

# Úloha 3: Izotopické varianty molekuly vodíku

Termín odevzdání: 14. dubna

Uvažujte systém složený ze dvou částic, jejichž interakce je popsána Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|), \quad (1)$$

kde

$$V(r) = D [e^{-\alpha(r-r_0)} - 1]^2 \quad (2)$$

je Morseho potenciál a  $D$ ,  $\alpha$  a  $r_0$  jsou kladné reálné konstanty. V Hamiltoniánu provedeme obvyklou transformaci souřadnic, takže dojde k separaci těžištvých a relativních stupňů volnosti

$$\hat{H} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r), \quad (3)$$

kde  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  je relativní poloha obou částic a  $\mu$  redukovaná hmotnost. Soustředíme se jen na řešení pro relativní pohyb, tj. nebudeme uvažovat první člen v rovnici výše. Potenciál navíc aproximujeme prvním nenulovým členem Taylorova rozvoje kolem bodu  $r = r_0$ , takže

$$\hat{H}_{\text{rel}} = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + D\alpha^2(r - r_0)^2. \quad (4)$$

Předpokládáme-li řešení ve tvaru  $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r}\chi(r)Y_{lm}(\vec{r}/r)$ , dostaneme obvyklou radiální rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi''(r) + \left[ D\alpha^2(r - r_0)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] \chi(r) = E\chi(r). \quad (5)$$

Uvažujme člen úměrný  $l(l+1)$  jako malou poruchu (to je možné pro dost velké  $\mu$  a  $r_0$ ), potom řešení v nultém řádu poruchové teorie budou stejná, jako řešení  $\phi_n(r - r_0)$  pro lineární harmonický oscilátor s frekvencí  $\omega = \alpha\sqrt{2D/\mu}$ . Energie základního stavu se v prvním řádu poruchové teorie rozštěpí na

$$E_{0l} = \frac{1}{2}\hbar\omega + Bl(l+1), \quad (6)$$

kde  $B = \langle \phi_0 | \hbar^2/2\mu r^2 | \phi_0 \rangle$ .

Výše uvedený přístup neuvažuje spinové stupně volnosti částic a jejich případnou nerozlišitelnost. Zamyslete se co je třeba upravit a odpovězte na následující otázky (stačí když napíšete funkci  $\psi(\vec{r})$  s přidanou spinovou částí a budete diskutovat její symetrii):

1. Jaká bude degenerace hladin  $E_{0l}$  pokud Hamiltonián popisuje molekulu vodíku, tj. zmíněné částice jsou protony (dva nerozlišitelné fermiony se spinem  $1/2$ ). (3body)
2. Totéž pro molekulu  $D_2$ , tj. částice jsou deuterony (dva nerozlišitelné bosony se spinem 1). (3body)
3. Totéž pro molekulu  $HD$ , tj. částice jsou proton a deutron. (3body)
4. Pokud konstanty v rovnici (6) jsou určeny pro molekulu vodíku, určete jak se tyto konstanty změní pro molekuly  $HD$  a  $D_2$  (pro jednoduchost předpokládejte, že deutron je přesně 2x těžší než proton). (1bod)