ИЗВЕСТИЯ
ТОМСКОГО ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА имени С. М. КИРОВА

Том 122 1962

НОВЫЙ ВАРИАНТ ОДНОЙ СТАРОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

Б. Н. РОДИМОВ

Вывод v-уравнения. Релятивистская связь между фазовой и групповой скоростями частицы $uv=c^2$ позволяет высказать предположение, что поскольку фазовая скорость u определяет собой волновые свойства частиц, описываемые обычным уравнением Шредингера (мы будем называть его также u-уравнением), то групповая скорость v также должна определять эти волновые свойства и также должна дать свое волновое уравнение (мы будем называть его v-уравнением) [1].

Обычное уравнение Шредингера можно вывести из уравнения для „модулируемой" волны, распространяющейся с фазовой скоростью u

$$\Delta \psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}. \tag{1}$$

Из функции ψ можно выделить множитель $e^{i\frac{2\pi E}{h}t}$, где $\omega = \frac{2\pi E}{h}$ берется из соотношений для свободной частицы

$$u = \nu\lambda = \nu \frac{h}{mv}; \qquad \nu = \frac{muv}{h} = \frac{mc^2}{h} = \frac{E}{h}$$

и сохраняет свою форму и для связанных систем. Здесь E—полная релятивистская энергия частицы.

Дифференцируя $\psi(r, t) = \psi(r)\, e^{i\frac{2\pi E}{h}t}$, получим

$$\Delta\psi(r) + \frac{4\pi^2 p^2}{h^2}\psi(r) = 0, \tag{2}$$

где $p = \frac{E}{u}$. Подставляя вместо импульса p его нерелятивистское значение $p^2 = 2m_0(E_{кл} - V(r))$, будем иметь обычное уравнение Шредингера

$$\Delta\psi(r) + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E_{кл} - V(r))\psi(r) = 0. \tag{3}$$

В выражении $e^{i\frac{2\pi E}{h}t}$, так как $E \approx m_0 c^2 + E_{кл}$, множитель $e^{i\frac{2\pi}{h}m_0 c^2 t}$, поскольку он фигурирует во всех членах уравнения, отбрасывается и остается множитель $e^{i\frac{2\pi}{h}E_{кл}t}$.

v-уравнение получается из уравнения для „модулирующей" волны, распространяющейся с групповой скоростью v

$$\Delta\psi = \frac{1}{v^2}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}. \tag{4}$$

Здесь также можно выделить временной множитель, в частности в виде $e^{i\frac{4\pi E}{h}t}$. Здесь $\Omega = \frac{4\pi E}{h}$ есть частота модулирующей волны и E является нерелятивистской энергией. В отличие от предыдущего случая для свободной частицы длину волны де Бройля связываем с групповой скоростью v:

$$\lambda = vT;\ T = \frac{h}{mv^2}; \qquad \Omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi mv^2}{h} = \frac{4\pi E}{h}.$$

Для связанных частиц такое выражение для Ω будет только в частных случаях. Для v^2 берем обычное нерелятивистское соотношение

$$v^2 = \frac{2}{m}(E - V(x)).$$

Таким образом в одномерном случае и для временного множителя в виде $e^{i\frac{4\pi E}{h}t}$ получим

$$\Delta\psi(x) + \frac{8\pi^2 m E^2}{h^2(E - V(x))}\psi(x) = 0. \tag{5}$$

Это уравнение и будем называть v-уравнением.

В отличие от u-уравнения в v-уравнении на классической границе (где $E = V(x)$) коэффициент при ψ обращается в бесконечность. На этой границе ψ-функция v-уравнения обращается в нуль. Для свободной частицы, для которой $V(x) \equiv 0$, оба уравнения формально совпадают, хотя одно из них исходит из „модулируемой" волны, другое—из „модулирующей".

