ЧАСТИЦА В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

При движении частицы в поле U=U(r) полный набор наблюдаемых образуют $\hat{H},\ \hat{\vec{L}}^2,\ L_z$, и стационарные состояния классифицируются значениями E, l, m. Волновая функция имеет вид

$$\psi_{Elm}(\bar{r}) = R_l(r|E)\,Y_l^m(\theta,\varphi).$$

Для радиальной функции получается задача:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l}{dr}\right)+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-U(r)\right]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R_l=0;$$

$R_l,\ R_l'$ - непрерывны ;

$|R_l|<+\infty,\ r\to 0$;

$|R_l|<+\infty,\ r\to\infty$.

Полезно сделать замену функции

$$R_l=\frac{1}{r}\chi_l.$$

Для χ_l получается задача:

$$\begin{cases}\chi_l''(r|E)+\dfrac{2\mu}{\hbar^2}\left\{\left[E-U(r)\right]-\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right\}\chi_l(r|E)=0;\\ \chi_l,\ \chi_l'-\text{непрерывны};\\ \chi_l(0|E)=0;\\ \chi_l(r|E)<\infty,\ r\to\infty.\end{cases}$$

Функции R и χ нормированы соответственно условиями

$$\int_0^\infty R_{lE}^*R_{lE'}r^2dr=\Delta_{EE'}$$

и

$$\int_0^\infty \chi_{lE}^*\chi_{lE'}dr=\Delta_{EE'}$$

1. Найти энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний ротатора – частицы массы μ, свободно движущейся по сфере радиуса a.

Решение.

В данном случае

$$U(r)=U(a)=\text{Const}\ \Rightarrow\ U(r)=0\ .$$

Волновые функции

$$\psi_{Elm}(\bar{r})=R_l(r|E)\,Y_l^m(\theta,\varphi)=\text{Const}\cdot Y_l^m(\theta,\varphi).$$

Радиальная часть есть константа (r = Const.), а потому для $R_l(r|E)$:

$$\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}E-\frac{l(l+1)}{a^2}\right\}\cdot\text{const}=0$$

Откуда

$$\boxed{E_l = \frac{\hbar^2}{2J} l(l+1), \quad [J = \mu a^2], \quad \psi_{Elm}(\bar{r}) = Y_l^m \cdot (\theta, \varphi)}.$$

2. Решить аналогичную задачу для плоского ротатора.
Решение.
Пишем уравнение Шредингера в полярных координатах:

$$\psi = \psi(\rho, \varphi): \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho \cdot \frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + U(\rho)\psi = E\psi \ .$$

Полный набор образуют энергия E и проекция момента m (сам момент):

$$\psi_{Em}(\rho, \varphi) = R_{E,m}(\rho) \cdot e^{im\varphi}.$$

Подстановка дает радиальное уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR_{Em}}{d\rho}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{m^2}{\rho^2}R_{Em} + U \cdot R_{Em} = E \cdot R_{Em} \ .$$

Для ротатора $\rho = a$, $U(\rho) = 0$, $R_m(\rho) = \text{Const.}$, а потому

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{m^2}{a^2} \cdot \text{Const} = E \cdot \text{Const} \ .$$

Отсюда

$$\boxed{E_m = \frac{\hbar^2}{2J} m^2, \ \psi_{Em}(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{im\varphi}} \ .$$

3. Найти энергетические уровни и соответствующие волновые функции частицы, находящейся в S- состоянии в сферической потенциальной яме

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 \ , & r \le R \ , \\ 0 \ , & r > R \ . \end{cases}$$

<u>Решение</u>.
В S- состоянии (l=0) радиальное уравнение Щредингера записывается как

$$\chi_E''(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\chi_E(r) = 0; \qquad \begin{cases} \chi(0) = 0 \\ |\chi(\infty)| < \infty \ . \end{cases}$$

Последнее условие равнозначно тому, что мы рассматриваем одномерную задачу с бесконечно высокой стенкой в начале координат. В итоге задача свелась к той, которая подробно анализировалась раньше (в разделе одномерные задачи). Энергетический спектр будет тем же, а волновые функции нужно делить на r : $R = \dfrac{\chi}{r}$.

