PRILOG KVANTNOJ TEORIJI CENTRALNIH SILA

Josip Moser

Poznato je, da se kvantnomehanički problem čestice u polju centralne sile može strogo riješiti samo za neke specijalne tipove centralnih sila. Koji su to tipovi sila, to ćemo ispitat pomoću metode faktorizacije[1]).

Općeniti zadatak: odrediti vlastite vrijednosti diferencijalne jednadžbe

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \lambda - V_l\right)\psi_l = 0 \tag{1}$$

u kojoj je V_l neka zadana funkcija od x, koja u sebi sadrži još i jedan konstantni cjelobrojni parametar l, rješava se metodom faktorizacije tako, da se definira operator

$$B_l = u_l(x) - \frac{d}{dx} \tag{2}$$

On sadrži neku još neodređenu funkciju $u_l(x)$ u kojoj se pojavljuje i parametar l. Tu funkciju treba tako podesiti, da operator B_l primijenjen na valnu funkciju ψ_l, daje valnu funkciju ψ_{l+1}, koja je rješenje jednadžbe (1) kad u njoj dolazi parametar $l+1$. Dakle zahtjevamo da bude

$$\psi_{l+1} = N B_l \psi_l \tag{3}$$

Ovdje je N faktor normiranja.

Operatoru B_l adjungiran je operator

$$B_l^\dagger = u_l + \frac{d}{dx} \tag{4}$$

Dalje gradimo operatore $B_l B_l^\dagger$ i $B_l^\dagger B_l$, pa ih primjenjujemo na funkciju ψ

$$B_l B_l^\dagger \psi = \left(u_l^2 - u_l' - \frac{d^2}{dx^2}\right)\psi \tag{5}$$

---

1) Morse i Feshbach, Methods of Theor. Phys. New York 1953 str. 729 i 788.
Infeld i Hull, Rev. Mod. Phys. **23**, 21, 1951.

(6) $$B_l^{\dagger} B_l \psi = \left(u_l^2 + u_l' - \frac{d^2}{dx^2}\right)\psi$$

Kad operator (6) primijenimo na funkciju ψ_l i još uzmemo u obzir (1), imamo

$$B_l^{\dagger} B_l \psi_l = (u_l^2 + u_l' + \lambda - V_l)\,\psi_l$$

Ako pretpostavimo, da je

(7) $$a_l = V_l - u_l^2 - u_l'$$

konstantno, onda možemo na gornji izraz primijeniti operator B_l i pomoću (3) dobivamo

(8) $$B_l B_l^{\dagger} \psi_{l+1} = (\lambda - V_l + u_l^2 + u_l')\,\psi_{l+1}$$

Odavde vidimo da je ψ_{l+1} vlastita funkcija operatora $B_l B_l^{\dagger}$. Formulu (8) možemo i kraće pisati ovako:

(8a) $$B_l B_l^{\dagger} \psi_{l+1} = (\lambda - a_l)\,\psi_{l+1}$$

Jednadžbu (7) moći ćemo zadovoljiti samo za neke specijalne potencijale V_l i samo za te potencijale možemo metodom faktorizacije ekzaktno izračunati vlastite vrijednosti i vlastite funkcije.

Da nađemo nepoznatu funkciju u_l, primijenit ćemo operator (5) na funkciju ψ_{l+1} i uzeti u obzir (1). Tada dobivamo

(9) $$B_l B_l^{\dagger} \psi_{l+1} = (u_l^2 - u_l' + \lambda - V_{l+1})\,\psi_{l+1}$$

Ovo dakako mora biti identično sa (8) i zbog toga slijedi da je

(10) $$u_l' = \frac{1}{2}(V_l - V_{l+1})$$

Ako to uvrstimo u (7), dobivamo

(11) $$a_l = \frac{1}{2}(V_l + V_{l+1}) - u_l^2$$

Funkciju u_l određujemo tako, da ovo diferenciramo i još uzmemo u obzir jednadžbu (10)

(12) $$u_l = \frac{1}{2}\,\frac{V_l' + V_{l+1}'}{V_l - V_{l+1}}$$

Time je operator koji vrši faktorizaciju određen. Ali jer smo (12) odredili pomoću zahtjeva da je a_l konstanta, morat ćemo još i postaviti uvjet koji mora zadovoljavati funkcija V_l, da bi se faktorizacija mogla provesti. Taj uvjet slijedi iz (10) i (12) i glasi

$$\frac{V_l' + V_{l+1}'}{V_l - V_{l+1}} - \int (V_l - V_{l+1})\,dx = C \tag{13}$$

Za sve one funkcije V_l koje zadovoljavaju taj uvjet, može se ekzaktno izračunati vlastite vrijednosti jednadžbe (1).