Далее мы рассмотрим задачу об атоме водорода с точки зрения v-уравнения.

s-состояния атома водорода. v-уравнение для s-состояний атома водорода запишется в виде

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{dR}{dr} + \frac{8\pi^2 mE^2}{h^2\left(E + \frac{e^2}{r}\right)}R = 0. \tag{6}$$

Введем обозначения $A = -\frac{8\pi^2 mE}{h^2} > 0$; $B = -\frac{e^2}{E} > 0$, тогда

$$R'' + \frac{2}{r} R' - \frac{A}{1 - \frac{B}{r_1}} R = 0 \tag{7}$$

или

$$R'' + \frac{2}{x} R' + \frac{AB^2 x}{1-x} R = 0, \tag{8}$$

если $x = \frac{r}{B}$. Заменой $R = \frac{y}{x}$ приводим уравнение (8) к форме

$$(1-x)\, y'' + \lambda\, xy = 0, \tag{9}$$

где $\lambda = AB^2$. Это уравнение решается заменой $y = e^{\sqrt{\lambda} x} \cdot \eta(\xi)$, где $1 - x = \xi$

$$\xi \eta'' - 2\sqrt{\lambda}\, \xi \eta' + \lambda \eta = 0. \tag{10}$$

Решение этого уравнения ищется в виде ряда $\eta = \sum_m a_m \xi^m$. Коэффициенты ряда связаны рекуррентной формулой

$$a_{n+1} = \frac{2\sqrt{\lambda}\, n - \lambda}{n(n+1)} a_n. \tag{11}$$

Ряд обрывается при

$$2\sqrt{\lambda}\, n - \lambda = 0.$$

Отсюда

$$\lambda = 4n^2. \tag{12}$$

Так как $\lambda = AB^2 = -\frac{8\pi^2 me^4}{h^2 E}$, то получаются обычные значения для энергетических уровней атома водорода

$$E = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2 n^2}. \tag{13}$$

Собственные функции для s - состояний будут иметь вид

$$R_n = \frac{e^2}{E_n r} \cdot e^{-\frac{2nE_n}{e^2} r} \cdot \sum_{m=1}^{n} a_m \left(1 + \frac{rE_n}{e^2}\right)^m. \tag{14}$$

Первые три функции изображены на рис. 1 ($l = 0$).

Интерпретация собственных функций s-состояния. Из рис. 1 видно, что обычная вероятностная интерпретация собственных функций здесь не годится, так как функции в точке $r = 0$ обращаются в бесконечность и обрываются на классической границе для данного энергетического состояния. По характеру функции R_n можно толковать как своеобразные квантовые потенциальные функции. Полная ψ - функция должна включать и временной множитель. В отличие от обычной квантовой механики этот множитель должен быть действительной величиной.

Таким образом можно считать, что в s - состоянии электрон движется вдоль радиуса от протона до классической границы и возбуждает особую сферическую (электромагнитную?) волну, которая, исходя от протона, доходит до классической границы и отражается обратно. Поскольку электрон непрерывно взаимодействует с этой волной, его движение вдоль радиуса будет сложным колебательным движением. Наличие этой волны и предупреждает „падение" электрона на протон в s - состоянии [1]).

Сферическая симметрия волны обусловлена сферической симметрией кулоновского поля протона. Так как скорость волны $< c$, т. е. волна является „медленной", то атом водорода в s - состоянии похож на высокочастотный сферический резонатор с „нагрузкой".