4. Найти энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний трехмерного изотропного гармонического осциллятора.
Решение.
Решаем задачу в декартовых координатах:

$$\nabla^2\psi(x, y, z) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\mu\omega^2}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right)\right]\psi(x, y, z) = 0$$

И разделяем переменные:

$$\psi(x,y,z)=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)\equiv\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3).$$

Подстановка дает

$$\left(\frac{\psi_1''}{\psi_1}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\mu\omega^2}{2}x_1^2\right)+\left(\frac{\psi_2''}{\psi_2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\mu\omega^2}{2}x_2^2\right)+\left(\frac{\psi_3''}{\psi_3}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\mu\omega^2}{2}x_3^2\right)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}E\ ,$$

Откуда

$$\psi_i''(x_i)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E_i-\frac{\mu\omega^2}{2}x_i^2\right]\psi_i(x_i)=0,\quad E_1+E_2+E_3=E\ .$$

Для каждого уравнения ограниченные решения существуют лишь при

$$E_{ni}=\hbar\omega\left(n_i+\frac{1}{2}\right).$$

В итоге для энергетических уровней получаем

$$\boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)},\ n=n_1+n_2+n_3\ ,$$

а для волновых функций стационарных состояний из одномерной задачи

$$\psi_{n_1n_2n_3}(\overline{r})=A_{n_1n_2n_3}\cdot e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\cdot H_{n_1}(\alpha x)H_{n_2}(\alpha y)H_{n_3}(\alpha z)\ ,\ \alpha\equiv\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\ .$$

5. Определить кратность вырождения n - ого уровня в задаче 4.

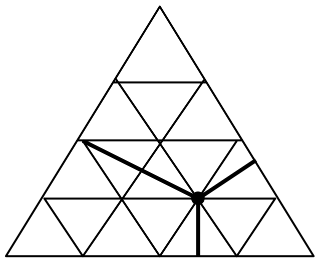
Решение.

Кратность N равна числу способов, которыми n можно представить в виде суммы трех неотрицательных целых чисел n_i (которыми n шаров можно разложить по трем ящикам). Построим равносторонний треугольник с высотой n и разобьем его сеткой треугольников с единичными высотами. Расстояние каждого узла от каждой стороны есть целое число, а сумма этих расстояний одинакова для всех узлов и равна как раз n. Поэтому кратность вырождения равна полному числу узлов, включая и внешние. Для полного числа узлов имеем:

$$N=\sum_{k=1}^{n+1}k=\frac{1+(n+1)}{2}(n+1)\ ,$$

т.е.

$$N=\frac{(n+1)(n+2)}{2}$$



На рисунке пример: n=4, N=15, $n_1n_2n_3=1,1,2$

6. Определить возможные значения орбитального момента l в стационарных состояниях изотропного осциллятора.

Решение. Мы классифицировали состояния тремя числами n_1, n_2, n_3, но можно их классифицировать, как и всегда в центральном поле , тремя числами n, l, m. Пусть n задано. Посмотрим, какие значения может иметь орбитальный момент l. Найдем четность состояния, учитывая, что полиномы Эрмита H_{n_i} имеют четность $\eta_i=(-1)^{n_i}$. Имеем:

$$\eta_n=\eta_{n_1}\cdot\eta_{n_2}\cdot\eta_{n_3}=(-1)^{n_1}\cdot(-1)^{n_2}\cdot(-1)^{n_3}=(-1)^{n_1+n_2+n_3}=(-1)^n.$$

Таким образом, если n - четное, то четность положительна и состояния могут быть только с четными l. Если n - нечетное, то состояния представлены только нечетными l.

Утверждение:

n - четное: l = 0, 2, 4, …n;

n - нечетное: l = 1, 3, 5, …n.

Мы докажем это утверждение просто подсчитав кратность вырождения уровня с заданными n, предположив, что утверждение верно. Пусть для определенности n - нечетное. Каждый уровень с заданным l вырожден с кратностью 2l+1. Поэтому имеем:

$$N = \sum_{l=1}^{n} (2l+1) \ ,$$

где сумма идет лишь по нечетным l=2k-1 . Подстановка дает

$$N = \sum_{k=1}^{(n+1)/2} \left[2(2k-1)+1\right] = \sum_{k=1}^{(n+1)/2} (4k-1) = \frac{3+(2n+1)}{2} \cdot \frac{n+1}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2} \ ,$$

т.е. мы получили правильный результат (см. задачу 5). Аналогично проверяется утверждение для четного n.

