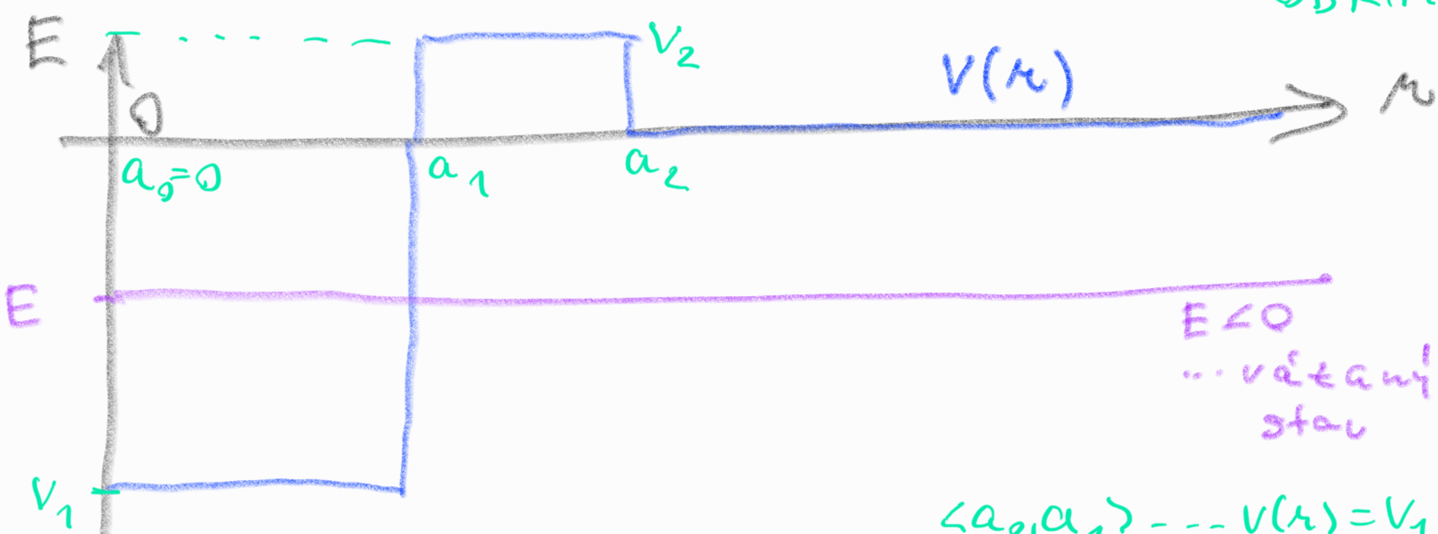
$\boxed{\text{QMI - cv10}}$ Sférický symetrický problém

$\boxed{\text{ÚLOHA 1}}$ Sféricky symetrická potenciálová jáma

OPAKOVÁNÍ: $\psi(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

po částech konstantní potenciál (OBECNÝ OBRÁZEK)



úseky s konst. potenciálem: $\langle a_0, a_1\rangle \dots V(r)=V_1$

$\langle a_1, a_2\rangle \dots V(r)=V_2$

$\langle a_2, \infty) \dots V(r)=0$

řešení na ∀ úseku závisí na lok. kinet. energii

$T_n = E - V_n$ pro $T_n=-\infty \dots R(r)=0$

$\boxed{T_n>0}$: $T_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ → řešení $R(r) = A_n j_l(k_n r) + B_n n_l(k_n r)$

pro $\boxed{T_n<0}$: $T_n = -\frac{\hbar^2 \varkappa_n^2}{2m}$ → řešení s $k_n = i\varkappa_n$

určení konstant:

$r \in$	$(0,a_1)$	(a_1,a_2)	(a_2,∞)
	$A_1, \cancel{B_1}$	A_2, B_2	A_3, B_3

① OKRAJ. PODMÍNKA: $rR_l(r) \xrightarrow[r\to 0]{} 0$ ⇒ $B_1=0$

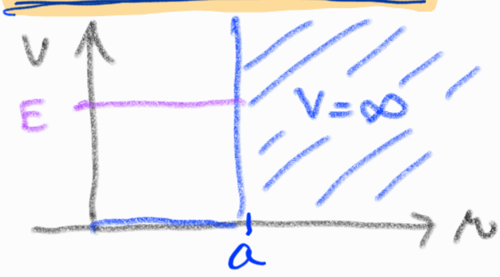
+ 2 podm.

