Определение потенциала ядра с помощью решения уравнения Шредингера

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Аннотация

Решение в виде гипергеометрической функции является конечным произведением экспоненты и полинома от безразмерного радиуса, который разбивается на отдельные множители. Взяв логарифм от этой функции и продифференцировав по радиусу получим конечную сумму вычетов с множителем единица и с определяемым полюсом плюс постоянное слагаемое. Решать такое нелинейное дифференциальное уравнение относительно производной от логарифма волновой функции проще, чем считать гипергеометрический ряд кроме того, можно решить задачи с другим значением потенциала. В частности, исследован потенциал, моделирующий ядерные силы. Оказалось, что ядерный потенциал зависит от орбитального собственного числа электрона и собственное значение энергии атома водорода с учетом ядерного потенциала не зависит от орбитального собственного числа.

Уравнение Шредингера при рассеянии элементарных частиц на произвольном потенциале надо описывать в комплексном пространстве с комплексной энергией. При этом получается новый вид решения уравнения Шредингера

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi$$

Подставим решение

$$\psi(t,r,\theta)=\exp\{-i[Et/\hbar-\int_0^r k(u)du]\}f(\theta)/r \qquad (1)$$

в дифференциальное уравнение, получим

$$E\psi=\frac{\hbar^2}{2m}(k^2-i\frac{dk}{dr})\psi+U\psi+\frac{\hbar^2}{2mr^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\}.$$

Переменные разделились, представим волновую функцию в зависимости от радиуса и угла, получим

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}(k^2-i\frac{dk}{dr})+U(r)+\frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}$$
$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\}=\lambda f(\theta),\lambda=l(l+1).$$

Для решения задачи рассеяния надо знать решение задачи движения в кулоновском потенциале.

Проверим формулу (1), подставив в уравнение волновую функцию основного состояния атома водорода. Задача сводится к уравнению $2\exp(-r)=\exp[i\int k(u)du]/r, ik(r)=-1+1/r$. Подставляем в приведенную к безразмерному виду формулу (2), получим $2\varepsilon=-1+2/r-1/r^2+1/r^2-2/r=-1$, т.е. получаем энергию основного состояния атома водорода.

Если взять волновую функцию в виде

$$\psi(t,r,\theta)=\exp[i\int_0^r k(u,t)du]f(\theta),$$

то получим дифференциальное уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\ln\psi}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}(k^2-i\frac{dk}{dr}-\frac{2ik}{r})+U+\frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}.$$

Продифференцируем это уравнение по радиусу, получим

$$\frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} - i\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2V_r}{r^2}\right) + \frac{\partial[U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}]}{m\partial r} = 0;$$
$$V_r = \frac{\hbar k}{m} = -i\frac{\hbar}{m}\frac{\partial \ln\psi}{\partial r}$$

Получаем уравнение Навье-Стокса с кинематической вязкостью $i\frac{\hbar}{2m}$ и давлением $p/\rho = [U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}]/m$. Можно совершить и обратный переход, от уравнения Навье-Стокса к уравнению (2), которое можно проинтегрировать.

Уравнение Шредингера сводится к уравнению где уравнение приведено к безразмерному виду

$$\frac{2ma_0^2 E}{\hbar^2} = 2\varepsilon = k^2 - i\frac{dk}{dr} + 2u(r); u(r) = \frac{2ma_0^2 U(r)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\ . \quad (2)$$

В случае произвольного собственного значения имеем для водородоподобного атома радиальная часть волновой функции равна $R_{nl} = \exp(-r/n) r^l L_{nl}(r)$ см. [1]

$$\begin{aligned} ik(r) &= \frac{d}{dr}[-r/n + (l+1)\ln r + \ln L_{nl}(r)] = \\ &= \frac{-1}{n_r + l + 1} + \frac{l+1}{r} + \sum_{k=1}^{n-1}\frac{1}{r - a_k} \end{aligned} \quad . \qquad (3)$$

Можно получить решение (2), подставляя в (2) решение (3) и находя значение $n-1$ константы a_k и определить собственное значение энергии ε, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях радиуса. Но это возможно только в случае потенциала Кулона. В случае потенциала $2u(r) = -\frac{2}{r} + \frac{b}{r^2}$ решение ищем в виде (1), это получается при целом орбитальном числе.