Vlastite vrijednosti su za slučaj kad je $a_{l+1} > a_l$ jednake

$$\lambda = a_n \tag{14}$$

što se može pokazati ovako: Jer su vlastite funkcije normirane mora skalarni produkt svake vlastite funkcije sa sobom biti jednak jedinici. Dakle

$$1 = (\psi_{l+1}, \psi_{l+1}) = N^2 (B_l \psi_l, B_l \psi_l) = N^2 (\psi_l, B_l^+ B_l \psi_l)$$

Ali jer je

$$B_l^+ B_l \psi_l = \left[\lambda + u_l^2 + \frac{1}{2}(V_l - V_{l+1}) - V_l \right] \psi_l = (\lambda - a_l)\, \psi_l$$

slijedi

$$N^2 (\lambda - a_l) = 1 \tag{15}$$

a odavde dobivamo uvjet

$$\lambda - a_l > 0 \tag{16}$$

Ako za l uzmemo sve veće cijele brojeve, onda bi morali jednom doći do slučaja kod kojeg je ovaj izraz negativan. Kako se to ne smije dogoditi, mora postojati neki $l = n$ za koji će biti

$$\lambda - a_l = 0$$

jer će se onda sam od sebe prekinuti postupak kojim od valne funkcije ψ_l prelazimo na valnu funkciju sa parametrom l koji je za jedinicu veći. Iz ovoga onda nužno slijedi uvjet (14).

Ovakav diskretni niz vlastitih vrijednosti dobivamo samo onda kad je uz $\lambda > 0$ i $a_l > 0$. Ako je međutim $a_l < 0$ onda je uvjet (16) uvijek zadovoljen i tada nema ograničenja za vlastite vrijednosti. One u tom slučaju čine kontinuirani niz. Kad je $a_l < 0$ onda može niz vlastitih vrijednosti biti diskretan samo kad su vlastite vrijednosti negativne.

Nakon ovih općih napomena o metodi faktorizacije možemo preći na problem centralne sile.

Schrödingerovu jednaždbu za česticu u polju centralne sile

(17) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(r)\psi = E\psi$$

možemo separirati u polarnim koordinatama, pa za radijalni dio valne funkcije vrijedi diferencijalna jednadžba

(18) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R + (-E+U)R = 0$$

Supstitucijom $R = \frac{\varphi}{r}$ možemo eliminirati prvu derivaciju, pa imamo

(19) $$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{2m}{\hbar^2}U - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\varphi = 0$$

To je upravo jednadžba (1), ako pišemo

(20) $$\lambda = \frac{2m}{\hbar^2}E + f(l)$$

(21) $$V_l = \frac{2m}{\hbar^2}U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} + f(l)$$

Ovdje smo dodali i oduzeli jedan konstantni član $f(l)$, koji u sebi još može sadržati cijeli broj l.

Metoda faktorizacije može se provesti samo za takve centralne sile za koje potencijal $U(r)$ ima to svojstvo, da pomoću njega izgrađena funkcija (21) zadovoljava uvjetu (13). Iz toga uvjeta slijedi

(22) $$\frac{4m\,U'}{\hbar^2} = Cg - \frac{2C(l+1)}{r^2} + g^2 r$$

uz kraću oznaku

(23) $$g = f(l) - f(l+1)$$

Dakle, faktorizacija se može provesti samo za centralne sile čiji je potencijal jednak

(24) $$U = \frac{\hbar^2}{4m}\left(Cgr + \frac{2C(l+1)}{r} + \frac{g^2 r^2}{2} + A\right)$$

Budući da taj potencijal ne smije zavisiti o l moramo konstante C i g tako izabrati, da (24) bude nezavisno o l.

