρούμε τη μορφή της στην περιοχή αυτή. Θα γράψουμε

$$\sin\left(kr\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(-1\right)^n}{\left(2n+1\right)!}\left(kr\right)^{2n+1}$$

οπότε η εξ.(10.43) θα πάρει τη μορφή

$$R_{k\ell}\left(r\right)=\left(-1\right)^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{r^\ell}{k^\ell}2^\ell\left(\frac{d}{dr^2}\right)^\ell\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(-1\right)^n}{\left(2n+1\right)!}k^{2n+1}\left(r^2\right)^n \tag{10.44}$$

Λίγη σκέψη μας πείθει ότι στην παραπάνω δυναμοσειρά ο πιο σημαντικός όρος θα είναι ο $n=\ell$ αφού οι παραγωγίσεις μηδενίζουν όλους τους προηγούμενους και όλοι οι επόμενοι θα μηδενίζονται ταχύτερα από αυτόν. Επομένως, όταν $r\to 0$ η λύση (10.43) θα προσεγγίζεται από την:

$$R_{k\ell}\left(r\right)\approx\left(-1\right)^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{r^\ell}{k^\ell}2^\ell\frac{\left(-1\right)^\ell}{\left(2\ell+1\right)!}k^{2\ell+1}\ell!\ \Rightarrow\ R_{k\ell}\left(r\right)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{2^\ell\ell!}{\left(2\ell+1\right)!}\ k^{\ell+1}r^\ell \tag{10.45}$$

Η παραπάνω ανάλυση, προφανώς, δεν ισχύει στην περίπτωση $\ell=0$ οπότε ο κεντροφυγικός όρος λείπει από το ενεργό δυναμικό και επομένως το πρόβλημα που πρέπει να μελετήσουμε είναι

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-V\left(r\right)\right)\right]R_{k0}\left(r\right)=0 \tag{10.46}$$

Θα κάνουμε την αλλαγή $R=\frac{1}{r}\xi\left(r\right)$ οπότε η προηγούμενη εξίσωση θα πάρει τη μορφή

$$\frac{d^2}{dr^2}\xi_{k0}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-V\left(r\right)\right)\xi_{k0}=0 \tag{10.47}$$

Αν δοκιμάσουμε λύση της μορφής $\xi\sim r^a$ θα πάρουμε

$$a(a-1)+r^2\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)=0 \tag{10.48}$$

αφού $r^2V\to 0$ η τελευταία εξίσωση θα μας οδηγήσει στο συμπέρασμα

$$a(a-1)=0$$

Η επιλογή που κρατάει την ακτινική συνάρτηση πεπερασμένη για $r=0$ είναι η $a=1$ και επομένως στο όριο $r\to 0$ η συνάρτηση R_{k0} συμπεριφέρεται ως μία σταθερά όπως προβλέπεται και από το αποτέλεσμα (10.45) αν θεωρούσαμε ότι αυτό μπορεί να επεκταθεί και στην περίπτωση $\ell=0$.

Θα περάσουμε τώρα στο όριο $r\to\infty$. Αν συμβαίνει το δυναμικό να μηδενίζεται πολύ γρήγορα $r^2V(r)\to 0$ και αν $\ell\neq 0$ και πάλι το κεντροφυγικό δυναμικό έχει τον πρώτο ρόλο και επομένως το πρόβλημά μας συνίσταται στο να βρούμε τη συμπεριφορά της λύσης στην (10.43) σε μεγάλες αποστάσεις. Από τη μορφή της είναι φανερό ότι η κυρίαρχη συνεισφορά θα προέρχεται από τις παραγωγίσεις του ημιτόνου αφού οι παραγωγίσεις των όρων που έχουν δυνάμεις της απόστασης στον παρανομαστή θα δίνουν ασθενέστερο αποτέλεσμα. Έτσι:

$$R_{k\ell}(r)=(-1)^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{r^\ell}{k^\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^\ell\frac{\sin(kr)}{r}\approx(-1)^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{k^\ell}\frac{1}{r}\frac{d^\ell}{dr^\ell}\sin(kr) \tag{10.49}$$