Где величина n_r радиальное квантовое число.

$$ik(r) = -\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{\sqrt{1/4+b}+1/2}{r} + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{1}{r-a_k}. \qquad (4)$$

При условии $n_r = 0$ для основного состояния водородоподобного атома подставляем значение волнового числа в уравнение (2) с потенциалом $2u(r) = -\frac{2}{r} + \frac{b}{r^2}$ получаем собственное значение энергии $\varepsilon_{0b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+1/2)^2}$.

$$ik(r) = -\frac{1}{\sqrt{1/4+b}+1/2} + \frac{\sqrt{1/4+b}+1/2}{r}.$$

При этом волновая функция равна

$$\psi(r) = \exp\left(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+1/2}\right) r^{\sqrt{1/4+b}-1/2}.$$

При произвольном n в уравнение (2) надо подставлять значение (4) и находить значение собственной энергии и коэффициентов $a_k, k = 1,\ldots,n_r$.

$$\psi(r) = \exp\left(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+1/2+n_r}\right) r^{\sqrt{1/4+b}-1/2} L_{n_r b}(r)$$

При условии полином $L_{n_r b}(r) = \prod_{k=1}^{n_r} (r-a_k)$ в волновой функции имеет более сложный вид, зависящий от коэффициента $a_k(b)$. Величина собственной энергии равна $\varepsilon_{n_r b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+1/2+n_r)^2}$

В случае $n_r = 1$ получаем значение энергии $\varepsilon_{1b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+3/2)^2}$.

Волновая функция при этих значениях параметра равна

$$\psi(r) = \exp(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+3/2}) r^{\sqrt{1/4+b}-1/2} [r - (\sqrt{1/4+b}+1/2)(\sqrt{1/4+b}+3/2)].$$

При условии $b=0$ получаем правильное значение волновой функции

$$\psi(r) = \exp(-\frac{r}{2})(r-2) \sim \exp(-\frac{r}{2})(1-r/2).$$

В случае если решение является вырожденной гипергеометрической волновой функцией можно реализовать предлагаемую идею.

Рассмотрим ядерный потенциал с учетом энергии электронов при $l=0$ и найдем его собственную энергию. Потенциальную энергию будем рассматривать в виде $2u(r) = \frac{c}{r^4} - \frac{2(1+\alpha)}{r} + \frac{b}{r^2}; \alpha = \frac{m_e}{m_p}$. Ищем значение функции в виде

$$ik(r) = -\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{\sqrt{1/4+b}-1/2}{r} - \frac{\sqrt{c}}{r^2} + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{1}{r-a_k}. \qquad (5)$$

Рассмотрим простейший случай $n_r = 0$. Подставим (5) в уравнение (2), получим, после приведения подобных членов равенство нулю коэффициентов при степенях радиуса -1,-2,-3. Итого получим 3 уравнений. Имеется 3 неизвестных констант ε, b, c. Решая это уравнение получим

$b = 2, \varepsilon = -(1+\alpha)^2 / 2(\sqrt{1/4+b} - 1/2)^2 = -(1+\alpha)^2/2$

$c = (\sqrt{1+4b} - 1)^2 / [8(-\varepsilon)] = 1/[2(-\varepsilon)]$, где волновая функция равна

$$\psi(r) = \exp(-r\sqrt{-2\varepsilon})(r+i\alpha)^{\sqrt{1/4+b}-1/2} \exp[\frac{1}{(r+i\alpha)(1+\alpha)}] =$$
$$= \exp[-r(1+\alpha)](r+i\alpha)^{\sqrt{1/4+b}-1/2} \exp[\frac{1}{(r+i\alpha)(1+\alpha)}].$$

Где реализована регуляризация волновой функции в сингулярности. Функция $\frac{r}{r^2+\alpha^2}$ имеет максимум при условии $r=\alpha=\frac{m_e}{m_p}=\frac{r_p}{a_0}$, т.е. волновая функция имеет максимум, при радиусе, равном радиусу Бора протона $r_p=\frac{\hbar^2}{m_p e^2}$.

