10 Potencjały sferycznie symetryczne

10.1 Separacja zmiennych

Do tej pory omawialiśmy problemy jednowymiarowe, które służyły nam do ilustracji podstawowych zasad i metod rachunkowych mechaniki kwantowej. Jednakże dopiero rozwiązania trójwymiarowego równania Schrödingera możny porównywać z danymi doświadczalnymi. Dopiero na podstawie takich porównań można orzec o sukcesie mechaniki kwantowej w opisie mikroświata.

Na ogół problemy trójwymiarowe, z którymi stykamy się przy opisie realistycznych układów fizycznych, cechują się pewnymi symetriami, które ułatwią nam znalezienie rozwiązań równania Schrödingera. Rozpatrzmy najpierw ciągle jeszcze nieco akademicki przykład, a mianowicie ruch w *separowalnym* potencjale:

$$V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z), \tag{10.1}$$

gdzie funkcje V_i są niezależnymi potencjałami opisującymi odpowiednio ruch w kierunkach x, y i z. Mogą to być np. studnie potencjału lub potencjały harmoniczne. Dla takich potencjałów równanie Schrödingera daje się *rozseparować* na trzy równania jednowymiarowe. Rzeczywiścir, przyjmując, że funkcja falowa ma postać iloczynu

$$\psi(\vec{r}) = \psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z) \tag{10.2}$$

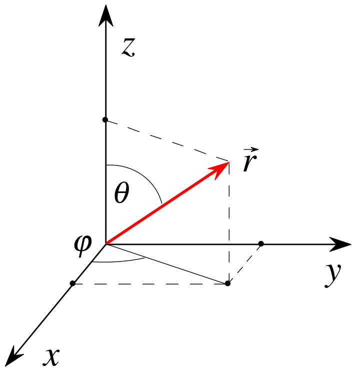
równanie Schrödingera przyjmuje postać:

$$\begin{aligned}
&\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) \\
= \quad & \psi_2(y)\psi_3(z)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right]\psi_1(x) \\
& +\psi_1(x)\psi_3(z)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right]\psi_2(y) \\
& +\psi_1(x)\psi_2(y)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right]\psi_3(z) \\
= \quad & E\,\psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z).
\end{aligned} \tag{10.3}$$

Już z postaci równania (10.3) widać, że pełne równanie Schrödingera jest sumą trzech równań, każde w innej zmiennej. Zwróćmy uwagę, że pochodne cząstkowe w równaniu (10.3) można zastąpić przez pełne pochodne, gdyż działają one na funkcję jednej zmiennej. Dzieląc stronami (10.3) przez $\psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z)$ otrzymujemy:

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{\psi_i(x_i)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + V_i(r_i)\right]\psi_i(r_i) = E, \tag{10.4}$$

gdzie $r_1 = x$, $r_2 = y$ i $r_3 = z$. A zatem stała E jest sumą trzech niezależnych funkcji, z których każda zależy od innej zmiennej. Jedynym rozwiązaniem takiego problemu jest



Rysunek 1: Definicje zmiennych we współrzędnych sferycznych (r, θ, φ)

przyjęcie, że każda z tych funkcji jest równa stałej, a suma tych stałych wynosi E:

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + V_i(r_i)\right]\psi_i(r_i) &= E_i\,\psi_i(r_i), \\ E_1 + E_2 + E_3 &= E. \end{aligned} \tag{10.5}$$

A zatem w przypadku potencjałów typu (10.1) problem sprowadza się do rozwiązania trzech jednowymiarowych równań Schrödingera.

Siły odpowiedzalne za istnienie atomów, to coulombowskie oddziaływanie jądra z elektronami (jeśli pominąć wzajemne odpychanie elektronów). Potencja coulombowski ma symetrię sferyczną, dlatego pierwszym krokiem do rozwiązania równania Schrödingera z potencjałem

$$V(\vec{r}) = V(r) \tag{10.6}$$

jest zapisanie operatora Laplace'a we współrzędnych sferycznych (r, θ, φ):