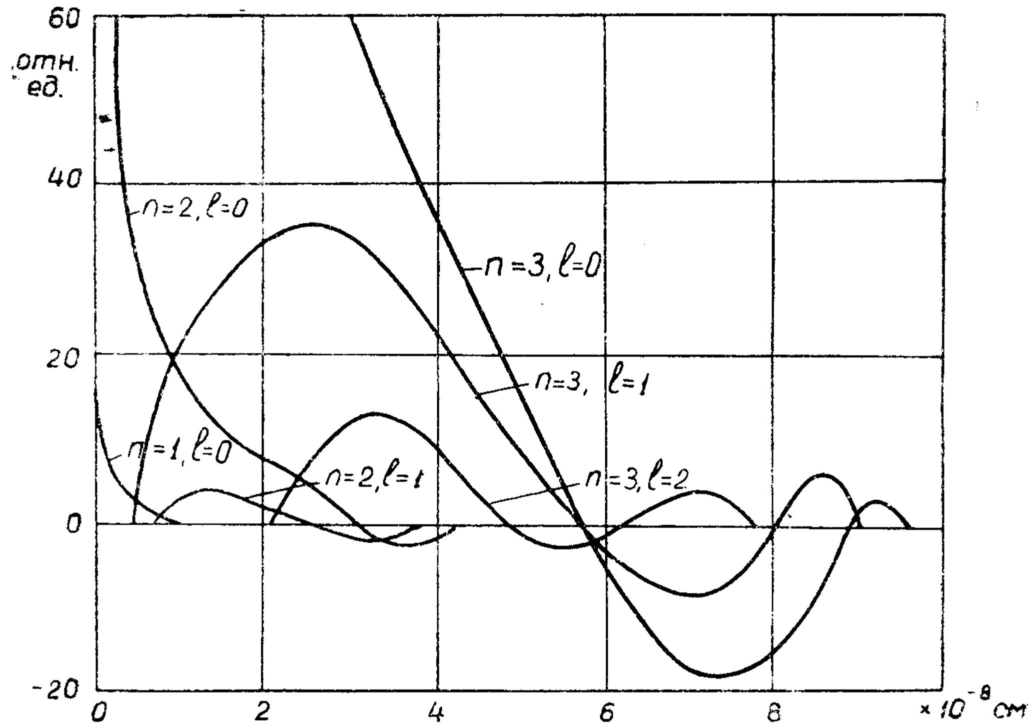

Рис. 1

Хотя скорость волны меняется от точки к точке вдоль радиуса, частота ее должна быть, очевидно, одной и постоянной. Эта частота должна определяться средними значениями волны де Бройля $\bar{\lambda}$ и скорости $\bar{\dot{r}}$ (усреднение по координате r)

$$T_{кв} = \frac{\bar{\lambda}}{\bar{\dot{r}}}.$$

---

[1]) Решение $\eta = \sum a_m \xi^m$, если удовлетворяется рекуррентная формула (11), может содержать или бесконечное, или конечное число членов. Но решение с бесконечным числом членов, а значит и с бесконечным числом нулей, не имеет физического смысла. Решения же с конечным числом членов могут быть интерпретированы только что описанным путем, т. е. ψ-функция должна изображать систему стоячих волн типа электромагнитных волн в высокочастотном резонаторе. Функция R_n должна иметь конечное число нулей, а это требование и выражается в требовании обрыва ряда $\eta = \sum a_m \xi^m$.

Усредняя λ и r, получим для s - состояний атома водорода

$$\bar{\lambda} = \frac{h}{\sqrt{-2mE}} \cdot \frac{\pi}{2}; \quad \bar{r} = \sqrt{-\frac{2E}{m}} \cdot \frac{\pi}{2}; \quad T_{кв} = \frac{h}{2E};$$

$$\omega_{кв} = \frac{4\pi E}{h}. \tag{16}$$

В данном случае получается такое же выражение для частоты как и для свободной частицы.

Обобщение на случай вращательных состояний. Случай вращательных l - состояний атома водорода должен описываться двумя уравнениями. Первое уравнение будет описывать сферическую волну, только теперь с двумя сферическими граничными поверхностями в соответствии с двумя крайними значениями радиуса $r_{\max}$ и $r_{\min}$ классической задачи Кеплера для электрона в поле протона. Второе уравнение должно описывать азимутальную волну, возбуждаемую вращательным движением электрона в направлении координаты φ в шаровом слое между сферами радиусов $r_{\max}$ и $r_{\min}$. Первую волну мы будем называть r_l - волной, вторую волну — φ-волной.

Уравнение для r_l - волны. Частоту r_l - волны находим по отношению

$$T_{кв,r} = \frac{\bar{\lambda}_r}{\bar{r}}.$$

В данном случае

$$\bar{\lambda}_r = \frac{h}{m(r_{\max}-r_{\min})} \int\limits_{r_{\max}}^{r_{\min}} \frac{dr}{\dot{r}} = \frac{h\pi}{2\varepsilon\sqrt{-2mE}};$$

$$\bar{\dot{r}} = \frac{1}{r_{\max}-r_{\min}} \int\limits_{r_{\max}}^{r_{\min}} \dot{r}\,dr = \sqrt{-\frac{2E}{m}} \cdot \pi. \quad \frac{1-\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2\varepsilon}$$