Рассмотрим ядерный потенциал плюс потенциал электронов при $l \neq 0$ и найдем его собственную энергию. Потенциальную энергию будем рассматривать в виде $2u(r)=\frac{c}{r^4}-\frac{2(1+\alpha)}{r}+\frac{b+l(l+1)}{r^2};\alpha=\frac{m_e}{m_p}$. Ищем значение функции в виде (считаем зависимость от орбитального квантового числа определенной при вращении протона в ядре, иначе она войдет в значение b)

$$ik(r)=-\sqrt{-2\varepsilon}+\frac{-\sqrt{1/4+b}-1/2+l+1}{r}-\frac{\sqrt{c}}{r^2}+\sum_{k=1}^{n_r}\frac{1}{r-a_k}. \qquad (6)$$

Выбор отрицательного знака квадратного корня обусловлен полученным равенством $\sqrt{1/4+b}=l-1/2$. При положительном корне равенство невозможно.

Рассмотрим простейший случай $n_r=0$. Подставим (6) в уравнение (2), получим, после приведения подобных членов равенство нулю коэффициентов при степенях радиуса -1,-2,-3. Итого получим 3 уравнения. Имеется 3 неизвестных констант ε, b, c. Решая это уравнение получим $b=l(l-1),\varepsilon=-(1+\alpha)^2/2, c=l^4/(1+\alpha)^2$ волновую функцию в виде

$$\psi(r)=\exp(-r\sqrt{-2\varepsilon})(r+i\alpha)\exp(\frac{\sqrt{c}}{r+i\alpha})=$$
$$=\exp[-r(1+\alpha)](r+i\alpha)\exp[\frac{l^2}{(1+\alpha)(r+i\alpha)}].$$

Где реализована регуляризация волновой функции в сингулярности. Действительная часть функции $\frac{r}{r^2+\alpha^2}$ имеет максимум при условии $r=\alpha=\frac{m_e}{m_p}=\frac{r_p}{a_0}$, т.е. волновая функция имеет максимум, при радиусе, равном радиусу Бора протона $r_p=\frac{\hbar^2}{m_p e^2}$. При этом имеется правильное значение энергии. Потенциал ядра равен

$$u(R)=\frac{l^4 m_e e^4 a_0^4}{2R^4\hbar^2(1+\alpha)^2}-\frac{e^2(1+\alpha)}{R}+\frac{m_e e^4 a_0^2 l(l-1)}{2R^2\hbar^2}, a_0=\frac{\hbar^2}{m_e e^2}>>R, l\neq 0.$$

$$u(R)=\frac{m_e e^4 a_0^4}{2(1+\alpha)^2 R^4\hbar^2}-\frac{e^2(1+\alpha)}{R}+\frac{m_e e^4 a_0^2}{2R^2\hbar^2}, l=0.$$

Если при учете только потенциала электронов получаем собственную энергию электронов, то при учете ядерного потенциала получаем собственную энергию атома с учетом энергии ядра. При этом определился потенциал атома. Ядерный потенциал зависит от орбитального квантового числа. При большом радиусе волновая функция стремится к нулю. У волновой функции атома имеется другая зависимость от орбитального квантового числа, отличающаяся от волновой функции электронов. Кроме того, собственная энергия атома не зависит от орбитального квантового числа, а определяется радиальным квантовым числом. Этим ядро коренным образом отличается от электронов в атоме.

Радиус экстремума потенциальной энергии ядра в атоме определяется уравнением третьей степени и содержит три корня, два минимума и один максимума, или один минимум и два комплексных значения радиуса экстремума. Минимум потенциала, умноженного на квадрат волновой функции, приблизительно соответствуют радиусу Бора для электрона, а максимум радиусу Бора для протона.

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика Нерелятивистская теория т.III, Наука, М.,1969,768с.