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{10.7}$$

W tych nowych zmiennych potencja (10.6) ma postać analogiczną do (10.1):

$$V(\vec{r}) = V(r) + V_\theta(\theta) + V_\varphi(\varphi) \tag{10.8}$$

przy czym potencjały $V_\theta(\theta)$ i $V_\varphi(\varphi)$ są tożsamościowo równe zeru. Zatem, aby rozwiązać równanie Schrödingera z potencjałem o symetrii sferycznej postąpimy podobnie jak w przypadku kartezjańskim, przy czym separację zmiennych przeprowadzimy w 2 krokach. Po pierwsze wyseparujemy zależność kątową:

$$\psi(\vec{r}) = u(r)\,Y(\theta, \varphi). \tag{10.9}$$

Wówczas równanie Schrödingera, po pomnożeniu przez r^2, daje się zapisać jako:

$$\begin{aligned} 0 &= Y(\theta,\varphi)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - r^2\left(E - V(r)\right)\right]u(r) \\ &\quad -u(r)\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)\,. \end{aligned} \tag{10.10}$$

Mnożąc stronami przez $2m/\hbar^2$ i dzieląc przez $u\,Y$ otrzymujemy dwa równania

$$\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi) = \lambda Y(\theta,\varphi), \tag{10.11}$$

$$\left[-\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - r^2\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right) + \lambda\right]u(r) = 0. \tag{10.12}$$

Równanie (10.11) definiuje operator $\hat{L}^2$, który, jak się później okaże, odpowiada operatorowi *momentu pędu* i stałą separacji λ, która jest zarazem wartością własną operatora $\hat{L}^2$. Spodziewamy się, mając na uwadze nasze poprzednie doświadczenie z równaniem Schrödingera w jednym wymiarze, że odpowiednio nałożone warunki brzegowe *wymuszą* kwantyzację zarówno λ jak i E.

10.2 Część kątowa równania Schrödingera

Zauważmy, że część kątowa nie zależy od potencjału $V(r)$ i w związku z tym jest identyczna dla wszystkich problemów o symetrii sferycznej. Operator $\hat{L}^2$ jest operatorem Sturma Lioville'a i dlatego rozwiązania problemu własnego (10.11) stanowią zupełny układ funkcji. Rozwiązania te znane są pod nazwą *funkcji kulistych* lub *harmonik sferycznych.* Dokładne wyprowadzenie szeregu własności tych funkcji można znaleźć w podręcznikach mechaniki kwantowej lub matematycznych metod fizyki; tu ograniczymy się do przypomnienia podstawowych wzorów, które będą użyteczne w dalszej części wykładu.

10.2.1 Zależność od kąta φ

Aby rozwiązać równanie (10.11) musimy przeprowadzić kolejną separację zmienych:

$$Y(\theta,\varphi) = P(\theta)\,\Phi(\varphi). \tag{10.13}$$

Wówczas równanie (10.11) separuje się na dwa niezależne równania:

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\Phi(\varphi) = -\nu\,\Phi(\varphi), \tag{10.14}$$

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) - \frac{\nu}{\sin^2\theta}\right]P(\theta) = -\lambda\,P(\theta), \tag{10.15}$$

gdzie ν jest nową stałą separacji. Rozwiązania równania (10.14) mają postać:

$$\begin{aligned}\Phi(\varphi) &= A\, e^{im\varphi} + B\, e^{-im\varphi}, \text{ dla } \nu = m^2 \neq 0, \\ \Phi(\varphi) &= A + B\,\varphi, \text{ dla } \nu = m^2 = 0. \end{aligned} \tag{10.16}$$

Aby funkcja Φ była *jednoznaczna* i *ciągła* na odcinku 2π, m musi być liczbą całkowitą, a w przypadku $m = 0$ stała $B = 0$. Stąd funkcje własne unormowane na odcinku od 0 do 2π przyjmują postać

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi}, \; m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \; . \tag{10.17}$$

Warto już w tym miejscu zauważyć, że funkcje Φ_m tworzą zupełny układ funkcji własnych na odcinku 0 do 2π:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi\; \Phi_m^*(\varphi)\Phi_n(\varphi) = \delta_{mn}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \Phi_n(\varphi)\Phi_n^*(\varphi') = \delta(\varphi - \varphi'). \tag{10.18}$$

10.2.2 Zależność od kąta θ

Aby rozwiązać równanie (10.15) dla dowolnego $\nu = m^2$, rozważymy przypadek z $m = 0$, a potem pokażemy jak z tego rozwiązania przez wielokrotne różniczkowanie wygenerować rozwiązanie dla dowolnego m. Najpierw jednak wprowadźmy nową zmienną

$$x = \cos\theta. \tag{10.19}$$

W zmiennej x równanie (10.15) przyjmuje postać

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1 - x^2\right)\frac{dP(x)}{dx}\right] + \left[\lambda - \frac{m^2}{1 - x^2}\right] P(x) = 0. \tag{10.20}$$