1 podm.

asympt. chování $R_l(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$ ③

② spojitost fce a derivace — 2 podmínky

$\boxed{\text{Řešení úlohy 1}}$ začneme poslední částí .. $\boxed{\text{jámou } \infty \text{ hlubokou}}$



- řešení v oblasti s ∞ potenciálem:

  $R_{nl}(r)=0$

- řešení v oblasti $r\in\langle 0,a\rangle$:

  BÚNO: $V=0$ .. def k: $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

potom, jak víme z přednášky řešení radiální (SR) je $j_l(kr)$ ($n_l(kr)$ nesplňuje okrajovou podmínku v počátku)

- navíc musí být $R_{nl}(r)$ spojitá v $r=a$ tj $R_{nl}(a)=0$

to je podmínka na možné hodnoty k: $j_l(ka)=0$

je potřeba znát kořeny sférické Besselovy fce .. $j_l(z_n)=0$

... označíme $z_n^{(l)}$ .. n-tý kořen, kde $n=0,1,2,3,\dots$, ale kořen $z_0^{(l)}=0$ musíme ignorovat, neboť dá $k=0$; tj $R(r)=0$

potom $j_l(ka)=0$ pro $k_n^l=\frac{z_n^{(l)}}{a}$ a energie váz. stavů jsou

$$E_n^{(l)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{(\hbar z_n^{(l)})^2}{2ma^2}$$

$\boxed{\text{ZÁVĚR}}$ $\boxed{\text{pro } l=0}$ .. $j_l(z)=\frac{\sin z}{z}$ .. tj $z_n=\pi n\to k_n=\frac{\pi n}{a}$

tj $\psi_{nlm}=N\frac{1}{r}\sin k_n r$ ... kde konst N určíme z normalizace

$$\int|\psi|^2r^2\,d\Omega\,dr=4\pi|N|^2\underbrace{\int_0^a\sin^2k_nr\,dr}_{a/2}=2\pi a|N|^2\to N=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$$

tj $\boxed{\psi_{n00}=\begin{cases}0 & r>a\\ \frac{\sin k_nr}{r\sqrt{2\pi a}} & r<a\end{cases}}$ $\boxed{E_n^{(0)}=\left(\frac{\hbar\pi n}{a}\right)^2\frac{1}{2m}}$

$\boxed{\text{pro } l>0}$ ... neexistuje analytický vzorec ani pro $z_n^{(l)}$, ani se nedá integrovat normovací konstanta → NUMERICKY

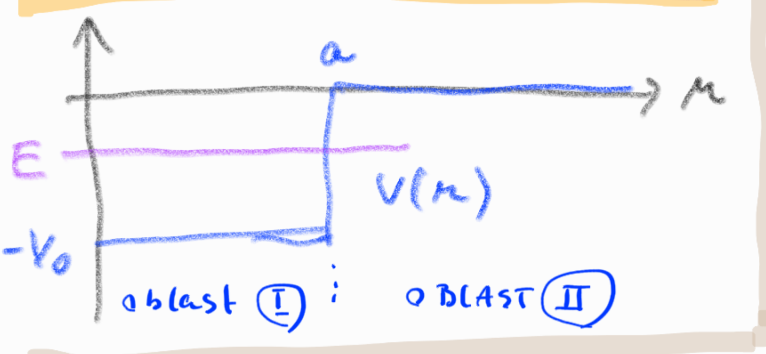
$\to$ $\boxed{\psi_{nlm}=\begin{cases}0 & r>a\\ N\,j_l(k_n^{(l)}r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) & r<a\end{cases}}$ $\boxed{E_n^{(l)}=\left(\frac{\hbar z_n^{(l)}}{a}\right)^2\frac{1}{2m}}$

