

# Aplikace matematiky

---

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>

## Terms of use:

© Institute of Mathematics AS CR, 1963

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

## 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  $\mathbf{U} = \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{l})$ , který může být použit k výpočtu modelu atomového jádra.

### I. ÚVOD

Při studiu mnohých fyzikálních problémů je zapotřebí řešit Schrödingerovu rovnici

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

při nějakém známém potenciálu  $U(\mathbf{r})$ . Přitom  $\psi(\mathbf{r})$  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  $\Delta$  Laplaceův operátor. Řešení  $\psi(\mathbf{r})$  musí být funkce spojitá, omezená a kvadraticky integrovaná přes celý prostor. Bereme-li do úvahy existenci spinu částice (viz např. [1]), je vlnová funkce chápána jako dvoukomponentový spinor  $\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$  a  $\mathbf{U}(\mathbf{r})$  je matice 2. řádu. Potom musí být obě složky  $\psi_1(\mathbf{r})$  a  $\psi_2(\mathbf{r})$  funkce spojité, omezené a kvadraticky integrovaná přes celý prostor.

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

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

kde  $\frac{1}{2}\hbar \boldsymbol{\sigma}$  je operátor spinu částice,  $\hbar \mathbf{l}$  je operátor orbitálního momentu částice,  $\alpha, \beta_1, \beta_2, q$  jsou konstanty.

## II. VÝPOČET VLNOVÝCH FUNKCÍ

S tvarem potenciálu (2) Schrödingerova rovnice zní

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

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

$$(4) \quad (\sigma, \mathbf{l}) \psi = [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \psi,$$

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

$$(5) \quad \psi = R(r) \Theta(\vartheta, \varphi),$$

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

$$(6) \quad 2M\mu = \hbar l(l+1).$$

Vzhledem k uvažování existence spinu je  $\Theta$  rovno zobecněné kulové funkci  $\Omega$ , pro níž platí [2]:

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

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

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

1)  $q = 0$ .

Poležme

$$(9) \quad E' = E - \beta_1 [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}],$$

$$\frac{2M}{\hbar^2} E' = a, \quad \frac{M\alpha}{\hbar^2} = b.$$

Konstantu  $\beta_2$  lze zřejmě vypustit (dá se zahrnout pod  $\beta_1$ ). Rovnice (8) pak nabude tvaru

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ a - br^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0.$$

Po provedení substituce  $Ar^2 = \xi$  obdržíme

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

kam dále klademe

$$(10) \quad R = \xi^{1/2} e^{-(\sqrt{b}/2A)\xi} w(\xi)$$

a  $A = \sqrt{b}$ . Po úpravě obdržíme degenerovanou hypergeometrickou rovnici

$$\xi w''(\xi) + \left[ \frac{1}{2}(2l+3) - \xi \right] w'(\xi) + \frac{1}{4\sqrt{b}} [a - (2l+3)\sqrt{b}] w(\xi) = 0.$$

Její obecné řešení je

$$(11) \quad w(\xi) = C_1 F(\alpha_1, \gamma_1, \xi) + C_2 F(1 + \alpha_1 - \gamma_1, 2 - \gamma_1, \xi) \cdot \xi^{1-\gamma_1},$$

kde

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

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

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

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

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

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

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

kde

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

Podmínka (12) dává

$$(15) \quad E'_{n,l} = \hbar \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{M}} [2n + l + \frac{3}{2}].$$

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

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

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

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

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

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

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

kde

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

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

### 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  $\alpha$  a  $\beta_2$ . 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 počítačích strojích, nejsou pro svůj dosti složitý tvar pro další výpočty vhodné. (Parametr  $c$  se vyskytuje i v indexu Laguerrových polynomů). Zdá se proto nejpříro-zenější 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  $U = \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\sigma, \mathbf{l})$ , 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  $U = \frac{1}{2}\alpha r^2 + (\beta_1 + \beta_2 r^q)(\sigma, \mathbf{l})$  and it may be used for the evaluation a model of an atomic nucleus.

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