Отсюда

$$T_{кв,r} = \frac{h}{2E\left(1-\sqrt{1-\varepsilon^2}\right)}; \quad \omega_{кв,r} = \frac{4\pi E\left(1-\sqrt{1-\varepsilon^2}\right)}{h}. \tag{17}$$

Здесь

$$\varepsilon = \sqrt{1+\frac{2Ep_\varphi^2}{me^4}}; \quad r_{\max} = -\frac{e^2}{2E}(1+\varepsilon);$$

$$r_{\min} = -\frac{e^2}{2E}(1-\varepsilon). \tag{18}$$

Уравнение для r_l-волны получим из выражения

$$\Delta_r \psi_r + \frac{\omega_r^2}{v_r^2} \psi_r = 0; \tag{19}$$

Δ_r—часть оператора Лапласа, независящая от углов. После подстановки

$$\omega_r = \frac{4\pi E\varepsilon^2}{h} \quad \text{и} \quad v_r^2 = \dot{r}^2 = \frac{2}{m}\left(E + \frac{e^2}{r} - \frac{p_\varphi^2}{2m\,r^2}\right),$$

будем иметь

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{dR}{dr} + \frac{8\pi^2 m E^2 \left(1 - \sqrt{1-\varepsilon^2}\right)^2}{h^2\left(E + \frac{e^2}{r} - \frac{p_\varphi^2}{2mr^2}\right)} R = 0. \tag{20}$$

Уравнение для φ-волны. Из соображений симметрии можно принять, что φ-волна на данном радиусе должна идти с постоянной скоростью, не зависящей от φ. Поэтому

$$\overline{\lambda}_\varphi = \lambda_\varphi = \frac{h}{mr\dot{\varphi}}; \qquad \overline{r\dot{\varphi}} = r\dot{\varphi}; \qquad \omega_{кв,\varphi} = \frac{4\pi E_\varphi}{h} = \frac{2\pi}{h}\,\frac{p_\varphi^2}{mr^2}. \tag{21}$$

Уравнение для φ-волны получим из выражения

$$\Delta_\varphi \psi_\varphi + \frac{\omega_\varphi^2}{v_\varphi^2}\psi_\varphi = 0. \tag{22}$$

Таким образом

$$\frac{1}{r^2\sin^2\Theta}\,\frac{\partial^2\psi_\varphi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2}\,\frac{\cos\Theta}{\sin\Theta}\cdot\frac{\partial\psi_\varphi}{\partial\Theta} + \frac{1}{r^2}\,\frac{\partial^2\psi_\varphi}{\partial\Theta^2} +$$

$$+ \frac{8\pi^2 m}{h^2} E_\varphi \psi_\varphi = 0. \tag{23}$$

Как обычно, полагаем $\psi_\varphi = \Theta(\Theta)\cdot\Phi(\varphi)$ и получаем два уравнения

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2\Phi;$$

$$(1-x^2)\,\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\,\frac{d\Theta}{dx} + \left(\alpha - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0, \tag{24}$$

где $x = \cos\Theta$; $\alpha = \frac{4\pi^2 p_\varphi^2}{h^2} = l(l+1)$, $|m| \leq l$. Решениями уравнения для φ-волны будут присоединенные функции Лежандра

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\cdot\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P\,(x). \tag{25}$$

Решение уравнения для r-волны. Если рассматривать уравнение для r_l-волны само по себе, то оно будет уравнением на собственные значения с двумя параметрами. Решение его будет сложным. В нашем случае задача облегчается тем, что значения параметра p_φ находятся независимо из уравнения для φ-волны.