Warto zauważyć, że miara całkowania w zmiennych sferycznych przyjmuje postać

$$d^3\vec{r} = r^2 dr\, \sin\theta d\theta\, d\varphi = r^2 dr\, dx\, d\varphi.$$

Wielomiany Legendre'a. Choć dla interesujących nas przypadków fizycznych zmienna x zawarta jest w przedziale $-1 \leq x \leq 1$, to równanie (10.20) rozwiążemy przy pomocy technik z dziedziny funkcji zespolonych. Naszym podstawowym żądaniem będzie, aby rozwiązania w *obszarze fizycznym*, t.j. dla rzeczywistych z z odcinka $[-1, 1]$ nie miały żadnych osobliwości. Łatwo przekonać się, że dla $m = 0$ równanie (10.20)

$$\frac{d}{dz}\left[\left(1 - z^2\right)\frac{dP(z)}{dz}\right] + \lambda\, P(z) = 0 \tag{10.21}$$

ma regularne punkty osobliwe w punktach $z_0 = \pm 1$. Zatem zgodnie z teorią równań różniczkowych powinniśmy szukać rozwiązania w postaci szeregu potęgowego

$$P(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(z - z_0\right)^{n+\alpha}. \tag{10.22}$$

Podstawiając powyższy szereg do (10.21) znajdujemy, że

$$\alpha^2 = 0,$$

lub w ogólnym przypadku

$$\alpha^2 = m^2/4. \tag{10.23}$$

Oznacza to, że drugie rozwiązanie równania (10.21) zawiera $\ln(z - z_0)$, a zatem jest rozbieżne w z_0 i musimy go odrzucić. Podobnie dla $m \neq 0$ drugie rozwiązanie jest rozbieżne jak $1/(z - z_0)^{|m|/2}$.

Szereg (10.22) ma promień zbieżności 2, a zatem jeśli – dla ustalenia uwagi – $z_0 = 1$ – to rozwiązanie to byłoby rozbieżne w punkcie $z = -1$. Dlatego, aby uzyskać pełne rozwiązanie w interesującym nas obszarze fizycznym, musimy rozwiązanie to przedłużyć analitycznie do obszaru zawierającego punkt $z = -1$. Oznacza to, że w jakimś pośrednim punkcie, np. w $z = 0$, który leży w obszarze zbieżności rozwiązań wok $z_0 = 1$ i $z_0 = -1$, szereg (10.22) musimy przedstawić jako kombinację liniową rozwiązania typu (10.22) wokó $z_0 = -1$ oraz drugiego, liniowo niezależnego, rozwązania zawierającego $\ln(z + 1)$. A to oznacza, że rozwiązanie skończone wokó $z_0 = 1$ zostało przedłużone analitycznie w rozwiązanie nieskończone dla $z = -1$. Takie rozwiązanie musimy jednak odrzucić jako niefizyczne.

Jedynym wyjściem z tej sytuacji, podobnie jak to miało miejsce dla oscylatora harmonicznego, jest takie dobranie stałej λ, aby nieskończony szereg (10.22) urywa się dla pewnego $n_{\max}$. Wówczas nie mielibyśmy problemów ze zbieżnością szeregu, a otrzymany w ten sposób wielomian byłby dobrym rozwiązaniem w całym obszarze fizycznym.

W praktyce program ten realizuje się szukając rozwiązania w postaci szeregu (10.22) wokó $z_0 = 0$. Podstawiając (10.22) do równania (10.21) otrzymujemy formułę rekurencyjną

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - \lambda}{(n+1)(n+2)}\, a_n. \tag{10.24}$$

Widzimy, że rozwiązania wielomianowe otrzymuje się jedynie gdy

$$\lambda = l(l+1), \tag{10.25}$$

gdzie $l = 0, 1, 2, \ldots$.

Ponadto widać, że ze względu na rekurencję, która łączy co drugi wyraz szeregu (10.22), mamy dwa typy rozwiązań: parzyste i nieparzyste. Wyrazy a_0 i $a_1$dobieramy tak, aby otrzymane przez nas wielomiany były unormowane w następujący sposób

$$\int\limits_{-1}^{1} dx\, P_l(x) P_k(x) = \frac{2}{2l+1}\, \delta_{lk}. \tag{10.26}$$

Tak unormowane wielomiany ortogonalne na odcinku $[-1, 1]$ nazywamy *wielomianami Legendre'a*.