$j_l(z_n^l)=0$

a

$\int|R_{nl}|^2r^2\,d\Omega\,dr=1$

konečně hluboká jáma



vázané stavy $E<0$

oblast (I): $E+V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

+ okraj. podm. $R_{nl}(r)\cdot r \xrightarrow[r\to 0]{} 0$

$\Rightarrow R_{nl} = A\, j_l(kr)$

tj $\boxed{\frac{2mV_0}{\hbar^2} = k^2+\kappa^2}$

Oblast II: $0 > E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$

$k = i\kappa$

... $R_{nl} = \alpha\, j_l(i\kappa r) + \beta\, n_l(i\kappa r)$

okraj. podm. $R_{nl}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$ kvadratická integrabilita

přitom $j_l(z) \xrightarrow[z\to\infty]{} \frac{1}{z}\sin\left(z-\frac{\pi}{2}l\right)$ $\quad n_l(z) \xrightarrow[z\to\infty]{} -\frac{1}{z}\cos\left(z-\frac{\pi}{2}l\right)$

$\Rightarrow h_l^{(+)}(z) \equiv j_l(z) + i\,n_l(z) \longrightarrow -\frac{i}{z}\left[\cos\left(z-\frac{\pi}{2}l\right) + i\sin\left(z-\frac{\pi}{2}l\right)\right]$

tj $h_l^{(+)}(i\kappa r) \longrightarrow -\frac{1}{\kappa r}\, e^{-\frac{\pi}{2}l}\, e^{-\kappa r} \longrightarrow 0_{r\to\infty}$

je tedy potřeba užít $\beta = i\alpha$

tedy:

$$R_{nl} = \begin{cases} A\, j_l(kr) & \boxed{r<a} \\ \alpha\left[j_l(i\kappa r) + i\,n_l(i\kappa r)\right] = \alpha\, h_l^{(+)}(i\kappa r) & \boxed{r>a} \end{cases}$$

podmínka na spojitost R_{nl} a R'_{nl} určí α a κ a tedy i energii. Konstantu A je třeba určit z norm. podm.

$\boxed{\text{podmínka na existenci s-stavů}}$:

Spojitost R a R' spojíme dohromady tak, že budeme napojovat "logaritmickou derivaci" $(\ln R)' = \frac{R'}{R}$; tj

(to má tu výhodu, že se zkrátí α a A a dostaneme přímo podmínku na κ tj. na energii):

$$\frac{R'}{R}\Big|_{r\to a-} = \frac{k\, j_l'(ka)}{j_l(ka)} = \frac{i\kappa\, h_l^{(+)\prime}(i\kappa a)}{h_l^{(+)}(i\kappa a)} \equiv \frac{R'}{R}\Big|_{r\to a+} \qquad (*)$$

speciálně pro $\boxed{l=0}$ $\quad j_0(z) = \frac{1}{z}\sin z \quad n_0(z) = -\frac{1}{z}\cos z$

$$h_0^{(+)}(z) = j_0(z) + i\,n_0(z) = -\frac{i}{z}(\cos z + i\sin z) = -\frac{i}{z}e^{+iz}$$