7. Написать последовательность уровней изотропного осциллятора в обозначениях ядерной физики.

<u>Решение</u>. Напомним, что состояния задаются орбитальным моментом l , проекцией момента m , которая не указывается, ибо по ней всегда имеется вырождение, и натуральным числом $\tilde{n}$, которое не совпадает со старым n . Оно вводится так. Как только появляется уровень с заданным l, ему приписывается $\tilde{n} = 1$, а затем при фиксированном l значение $\tilde{n}$ возрастает с ростом энергии. Учитывая всё полученное выше, имеем такую последовательность уровней:

$$(1S);\ (1p);\ (1d,\ 2s);\ (1f,\ 2p);\ (1g,\ 2d,\ 3s);\ldots\ .$$

В скобках включены взаимно вырожденные состояния.

Из полученных в задаче 4 волновых функций $\psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r})$ можно составить линейные комбинации, отвечающие состояниям с определенными $\tilde{n}$, l , m.

Но мы этим заниматься не будем. Отметим лишь два почти очевидных результата.

При n = 0 имеется одно состояние

$$\psi_{000}(x, y, z) = A \cdot e^{-\alpha r^2/2} = \psi_{n=1,\ l=0,\ m=0}\ .$$

Видно, что волновая функция зависит только от r , т.е. она сферически симметрична. Это и означает, что в данном случае l = m = 0.

При n = 1 имеется три волновых функции, а значит три состояния

$$\psi_{100},\quad \psi_{101},\quad \psi_{001},$$

но они не отвечают определенным значениям l и m . Подходящие линейные комбинации таковы:

$$l=1,\quad m=0:\quad \psi^{110} = \psi_{001} = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_1(z)$$

$$l=1,\quad m=\pm 1:\quad \psi^{11\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100} \pm i\psi_{010}) = \frac{1}{2}\big[\psi_1(x)\psi_0(y) \pm$$

$$\pm i\psi_0(x)\psi_1(y)\big]\Psi_0(z)$$

8. Решить задачу о трехмерном гармоническом осцилляторе в сферических координатах. Указание6 см. задачник Галицкого и др. , задача 4.25.

9. Найти энергию и волновую функцию основного состояния водорода.

<u>Решение</u>.

Основное состояние частицы в центральном поле есть S - состояние (l=0), так что волновая функция не зависит от углов, и

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\psi(r)}{dr}\right]+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}\right)\psi(r)=0$$

Волновая функция не должна иметь нулей и должна быстро убывать при $r\to\infty$, а потому ищем ее в виде

$$\psi(r)=A\cdot e^{-r/a}.$$

Подставляем в уравнение:

$$-\frac{1}{a}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2e^{-r/a}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}\right)e^{-r/a}=0;$$

$$-\frac{1}{a}\frac{1}{r^2}2re^{-r/a}+\frac{1}{a^2}\frac{1}{r^2}r^2e^{-r/a}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}e^{-r/a}+\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r}e^{-r/a}=0;$$

$$\left(\frac{2\mu e^2}{\hbar^2}-\frac{2}{a}\right)\frac{1}{r}+\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}+\frac{1}{a^2}\right)=0$$

Это должно быть тождеством, а потому обе скобки – нули. Отсюда,

$$a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\quad\text{и}\quad E=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\ .$$

Константу находим из условий нормировки:

$$1=\int\limits_{\mathbb{R}^3}\psi^*(\overline{r})\psi(\overline{r})d\tau=4\pi A^2\int\limits_0^\infty r^2e^{\frac{-2r}{a}}dr=4\pi A^2\left(-\frac{a}{2}\right)\int\limits_0^\infty r^2de^{-\left(\frac{2r}{a}\right)}=$$

$$=2\pi A^2\cdot a\cdot 2\int\limits_0^\infty re^{-\frac{2r}{a}}dr=4\pi A^2a\left(-\frac{a}{2}\right)\int\limits_0^\infty r\cdot d\left(e^{-\frac{2r}{a}}\right)=$$

$$=2\pi A^2a^2\int\limits_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}}dr=2\pi A^2a^2\left(-\frac{a}{2}\right)e^{-\frac{2r}{a}}\Bigg|_0^\infty=\pi A^2a^3\Rightarrow A=\frac{1}{a\sqrt{\pi a}}\ .$$