και αφού

$$(-1)^1\frac{d}{dr}\sin(kr)=-k\cos(kr)=k\sin\left(kr-\frac{\pi}{2}\right),$$

$$(-1)^2\frac{d^2}{dr^2}\sin(kr)=-k^2\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}\right)=k^2\sin(kr-\pi),$$

$$\ldots$$

$$(-1)^\ell\frac{d^\ell}{dr^\ell}\sin(kr)=k^\ell\sin\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)$$

θα έχουμε ότι

$$R_{k\ell}(r)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin(kr-\ell\pi/2)}{r} \tag{10.50}$$

Η παραπάνω ανάλυση δεν ισχύει στην περίπτωση $\ell=0$. Δεν ισχύει επίσης εάν το δυναμικό μηδενίζεται μεν καθώς $r\to\infty$ αλλά όχι τόσο γρήγορα όσο υποθέσαμε. Αν δηλαδή $V(r)\sim\frac{1}{r^{1+\alpha}}$ καθώς $r\to\infty$ με $\alpha<1$ είναι προφανές ότι αυτός είναι ο όρος που χαρακτηρίζει το ενεργό δυναμικό και όχι ο κεντροφυγικός. Για να δούμε τι γίνεται στις περιπτώσεις αυτές θα γυρίσουμε στην εξ. (10.47). Θα κάνουμε την αλλαγή

$$\xi(r)=e^{\pm ikr}g(r) \tag{10.51}$$

και θα την ξαναγράψουμε

$$\frac{d^2}{dr^2}g(r) \pm 2ik\frac{d}{dr}g(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)g(r) = 0 \tag{10.52}$$

Το δυναμικό βέβαια μηδενίζεται στο όριο $r \to \infty$ αλλά αυτό δεν σημαίνει κατ' ανάγκη, ότι μπορούμε να παραλείψουμε τον τελευταίο όρο στην παραπάνω εξίσωση. Αν μπορούσαμε να το κάνουμε θα καταλήγαμε στο συμπέρασμα ότι η συνάρτηση ϕ είναι μια σταθερά και επομένως

$$\xi(r) \sim e^{\pm ikr} \quad \Rightarrow \quad R(r) \sim \frac{e^{\pm ikr}}{r} \tag{10.53}$$

σε συμφωνία με το αποτέλεσμα (10.50). Θα μπορούσε όμως η συνάρτηση ϕ να μεταβάλλεται πολύ αργά έτσι ώστε

$$\pm 2ik\frac{d}{dr}g(r) \approx \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)g(r) \tag{10.54}$$

οπότε η δεύτερη παράγωγος στην εξ. (10.52) είναι αμελητέα. Η εξίσωση (10.54) μπορεί να λυθεί εύκολα και το αποτέλεσμα είναι

$$g(r) \approx g(r_0)\exp\left[\mp\frac{i\mu}{k\hbar^2}\int_{r_0}^{r} dr' V(r')\right] \tag{10.55}$$

Στην παραπάνω σχέση r_0 είναι μια αυθαίρετη (αλλά μεγάλη) απόσταση. Ας πούμε τώρα ότι $V(r) \approx \frac{c}{r^{1+\alpha}}$. Το ολοκλήρωμα γίνεται αμέσως και θα πάρουμε:

$$\phi(r) \approx \phi(r_0)\exp\left[\mp\frac{i\mu}{k\hbar^2}\frac{c}{\alpha}\left(\frac{1}{r_0^\alpha} - \frac{1}{r^\alpha}\right)\right] \approx \phi(r_0) \tag{10.56}$$

Το αποτέλεσμα αυτό μας λέει ότι μπορούμε να θεωρήσουμε τη συνάρτηση ϕ σαν μια σταθερά και, επομένως, ότι όταν το δυναμικό είναι τέτοιο ώστε $\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0$ η ακτινική συνάρτηση συμπεριφέρεται σε μεγάλες αποστάσεις όπως δηλώνουν οι σχέσεις (10.50) ή (10.53): σαν ένα ελεύθερο (σφαιρικό) κύμα το οποίο σβήνει στο άπειρο. Αν όμως $V(r) \approx \frac{c}{r}$ η έκφραση (10.55) θα γίνει:

$$g(r) \approx g(r_0)\exp\left(\mp\frac{i\mu}{k\hbar^2}c\ln\frac{r}{r_0}\right) \tag{10.57}$$

και επομένως

$$R(r) \sim \frac{1}{r}\exp\left[\pm i\left(kr - \frac{\mu}{k\hbar^2}c\ln\frac{r}{r_0}\right)\right] \tag{10.58}$$

Το αποτέλεσμα αυτό μας λέει κάτι αξιοσημείωτο: Όσο και αν απομακρυνθεί ένα σωμάτιο από την αρχή, δεν θα απελευθερωθεί από την επίδραση ενός δυναμικού Coulomb.