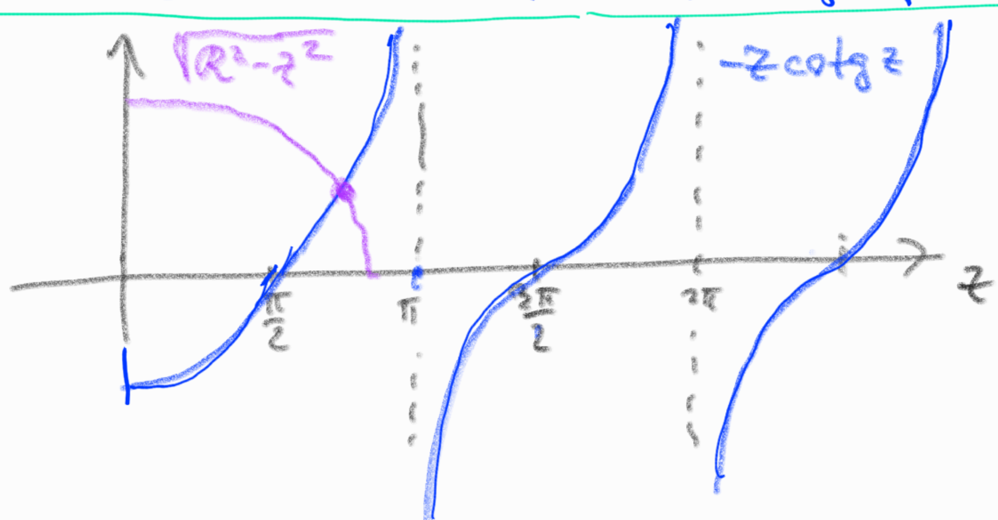
zjednodušení .. rozmyslete, že napojování ln-derivace (*) se nezmění když R přenásobím hladkou fcí – v našem případě $f(r) = r$

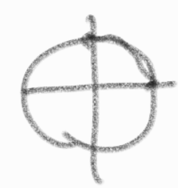
tj místo $j_0(kr)$ a $h_0(kr)$ budu napojovat $\hat{j}_0(kr) = \sin kr$ a $\hat{h}_0(kr) = (-i)e^{-\varkappa r}$

tj $$\frac{k\cos ka}{\sin ka} = -\varkappa \frac{e^{-\varkappa a}}{e^{-\varkappa a}} = -\varkappa$$ .. def $z = ak$

$$-z\cot z = \varkappa a = \sqrt{R^2 - z^2}$$ kde podle rovnice ○ výše je $z^2 + (\varkappa a)^2 = R^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$

všimněte si, že tato rovnice je totožná rovnici, kterou jsme dostali v 1D pro lichá řešení (viz cvičení 7 – řešíme graficky stejně





$\boxed{\text{závěr}}$ • pro $R = \sqrt{2mV_0}\,\frac{a}{\hbar} < \frac{\pi}{2}$ .. neexistuje žádný vázaný stav

tj $$\boxed{V_0 < \left(\frac{\pi\hbar}{2a}\right)^2 \frac{1}{2m}}$$

- pro $V_0 > \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{2a}\right)^2$ ∃ alesp jeden s-stav (vázaný)
- pro $V_0 > \frac{1}{2m}\left(\frac{3\pi\hbar}{2a}\right)^2 \frac{1}{2m}$ ∃ alesp. dva s-stavy
- pro $V_0 > \frac{1}{2m}\left(\frac{(2n-1)\pi\hbar}{2a}\right)\frac{1}{2m}$ ∃ alesp. n vázaných s-stavů

pro $l=1$ budeme napojovat spojitou fci $(kr)^2 R$ a její deriv.

tj $\boxed{r<a}$ $(kr)^2 R_{nl} = (kr)^2 j_1(kr) = \sin kr - kr\cos kr$

$\boxed{r>a}$ $(kr)^2 R_{nl} = -i\varkappa^2 r^2 h_1^{(+)}(i\varkappa r) = -\varkappa^2 r^2 \left(\underset{\frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}}{j_1} + i\, \underset{-\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}}{n_1}\right)$

$$= -\varkappa^2 r^2 \left[\frac{1}{z^2}(\sin z - i\cos z) - \frac{1}{z}(\cos z + i\sin z)\right]$$

$$= e^{-\varkappa r}\left[-i - i\varkappa r\right] = -i(1+\varkappa r)e^{-\varkappa r}$$