Podamy teraz wygodny wzór, który pozwala wyliczyć wielomian Legendre'a dowolnego stopnia:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l\, l!}\frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l. \tag{10.27}$$

Kilka najniższych wielomianów Legendre'a ma następującą postać:

$$P_0(x)=1,\ P_1(x)=x,\ P_2(x)=\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right),\ P_3(x)=\frac{1}{2}\left(5x^3-3x\right). \tag{10.28}$$

Warto zapamiętać, że wielomiany Legendre'a, dzięki przyjętej normalizacji (10.26) mają na brzegach przedziału fizycznego wartości 1 lub -1:

$$P_l(1)=1,\ P_l(-1)=(-1)^l \tag{10.29}$$

zgodnie z parzystością wielomianu.

Ponieważ wielomiany Legendre'a tworzą zupełny układ funkcji na odcinku $[-1,1]$, można za ich pomocą przedstawić operator jednostkowy:

$$\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, P_l(x)P_l(x') = \delta(x-x'). \tag{10.30}$$

Na koniec podamy jeszcze, podobnie jak to zrobiliśmy w przypadku wielomianów Hermite'a, funkcję tworzącą dla wielomianów Legendre'a:

$$F(u,x) = \frac{1}{\sqrt{1-2ux+u^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)\, u^l. \tag{10.31}$$

Aby udowodnić, że występujące w rozwinięciu (10.31) współczynniki $P_l(x)$ są rzeczywiście wielomianami Legendre'a, wystarczy wykazać, że są to wielomiany ortonormalne na odcinku $[-1,1]$ z normą zgodną z równaniem (10.26). W tym celu pomnóżmy dwie funkcje tworzące od różnych zmiennych i scałkujmy po dx:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} dx\, F(u,x)\, F(v,x) &= \int_{-1}^{1} dx\, \frac{1}{\sqrt{1-2ux+u^2}}\frac{1}{\sqrt{1-2vx+v^2}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{uv}}\left[\ln\left(1+\sqrt{uv}\right)-\ln\left(1-\sqrt{uv}\right)\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{uv}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k+1}\left[(-1)^k+1\right]\left(\sqrt{uv}\right)^{k+1} \\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2}{2l+1}\,(uv)^l,
\end{aligned} \tag{10.32}$$

gdzie w ostatnim wzorze podstawiliśmy $k=2l$. Z kolei, wyliczając tę samą całkę przy użyciu prawej strony wzoru (10.31) otrzymujemy

$$\int_{-1}^{1} dx\, F(u,x)\, F(v,x) = \sum_{l,k=0}^{\infty} u^l v^k \int_{-1}^{1} dx\, P_l(x)\, P_k(x). \tag{10.33}$$

Aby prawa strona (10.33) była równa prawej stronie (10.32) musi zachodzić równość (10.26). A zatem współczynniki $P_l(x)$ są rzeczywiście wielomianami Legendre'a.

Stowarzyszone wielomiany Legendre'a. Aby rozwiązać równanie (10.20) dla dowolnego, całkowitego m, zauważmy najpierw, że rozumowanie, które doprowadziło nas do wniosku, że rozwiązaniami dla przypadku $m = 0$ są wielomiany, a nie nieskończone szeregi pozostaje w mocy. A zatem będziemy szukać rozwiązania równania

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{dP(x)}{dx}\right]+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P(x)=0 \tag{10.34}$$

w postaci

$$P(x)=(1-x)^{|m|/2}(1+x)^{|m|/2}R(x)=(1-x^2)^{|m|/2}R(x), \tag{10.35}$$

gdzie zgodnie z równaniem (10.23) wyseparowaliśmy potęgę $(1-z_0)^\alpha$, natomiast $R(x)$ są wielomianami. Podstawiając (10.35) do równania (10.34) otrzymujemy równanie na $R(x)$:

$$\left(1-x^2\right)R''(x)-2(|m|+1)\,x\,R'(x)+\left[l\,(l+1)-|m|\,(|m|+1)\right]R(x)=0. \tag{10.36}$$