Таким образом,

$$\boxed{E_0=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2},\quad \psi_0(\overline{r})=\frac{1}{a\sqrt{\pi a}}e^{-\frac{r}{a}},\quad a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}}\ .$$

Дальнейшие задачи относятся к атому водорода в основном состоянии, что не оговаривается. Полезно знать интеграл

$$I_n\equiv\int\limits_0^\infty x^ne^{-\alpha x}dx=\frac{n!}{\alpha^{n+1}},$$

который получается из

$$I_0\equiv\int\limits_0^\infty e^{-\alpha x}dx=\frac{1}{\alpha}$$

n - кратным дифференцированием по параметру α .

10. Найти вероятность нахождения электрона в сферическом слое от r до $r+dr$

<u>Решение</u>.

Вероятность пребывания в объеме $d\tau$ есть

$$dW(\overline{r})=|\psi_0|^2d\tau=A^2e^{-\frac{2r}{a}}r^2drd\Omega\ .$$

Искомая вероятность получается интегрированием по углам:

$$dW(r)=4\pi A^2e^{-\frac{2r}{a}}r^2dr\ ,$$

или, с учетом нормировочного множителя, $\boxed{dW(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr}$.

11. Чему равен радиус атома водорода?
Решение.
Вопрос некорректный, так как допускает разные ответы. Основа обсуждения – радиальная плотность вероятности из задачи 8

$$w(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}}$$

(а). Радиус R_1 - расстояние на котором экспонента в плотности вероятности убывает в е раз: $\boxed{R_1 = \frac{a}{2}}$.

(б). Радиус R_2, на котором плотность вероятности имеет максимум:

$$\frac{dW}{dr} = 0 \Rightarrow 2r - 2r^2 \frac{1}{a} = 0 ,$$

т.е. R_2 есть боровский радиус:

$$\boxed{R_2 = a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}} .$$

(в). Радиус R_3 - среднее значение r:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r \cdot dW(r) = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{4}{a^3} I_3\left(\frac{2}{a}\right) = \frac{4}{a^3} \frac{3!}{\left(2/a\right)^4};$$

$$\boxed{R_3 = \frac{3}{2} a} .$$

(г). Радиус R_4 - средний квадратичный радиус:

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^\infty r^2 dW(r) = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^4 \cdot e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{4}{a^3} I_4\left(\frac{2}{a}\right) = \frac{4}{a^3} \frac{4!}{2^5} a^5 = 3a^2,$$

т.е. $\boxed{R_4 = \sqrt{3} a \cong 1{,}7a}$.

12. Найти средние значения потенциальной и кинетической энергии.
Решение.

$$\langle u \rangle = \left\langle -\frac{e^2}{r} \right\rangle = -e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -e^2 \int_0^\infty \frac{1}{r} dW(r) = -e^2 \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r \cdot e^{-\frac{2r}{a}} dr =$$

$$= \frac{4e^2}{a^3} I_1\left(\frac{2}{a}\right) = -\frac{4e^2}{a^3} \frac{1}{\left(2/a\right)^2} = -\frac{4e^2}{a^3} \frac{a^2}{4}:$$

$$\boxed{\langle u \rangle = -\frac{e^2}{a} = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} = 2E} .$$

Среднее значение кинетической энергии можно вычислять непосредственно, но гораздо проще так:

$\langle T \rangle = \langle E \rangle - \langle u \rangle = E - 2E = -E$.

Кстати, заодно получили, что

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle u\rangle \quad .$$

Этот результат справедлив и в классической механике (он следует из так называемой теоремы вириала).

13. Найти эффективный потенциал электростатического поля атома водорода.
Решение.
Искомый потенциал создается плотностью заряда

$$\rho(\bar{r}) = e\delta(\bar{r}) - e\left|\psi(\bar{r})\right|^2 \; .$$

Первое слагаемое создает кулоновский потенциал $\frac{e}{r}$, а второе – потенциал φ_e, который подчиняется уравнению Пуассона

$$\nabla^2\varphi_e = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\varphi}{dr}\right) \equiv \frac{1}{r}(r\varphi)'' = -4\pi\rho = 4\pi e|\psi|^2 - \frac{4e}{a^3}e^{-\frac{2r}{a}} \quad .$$

