Emil Navrátil

Výpočet vlnových funkcí pro některé typy optických potenciálů

Aplikace matematiky, Vol. 8 (1963), No. 1, 64--68

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/102838

VÝPOČET VLNOVÝCH FUNKCÍ PRO NĚKTERÉ TYPY OPTICKÝCH POTENCIÁLŮ

EMIL NAVRÁTIL

(Došlo dne 9. února 1962.)

V práci je řešena Schrödingerova rovnice se zvláštním tvarem sféricky symetrického potenciálu se spin-orbitální vazbou ve tvaru $\mathbf{U} = \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{l})$, který může být použit k výpočtu modelu atomového jádra.

I. ÚVOD

Při studiu mnohých fyzikálních problémů je zapotřebí řešit Schrödingerovu rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + U(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

při nějakém známém potenciálu $U(\boldsymbol{r})$. Přitom $\psi(\boldsymbol{r})$ je vlnová funkce (komplexní funkce tří reálných proměnných), která s hlediska kvantové mechaniky plně určuje stav částice, M a E jsou hmota a energie uvažované částice, $\hbar$ je Planckova konstanta a Δ Laplaceův operátor. Řešení $\psi(\boldsymbol{r})$ musí být funkce spojitá, omezená a kvadraticky integrabilní přes celý prostor. Bereme-li do úvahy existenci spinu částice (viz např. [1]), je vlnová funkce chápána jako dvoukomponentový spinor $\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix}\psi_1(\boldsymbol{r})\\ \psi_2(\boldsymbol{r})\end{pmatrix}$ a $\mathbf{U}(\boldsymbol{r})$ je matice 2. řádu. Potom musí být obě složky $\psi_1(\boldsymbol{r})$ a $\psi_2(\boldsymbol{r})$ funkce spojité, omezené a kvadraticky integrabilní přes celý prostor.

Vlnové funkce vypočtené v této práci mají sloužit k výpočtu modelu atomového jádra. K tomu bylo třeba zvolit potenciál $\mathbf{U}(\boldsymbol{r})$ (závislý na několika parametrech) tak, aby řešení $\psi(\boldsymbol{r})$ rovnice (1) se dalo jednoduše vyjádřit a aby netriviálním způsobem záviselo aspoň na dvou nezávislých parametrech potenciálu $\mathbf{U}(\boldsymbol{r})$. Z těchto jakož i z dalších fyzikálních důvodů byl potenciál $\mathbf{U}(\boldsymbol{r})$ zvolen ve tvaru

$$\mathbf{U}(\boldsymbol{r}) = \tfrac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{l}), \tag{2}$$

kde $\frac{1}{2}\hbar\,\boldsymbol{\sigma}$ je operátor spinu částice, $\hbar\boldsymbol{l}$ je operátor orbitálního momentu částice, α, β_1, β_2, q jsou konstanty.

II. VÝPOČET VLNOVÝCH FUNKCÍ

S tvarem potenciálu (2) Schrödingerova rovnice zní

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{l})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) . \tag{3}$$

Z fyzikálních důvodů lze psát [1], (63.13)

$$(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{l})\,\psi = [j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\,\psi , \tag{4}$$

kde j a l jsou kvantová čísla úplného a orbitálního momentu částice, pro něž platí buď $j = l + \frac{1}{2}$ nebo $j = l - \frac{1}{2}$.

Řešení rovnice (3) budeme hledat ve tvaru

$$\psi = R(r)\,\Theta(\vartheta, \varphi) , \tag{5}$$

odkud vzhledem k (4) plyne pro úhlovou část vlnové funkce

$$\frac{\hbar^2}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial\Theta}{\partial\vartheta}\right) + \frac{\hbar^2}{\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2\Theta}{\partial\varphi^2} + 2M\mu\Theta = 0 ,$$

což je známá rovnice pro kulové funkce. Aby $\Theta(\vartheta, \varphi)$ bylo jednoznačnou funkcí, musí být

$$2M\mu = \hbar l\,(l+1) . \tag{6}$$

Vzhledem k uvažování existence spinu je Θ rovno zobecněné kulové funkci Ω, pro níž platí [2]:

$$\Omega_{j,l,m_j}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\,\boldsymbol{\gamma} Y_l^m(\vartheta, \varphi) + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\,\boldsymbol{\delta} Y_l^{m+1}(\vartheta, \varphi) \quad \text{pro} \quad j = l + \tfrac{1}{2} \quad \text{a} \tag{7}$$

$$\Omega_{j,l,m_j}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\,\boldsymbol{\gamma} Y_l^m(\vartheta, \varphi) - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\,\boldsymbol{\delta} Y_l^{m+1}(\vartheta, \varphi) \quad \text{pro} \quad j = l - \tfrac{1}{2} ,$$

kde $m = m_j - \frac{1}{2}$, $\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ a $\boldsymbol{\delta} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$, m_j je kvantové číslo z-složky úplného momentu impulsu. Z rovnic (3), (4), (5), (6) plyne pro radiální část vlnové funkce

$$\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \left\{2M(E - \beta_1[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]) - M\alpha r^2 - \right.$$
$$\left. - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} - 2M\beta_2 r^q[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\right\} R = 0 . \tag{8}$$

1) q = 0.

Položme

(9)
$$E' = E - \beta_1[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}],$$
$$\frac{2M}{\hbar^2}E' = a, \quad \frac{M\alpha}{\hbar^2} = b.$$

Konstantu β_2 lze zřejmě vypustit (dá se zahrnout pod β_1). Rovnice (8) pak nabude tvaru
$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[a - br^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0.$$

Po provedení substituce $Ar^2 = \xi$ obdržíme
$$4A\xi\frac{d^2R}{d\xi^2} + 6A\frac{dR}{d\xi} + \left[a - \frac{b}{A}\xi - \frac{l(l+1)A}{\xi}\right]R = 0,$$

kam dále klademe

(10)
$$R = \xi^{l/2}e^{-(\sqrt{b}/2A)\xi}w(\xi)$$

a $A = \sqrt{b}$. Po úpravě obdržíme degenerovanou hypergeometrickou rovnici
$$\xi w''(\xi) + [\tfrac{1}{2}(2l+3) - \xi]\,w'(\xi) + \frac{1}{4\sqrt{b}}[a - (2l+3)\sqrt{b}]\,w(\xi) = 0.$$

Její obecné řešení je

(11)
$$w(\xi) = C_1F(\alpha_1, \gamma_1, \xi) + C_2F(1 + \alpha_1 - \gamma_1, 2 - \gamma_1, \xi) \,.\, \xi^{1-\gamma_1},$$

kde
$$\alpha_1 = \frac{1}{4\sqrt{b}}[(2l+3)\sqrt{b} - a], \quad \gamma_1 = \tfrac{1}{2}(2l+3).$$

Z podmínky konečnosti vlnové funkce v počátku plyne $C_2 = 0$. Ke splnění podmínky kvadratické integrability je nutné, aby

(12)
$$\alpha_1 = -n,$$

kde n je přirozené číslo nebo nula. Potom je (viz např. [3], str. 264)

(13)
$$F(-n, \gamma_1 + 1, \xi) = \frac{n!}{(\gamma_1+1)(\gamma_1+2)\ldots(\gamma_1+n)}L_n^{\gamma_1}(\xi).$$

Ze vztahů (10), (11), (12), (13) obdržíme

(14)
$$R_{n,l}(\xi) = C_{n,l} \,.\, \xi^{l/2}e^{-\xi/2}L_n^{l+1/2}(\xi),$$

kde
$$\xi = \sqrt{b}r^2.$$

Podmínka (12) dává

$$E'_{n,l} = \hbar \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{M}} \left[2n + l + \tfrac{3}{2}\right]. \tag{15}$$

Obrátíme se nyní k jiným možným volbám parametru q. Aby zůstal zachován tvar rovnice (8), je zřejmé, že je nutno volit $q = \pm 2$.

2) $q = 2$.