Przypomnijmy teraz równanie na wielomian Legendre'a stopnia l:

$$\left(1-x^2\right)P_l''(x)-2\,x\,P_l'(x)+l\,(l+1)\;P_l(x)=0. \tag{10.37}$$

Łatwo się przekonać, że różniczkując $|m|$-krotnie równanie (10.37) otrzymamy równanie (10.36), przy czym

$$R(x)=\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x). \tag{10.38}$$

Wielomiany $R(x)$ można wyliczyć korzystając z równania (10.27)

$$R(x)=\frac{1}{2^l\,l!}\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}\left(x^2-1\right)^l. \tag{10.39}$$

Zauważmy, że najwyższa potęga x rozwinięciu wyrażenia $(1-x^2)^l$ wynosi x^{2l}. Zatem każde różniczkowanie dwumianu $(1-x^2)^l$ powyżej $2l$-tego daje zero. Wynika stąd, że:

$$|m|\leq l, \tag{10.40}$$

czyli, że dla danego l, m może przyjmować $2l+1$wartości:

$$m=-l,-l+1,\ldots,0,\ldots,l-1,l. \tag{10.41}$$

Pełne rozwiązania równania (10.34) nazywamy *stowarzyszonymi wielomianami Legendre'a* (choć tak na prawdę dla nieparzystych m zawierają one pierwiastek z $(1-x^2)$) i oznaczamy jako $P_l^{|m|}(x)$:

$$P_l^{|m|}(x)=\frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^l\,l!}\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}\left(x^2-1\right)^l. \tag{10.42}$$

Funkcje te są są znormalizowane w następujący sposób

$$\int\limits_{-1}^{1}dx\,\left[P_l^{|m|}(x)\right]^2=\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\frac{2}{2l+1}. \tag{10.43}$$

10.2.3 Funkcje kuliste

Spróbujmy podsumować naszą dotychczasową dyskusję dotyczącą zależności kątowej rozwiązań równania Schrödingera z potencjałem o symetrii sferycznej. Rozwiązaniami równania (10.11) są funkcje $Y_l^m(\theta,\varphi)$ przyjmujące postać:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \epsilon_m \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \tag{10.44}$$

gdzie faza $\epsilon_m = (-)^m$ dla $m > 0$ i $\epsilon_m = 1$ dla $m \leq 0$. Warto wspomnieć, że istnieją w literaturze inne wybory faz funkcji kulistych (np. Landau, Lifszyc).

Jednak najważniejszym wynikiem naszej dotychczasowej dyskusji jest nie tyle wzór (10.44), co zakres zmienności indeksów l i m dany przez równania (**??**) i (10.41):

$$l = 0, 1, 2, \ldots, \qquad m = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l.$$

Oznacza to, że wartości własne operatora momentu pędu są skwantowane, podobnie jak wartości własne $\hat{L}_z$, których spektrum jest ograniczone przez relację (10.40). Funkcje kuliste, będące funkcjami własnymi $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ układają się w *multiplety* o określonym l. Podajmy przykładowo kilka pierwszych funkcji kulistych:

$$\begin{array}{ll}
l = 0 & Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\[2ex]
l = 1 & \left\{ \begin{array}{l} Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \\ Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{\pm i\varphi}, \end{array} \right. \\[2ex]
l = 2 & \left\{ \begin{array}{l} Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(3\cos^2\theta - 1\right), \\ Y_2^{\pm 1} = \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \, \cos\theta \, e^{\pm i\varphi}, \\ Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \; e^{\pm 2i\varphi}. \end{array} \right.
\end{array} \tag{10.45}$$

10.3 Część radialna równania Schrödingera

Radialne równanie Schrödingera (10.12), po zdiagonalizowaniu $\hat{L}^2$przyjmuje postać

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(V(r) - E \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0. \tag{10.46}$$

Warto go przepisać podstawiając za $u(r) = \chi(r)/r$. W tym celu wyliczmy

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{\chi}{r} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\chi' - \chi \right) = \frac{1}{r} \chi'', \tag{10.47}$$

gdzie w ostatnim kroku skasował się człon zawierający pierwszą pochodną χ. Ostatecznie, po przemnożeniu przez $\hbar^2/2m$ równanie radialne przyjmuje postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = E\, \chi(r). \tag{10.48}$$

Zatem ruch radialny przypomina ruch jednowymiarowy w zmodyfikowanym potencjale

$$V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}. \tag{10.49}$$

Człon proporcjonalny do $l(l+1)$ nazywa się *barierą centryfugalną*. Znika ona tylko dla stanów o zerowym momencie pędu.

Kształt radialnej funkcji falowej i wartości energii E zależą od konkretnego potencjału i będą omówione w jednym z następnych rozdziałów.