Tu sada imamo slijedeće mogućnosti:

1.) $C = 0$, g ne zavisi o l

2.) $g = 0$, $C = \frac{K}{l+1}$

3.) $g = 0$, $C = 0$

Prvi od ovih slučajeva odgovara harmoničkom oscilatoru, kod kojeg je potencijal

$$U = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$$

i zato

$$g = -\frac{2m}{\hbar}\omega$$

Prema (21), (10) i (11) imamo u tom slučaju

$$V_l = \frac{m^2\omega^2 r^2}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m\omega}{\hbar} l$$

$$u_l = \frac{l+1}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r$$

$$\lambda = a_l = \frac{m\omega}{\hbar}(4l+3)$$

Sad možemo pomoću (20) izračunati vrijednosti energije i dobivamo

$$E = \hbar\omega\left(l + \frac{3}{2}\right)$$

Drugi slučaj odgovara djelovanju Coulombove privlačne sile kod koje je

$$U = -\frac{Ze^2}{r}$$

i zato mora biti

$$C = -\frac{2m Ze^2}{\hbar^2 (l+1)}$$

Dalje istim postupkom dobivamo

$$V_l = -\frac{2m Ze^2}{\hbar^2 r} + \frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$u_l = \frac{l+1}{r} - \frac{mZe^2}{\hbar^2(l+1)}$$

$$a_l = -\frac{m^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 (l+1)^2}$$

Sad vidimo da pozitivne energije imaju kontinuirani spektar, a negativne energije imaju diskretni spektar. Ove se izračunavaju po formuli

$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 (l+1)^2}$$

Treći slučaj odgovara konstantnom potencijalu

$$U = \frac{\hbar^2}{4m} A$$

Lako je uvidjeti da je u tom slučaju

$$V_l = \frac{1}{2} A + \frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$u_l = \frac{l+1}{r}$$

$$a_l = \frac{1}{2} A$$

Budući da u ovom slučaju a_l uopće ne zavisi o l, bit će spektar vlastitih vrijednosti kontinuiran i moguće su sve energije

$$E > U$$

Zusammenfassung

BEITRAG ZUR QUANTENTHEORIE DER ZENTRALKRÄFTE.

Josip Moser

Es wird gezeigt, dass das quantenmechanische Zentralkraftproblem bei Anwendung der Faktorisierungsmethode nur für Potentiale, die proportional r^2, r^{-1}, oder konstant sind, exakt lösbar ist.

Zur Berechnung der Eigenwerte λ der Differentialgleichung (1) wird der Operator (2) so definiert, dass er die Eigenfunktion, die zu einem beliebigen Wert des ganzzahligen Parameters l gehört, in die Eigenfuktion (3) überführt. Diese Eigenfunktion gehört zum erhöhten Parameter $l+1$. Die Anwendung des Operators $B_l B_l^{+} B_l$ auf die Funktion ψ_l gibt die Gleichung (8). Wenn noch die Forderung, ψ_{l+1} sei eine Eigenfunktion des Operators $B_l B_l^{+}$, gestellt wird, dann folgt daraus, dass (7) konstant sein soll. Wird nun der Operator $B_l B_l^{+}$ auf die Funktion ψ_{l+1} angewandt, so folgt (9), das mit (8) identisch sein muss. Durch Gleichsetzung kann man die Gl. (10) erhalten, aber für die Funktion u_l kann man auch die Gl. (12) aufschreiben. Diese Gleichung folgt nach Differenzierung der Gl. (11). Damit ist der Operator (2) bestimmt, und die Faktorisierung ist durchgeführt.

Zur Bestimmung der Funktion u_l haben wir die Gl. (10) und (12) erhalten. Aus diesen Gleichungen wird (13) abgeleitet. Nur, wenn das Potential V_l diese Gl. befriedigt, kann die Gl. (1) durch Faktorisierung exakt gelöst werden.

Das wollen wir bei dem quantentheoretischen Zentralkraftproblem anwenden. Es soll untersucht werden, für welche Zentralkraftpotentiale $U(r)$ die Schrödinger-Gleichung (17) mit der Faktorisierungsmethode exakt gelöst werden kann. Nach Abseparierung der Winkel bleibt die Gl. (19) übrig. Sie ist der Gl. (1) gleich, wenn man für λ und V_l (20) und (21) schreibt. V_l muss die Bedingung (13) erfüllen. Daraus kann das Potential (24) berechnet werden. Da aber dieses Potential U unabhänging von der Drehimpulsquantenzahl l ist, kann man das nur mit spezieller Wahl der Konstanten C und g erreichen. Dafür gibt es drei Möglichkeiten:

1.) $C=O$ und g ist unabhängig von l. Das Potential U ist proportional zu r^2 Wir haben das Problem des harmonischen Oszillators vor uns.

2.) $g=O$ und $C=K/(l+1)$. Das Potential ist proportional r^{-1}. Dies ist das Problem der Coulombkraft.

3.) $g=O$ und $C=O$. Das ist der triviale Fall, wo es ausser der Zentrifugalkraft überhaupt keine andere Kräfte gibt.