5. <u>Φυσική σημασία της ακτινικής συνάρτησης</u>

Κλείνοντας, θα κοιτάξομε τη φυσική σημασία της ακτινικής συνάρτησης. Είναι κατ' αρχή προφανές ότι η ποσότητα $\left|R_{nl}(r)\right|^2$ θα πρέπει να σχετίζεται με την πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο σε απόσταση μεταξύ r και $r+dr$ από την αρχή (και με ενέργεια που χαρακτηρίζεται από τον αριθμό n και μέτρο της στροφορμής που χαρακτηρίζεται από τον αριθμό ℓ). Εν τούτοις δεν είναι ακριβώς η πυκνότητα πιθανότητας. Αυτό μπορούμε να το διαπιστώσουμε από τη συνθήκη κανονικοποίησης:

$$\int_0^\infty drr^2 R^*_{n'\ell'}(r) R_{n\ell}(r) = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'} \quad \Rightarrow \quad \int_0^\infty drr^2 \left|R_{n\ell}(r)\right|^2 = 1 \tag{10.59}$$

Η σχέση αυτή μας λέει ότι η ποσότητα που μπορεί να ερμηνευθεί ως πυκνότητα πιθανότητας είναι η

$$\rho_{n\ell}(r) = r^2 \left|R_{n\ell}(r)\right|^2 \tag{10.60}$$

και η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο σε απόσταση μεταξύ r και $r+dr$ είναι

$$dP_{n\ell}(r) = \rho_{n\ell}(r)dr = r^2 \left|R_{n\ell}(r)\right|^2 dr \tag{10.61}$$

Αν το ενεργειακό φάσμα είναι συνεχές η σχέση κανονικοποίησης είναι

$$\int_0^\infty drr^2 R^*_{k'\ell'}(r) R_{k\ell}(r) = \delta(k-k')\delta_{\ell\ell'} \tag{10.62}$$

Είναι προφανές ότι επειδή η μεταβλητή k είναι συνεχής η ποσότητα $r^2\left|R_{k\ell}(r)\right|^2$ δεν είναι ολοκληρώσιμη και επομένως δεν είναι δυνατόν να ερμηνευθεί ως πυκνότητα πιθανότητας. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να εισαγάγουμε τη συνάρτηση

$$\bar{R}_{k\ell}(r) \underset{def}{=} \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} dk_1 R_{k_1\ell}(r) \tag{10.63}$$

τη μέση τιμή, δηλαδή, της συνάρτησης R σε μια ζώνη ενέργειας εύρους Δk. Για τη συνάρτηση αυτή ισχύει ότι

$$\int_0^\infty drr^2 \left|\bar{R}_{k\ell}\right|^2 = \frac{1}{\Delta k} \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} dk_1 \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} dk_2 \delta(k_1-k_2) = 1 \tag{10.64}$$

και επομένως η ποσότητα $r^2\left|\bar{R}_{k\ell}(r)\right|^2$ μπορεί να ερμηνευθεί ως η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο σε απόσταση μεταξύ r και $r+dr$ και με ενέργεια σε μια ζώνη εύρους Δk. Σύμφωνα με τη λογική αυτή και σε ότι αφορά στο συγκεκριμένο πρόβλημα η πιθανότητα να βρούμε το σωμάτιο πολύ κοντά στην αρχή και μέσα σε μια «στενή» ενεργειακή ζώνη dk είναι

$$dP_{k\ell}(r) = \frac{2}{\pi}\left[\frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!}\right]^2 (kr)^{2\ell+2} drdk \tag{10.65}$$

και όπως θα περιμέναμε είναι τόσο μικρότερη όσο μεγαλύτερη είναι η στροφορμή ενώ δεν υπάρχει περίπτωση να βρεθεί το σωμάτιο στην αρχή. Αντίστοιχα η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο πολύ μακριά από την αρχή είναι

$$dP_{k\ell}(r) = \frac{2}{\pi}\sin^2\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)drdk \tag{10.66}$$