Rovnice (8) nabude tvaru formálně stejného jako v případě $q = 0$, kde však nyní

$$a = \frac{2M}{\hbar^2}(E - \beta_1 l), \qquad b = \frac{M}{\hbar^2}(\alpha + 2\beta_2 l) \qquad \text{pro} \quad j = l + \tfrac{1}{2};$$

$$a = \frac{2M}{\hbar^2}(E + \beta_1(l + 1)), \quad b = \frac{M}{\hbar^2}(\alpha - 2\beta_2(l + 1)) \quad \text{pro} \quad j = l - \tfrac{1}{2}.$$

Vlnové funkce jsou proto téměř úplně shodné s funkcemi (14), až na rozdíl v hodnotě parametru b. Pro energii E' dostáváme stejný výraz jako (15).

3) $q = -2$.

Rovnice (8) přejde na tvar

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left\{\frac{2M}{\hbar^2}(E - \beta_1[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]) - \frac{M\alpha}{\hbar^2} r^2 - \right.$$
$$\left. - \left[l(l+1) + \frac{2M}{\hbar^2}\beta_2[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\right]\frac{1}{r^2}\right\} R = 0.$$

Obdobným postupem jako v případě $q = 0$ při $c > 0$ obdržíme řešení ve tvaru

$$R(r) = C_{n,l}\xi^{(-1+\sqrt{1+4c})/4} e^{-\xi/2} L_n^{\sqrt{1+4c}/2}(\xi), \tag{16}$$

kde

$$\xi = \sqrt{b} r^2, \quad b = \frac{M}{\hbar^2}\alpha,$$

$$c = l(l+1) + \frac{2M}{\hbar^2}\beta_2[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}].$$

III. ZÁVĚR

Vypočtené vlnové funkce, dané vztahy (5), (7), (14), jsou závislé jak v případě $q = 0$ tak i v případě $q = 2$ pouze na jednom parametru b. Rozdíl je však v tom, že pro $q = 2$ závisí parametr b na kvantovém čísle l, takže lineární kombinace vlnových funkcí $\sum_l c_l \psi_l$ závisí netriviálním způsobem na dvou parametrech α a β_2. Nelze tedy pouze na základě úvah v této práci rozhodnout, zda volba $q = 2$ poskytuje výhodnější vlnové funkce pro výpočet modelu atomového jádra, než volba $q = 0$.

Vlnové funkce (16) jsou sice závislé na dvou parametrech b a c, avšak vzhledem k tomu, že mají sloužit jako náhodně zvolené výchozí funkce k výpočtu na samočinných počítacích strojích, nejsou pro svůj dosti složitý tvar pro další výpočty vhodné. (Parametr c se vyskytuje i v indexu Laguerrových polynomů). Zdá se proto nejpřirozenější použít k výpočtu modelu funkce pro $q = 0$, případně pro $q = 2$.

Závěrem děkuji s. doc. I. ÚLEHLOVI za připomínky k této práci.

Literatura

[1] *Blochincev D. I.:* Základy kvantové mechaniky NČSAV, Praha 1956.

[2] *Mayer M. G., Jensen J. H. D.:* Elementary Theory of Nuclear Shell Structure, John Wiley & Sons, New York 1955.

[3] *Lebeděv N. N.:* Speciální funkce a jejich použití, SNTL, Praha 1956.

Резюме

ВЫЧИСЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ТИПОВ ОПТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ

ЭМИЛ НАВРАТИЛ (Emil Navrátil)

В работе решается уравнение Шредингера со специальным сферически симметричным потенциалом, содержащим спин-орбитальную связь, вида $U = \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\sigma, l)$, который используется для расчета модели атомного ядра.

Summary

WAVE FUNCTION EVALUATION FOR SEVERAL TYPES OF OPTICAL POTENTIALS

EMIL NAVRÁTIL

In the paper, Schrödinger's equation with a special form of spherically symmetrical potential containing a spin-orbital bond is solved. The potential is expressed as $U = \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^2)(\sigma, l)$ and it may be used for the evaluation a model of an atomic nucleus.

Adresa autora: Inž. *Emil Navrátil,* FTJF, Myslíkova 7, Praha 1.