Интегрируем:

$$\left[(r\varphi_e)'\right]' = \frac{4er}{a^3}\cdot e^{-\frac{2r}{a}} \; :$$

$$(r\varphi_e)' = \frac{4e}{a^3}\int re^{-\frac{2r}{a}}dr = \frac{4e}{a^3}\left(-\frac{a}{r}\right)\int rde^{-\frac{2r}{a}} = -\frac{2e}{a^2}\int rd\left(e^{-\frac{2r}{a}}\right) =$$

$$= -\frac{2e}{a^2}re^{-\frac{2r}{a}} + \frac{2e}{a^2}\int e^{-\frac{2r}{a}}dr = -\frac{2e}{a^2}re^{-\frac{2r}{a}} - \frac{1}{a}e^{-\frac{2r}{a}} + A;$$

$$r\varphi_e = -\frac{2e}{a^2}\int r\cdot e^{-\frac{2r}{a}}dr - \frac{e}{a}\int e^{-\frac{2r}{a}}dr + Ar =$$

$$= \frac{e}{a}re^{-\frac{2r}{a}} + \frac{e}{2}e^{-\frac{2r}{a}} + \frac{e}{2}e^{-\frac{2r}{a}} + Ar + B =$$

$$= \frac{e}{a}r\cdot e^{-\frac{2r}{a}} + e\cdot e^{-\frac{2r}{a}} + Ar + B;$$

$$\varphi_e = \frac{e}{a}e^{-\frac{2r}{a}} + \frac{e}{r}e^{-\frac{2r}{a}} + A + \frac{B}{r};$$

$$\varphi_e(\infty) = 0 \Rightarrow A = 0; \quad \left|\varphi_e(0)\right| < \infty \Rightarrow \varphi_e(0) = \frac{e}{a} + \frac{e}{r} + \frac{B}{r} \ll \infty \Rightarrow$$

$$\Rightarrow B = -e \; :$$

$$\varphi_e = \left(\frac{e}{a} + \frac{e}{r}\right)e^{-\frac{2r}{a}} - \frac{e}{r}; \quad \varphi = \varphi_e + \frac{e}{r}$$

$$\boxed{\varphi(\bar{r}) = \left(\frac{e}{a} + \frac{e}{r}\right)\cdot e^{-\frac{2r}{a}}} \quad .$$

Глубоко внутри атома, т.е. при $r \ll a$, или $r \to 0$, имеем кулонов потенциал протона $\varphi(\bar{r}) \approx \frac{e}{r}$.

Очень далеко от атома, т.е. при $r \ll a$, или $r \to \infty$, имеем практически полную экранировку поля протона полем электрона:

$$\varphi(\bar{r}) \approx \frac{e}{a} \cdot e^{-\frac{2r}{a}} .$$

14. Найти поправку к энергии основного состояния водородоподобного атома, обусловленную конечностью радиуса ядра R .

Решение.

Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} + \hat{u}(\bar{r}) = \frac{P^2}{2\mu} + \begin{cases} -\dfrac{ze^2}{r} , & r \ge R \\ -\dfrac{ze^2}{R}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R^2}\right) , & r < R \end{cases} =$$

$$\left(\frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{ze^2}{r}\right) + \begin{cases} 0, & r \gg R \\ -\dfrac{ze^2}{R}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R^2}\right) + \dfrac{ze^2}{r} , & r < R \end{cases} \equiv$$

$$\equiv \hat{H}^{(0)} + \hat{H} .$$

Для невозмущенного гамильтониана решение задачи известно:

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{ze^2}{r} : \ E^{(0)} = -\frac{z^2e^2}{2a} , \ \psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{z}{a}r} , \ a \equiv \frac{\hbar^2}{\mu e^2} .$$

Возмущением служит гамильтониан

$$\hat{H} = ze^2\left\{\frac{1}{r} - \frac{3}{2}\frac{1}{R} + \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^3}\right\}$$

В первом порядке теории возмущений имеем:

$$\Delta E = H_{00} = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\bar{r})\hat{H}\psi(\bar{r})\,d\tau = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \left|\psi^{(0)}(\bar{r})\right|^2 \hat{H}d\tau = 4\pi\int_0^\infty \left|\psi^{(0)}(r)\right|^2 \hat{H}r^2dr =$$

$$= 4\pi \cdot \frac{z^3}{\pi a^3} ze^2 \int_0^R e^{-\frac{2z}{a}r}\left(\frac{r^4}{2R^3} - \frac{3r^2}{2R} + r\right)dr .$$

Интеграл может быть вычислен точно, но это хлопотно, да и ни к чему. Даже для самых тяжелых атомов $R \sim 10^{12}$ см, тогда как $a \sim 10^{-8}$ см, а потому $(R/a) \sim 10^{-4} \ll 1$.