Запишем уравнение (20) в форме

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{A}{1-\frac{B}{r}+\frac{C}{r^2}}R=0, \tag{26}$$

где

$$A=-\frac{8\pi^2 mE(1-\sqrt{1-\varepsilon^2})^2}{h^2};\qquad B=-\frac{e^2}{E}>0;\qquad C=-\frac{p_\varphi^2}{2mE}>0.$$

Введем переменную $x=\frac{r}{B}$ и сделаем замену $R=\frac{y}{x}$, тогда

$$y''-\frac{\lambda x^2}{(x-x_1)(x-x_2)}y=0. \tag{27}$$

Здесь $\lambda=AB^2$, $x_1=\frac{1}{2}(1-\varepsilon)$, $x_2=\frac{1}{2}(1+\varepsilon)$. Очевидно, решение уравнения будет обрываться в точках $x=x_2$ и $x=x_1$. Замена $y=e^{\sqrt{\lambda}x}\cdot\eta$ приводит уравнение к виду

$$(x-x_1)(x-x_2)\eta''_x+2\sqrt{\lambda}(x-x_1)(x-x_2)\eta'_x+\lambda[x_1x_2-x]\eta=0. \tag{28}$$

При переходе $x_1\to 0$, $x_2\to 1$ получим, очевидно, снова уравнение (10).

Обозначим: $x_2-x=z$; $x-x_1=a-z$; $a=x_2-x_1$, тогда

$$z(a-z)\eta''_z-2\sqrt{\lambda}z(a-z)\eta'_z+\lambda(x_2^2-z)\eta=0. \tag{29}$$

Выделим множитель $(a-z)$, чтобы обеспечить обращение в нуль функции η при $x=x_1$: $\eta=(a-z)W(z)$, тогда

$$z(a-z)W''-2z[1+\sqrt{\lambda}(a-z)]W'+[(2\sqrt{\lambda}-\lambda)z+\lambda x_2^2]W=0. \tag{30}$$

Функцию W берем в виде ряда $W=\sum_m b_m z^m$. Ряд начинается с $m=1$, чтобы обеспечить обрыв решения на второй границе $x=x_2$.

Для коэффициента ряда получаем трехчленную рекуррентную формулу

$$b_{m+1}(m+1)ma+b_m[-m(m-1)-2(1+\sqrt{\lambda}a)m+\lambda x_2^2]+ \tag{31}$$

$$+b_{m-1}[2\sqrt{\lambda}m-\lambda]=0.$$

Если обозначить отношение $\gamma_m=\frac{b_{m+1}}{b_m}$ и $\gamma_{m-1}=\frac{b_m}{b_{m-1}}$, можно получить формулу в следующем виде

$$\gamma_{m-1}=-\frac{2\sqrt{\lambda}m-\lambda}{[\lambda x_2^2-m(m-1)-2(1+\sqrt{\lambda}a)m]\left\{1+\frac{am(m+1)}{\lambda x_2^2-m(m-1)-2(1+\sqrt{\lambda}a)m}\gamma_m\right\}} \tag{32}$$

или

$$\gamma_{m-1} = \cfrac{\vartheta_m}{1+\alpha_m \cfrac{\vartheta_{m+1}}{1+\alpha_{m+1} \cfrac{\vartheta_{m+2}}{1+\ldots}}}, \qquad (33)$$

где

$$\vartheta_m = -\frac{2\sqrt{\lambda}\, m-\lambda}{\lambda x_2^2 - m(m-1) - 2(1+\sqrt{\lambda}\, a)\, m};$$

$$\alpha_m = \frac{am(m+1)}{\lambda x_2^2 - m(m-1) - 2(1+\sqrt{\lambda}\, a)\, m}. \qquad (34)$$

Для первых двух коэффициентов получим связь в виде

$$b_2 = -\frac{2(1+\sqrt{\lambda}) - \lambda x_2^2}{2a}\, b_1. \qquad (35)$$

Для нахождения λ (а, значит, и E) получается трансцендентное уравнение.

Для проверки наших рассуждений можно вычислить функции R_{nl}, пользуясь рекуррентной формулой (31) и известными выражениями E через n и p_φ через l. Результаты вычислений приведены на рис. 1 (Функции, для которых $l \neq 0$).

Выводы

τ-уравнение дает возможность построить новую физическую картину атома водорода. Хотя в смысле математической гибкости едва ли метод τ-уравнения может конкурировать с уравнением Шредингера, однако новый подход к задачам квантовой механики может дать и новые результаты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Н. Родимов. Атомы и молекулы как автоколебательные системы. Труды 3-й межвузовской конференции по электронным ускорителям, Томск, 1961.

НИИ при Томском политехническом институте.