Поэтому во всей области интегрирования показатель экспоненты практически равен нулю, а сама она равна единице. Тогда,

$$\Delta E = \frac{4z^4e^2}{a^3}\int_0^R \left(\frac{r^4}{2R^3} - \frac{3r^2}{2R} + r\right)dr = \frac{4}{5}\frac{z^4e^2}{2a^3}R^2 \equiv \frac{z^2e^2}{2a} \cdot \frac{4}{5}z^2\left(\frac{R}{a}\right)^2 ,$$

и окончательно

$$\boxed{\Delta E = \frac{4}{5}z^2\left(\frac{R}{a}\right)^2 \left|E^{(0)}\right|} .$$

Для водорода ($z = 1$) относительная величина поправки очень мала:

$$\frac{\Delta E}{|E|} \sim \left(\frac{R}{a}\right)^2 \sim 10^{-10} ,$$

и заметить ее почти невозможно, но учитывая, что

$$R \sim V^{\frac{1}{2}} \sim M^{\frac{1}{2}} \sim A^{\frac{1}{2}} \sim z^{\frac{1}{3}} ,$$

для произвольного атома получаем

$$\frac{\Delta E}{|E|} \sim z^{\frac{8}{3}} .$$

Для тяжелых атомов, например, для К-электронов урана с z = 100, величина сдвига оказывается весьма ощутимой – порядка 10^{-5} .

Особенно велики поправки, когда боровский радиус a достаточно мал, а это будет при замене одного из электронов мюоном μ^- с массой $\cong 200\ m_e$, а значит, с $a_\mu \approx \left(\frac{1}{200}\right) a$.
Здесь наблюдать сдвиг очень просто, и на этом основан один из точнейших методов измерения радиусов ядер.

15. Вычислить изменение энергии К – электрона при бета-распаде ядра данного атома. Сравнить с точным результатом.
Решение.
При бета-распаде заряд ze увеличивается на e , так что роль гамильтониана возмущения играет оператор

$$\hat{H} = -\frac{e^2}{r} .$$

В первом порядке теории возмущений имеем:

$$\Delta E^{(1)} = H_{00} = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\bar{r})\hat{H}\psi(\bar{r})d\tau = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\bar{r})|^2 \hat{H} d\tau =$$

$$= 4\pi\int_0^\infty |\psi(r)|^2 \hat{H} r^2 dr = 4\pi\left(-e^2\right)\frac{z^3}{\pi a^3}\int_0^\infty r e^{-\frac{2z}{a}r} dr =$$

$$= -\frac{4z^3e^2}{a^3} I_1\left(\frac{2z}{a}\right) = -\frac{4z^3e^2}{a^3}\frac{1}{\left(\frac{2z}{a}\right)^2} .$$

Таким образом,

$$\boxed{\Delta E^{(1)} = -\frac{ze^2}{a} = -\frac{z\mu e^4}{\hbar^2}} .$$

Вспоминаем точные значения энергий основного состояния начального и конечного атомов (считая формально, что электрон один, так как его энергия определяется главным образом ядром):

$$E(z) = -\frac{z^2e^2}{2a} = -\frac{z^2\mu e^4}{2\hbar^2}$$

и

$$E(z+1) = -\frac{(z+1)^2 \cdot e^2}{2a} = -\frac{(z+1)^2 \mu e^4}{2\hbar^2}$$

Отсюда получаем точный результат:

$$\boxed{\Delta E = -\frac{\left(z + \frac{1}{2}\right)\mu e^4}{\hbar^2}} \quad .$$

Абсолютная погрешность равна энергии основного состояния атома водорода. Относительная погрешность уменьшается с ростом порядкового номера химического элемента:

$$|\delta E| = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \ , \quad \frac{|\delta E|}{|\Delta E|} = \frac{1}{z + \frac{1}{2}} \quad .$$