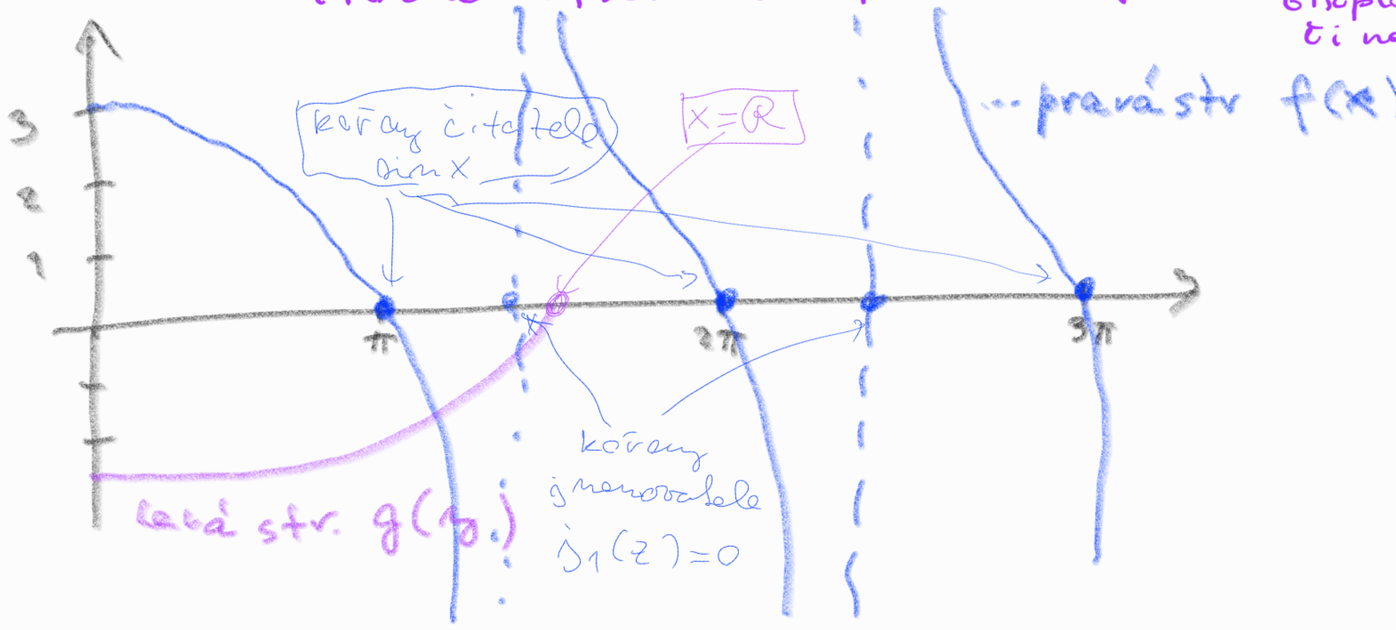
napojovací podm.: $$\frac{(\sin kr - kr\cos kr)'}{(\sin ka - ka\cos ka)} = \frac{\left[(1+\varkappa r)e^{-\varkappa r}\right]'}{(1+\varkappa a)e^{-\varkappa a}}$$

tj. $$\frac{k^2 a \sin ka \cdot a}{(\sin ka - ka\cos ka)} = \frac{(\varkappa - \varkappa - \varkappa^2 a)\cdot a}{1+\varkappa a} = -\frac{\varkappa^2 a \cdot a}{1+\varkappa a}$$

rovnice tvaru $\quad f(x) = g(y) = g\left(\sqrt{R^2-x^2}\right)$

kde $x = ka$ $\quad y = \varkappa a$ $\quad$ a opět $x = \sqrt{R^2-y^2}$ podle ⊗

trocha vyšetřování průběhu fcí (nebo Gnuplot či matematika)



závěr graf řešení: podmínka existence vázaného p-stavu je nakonec jednoduchá $R > \pi$ tj. $\sqrt{2mV_0}\,\frac{a}{\hbar} > \pi$ neboli hloubka jámy musí splnit $V_0 > \left(\frac{\hbar\pi}{a}\right)^2\frac{1}{2m}$

ŘEŠENÍ ÚLOHY 2

Jádro tritia sestává ze dvou neutronů a protonu a má tedy náboj $+e_0$. Elektron se v atomu pohybuje stejně jako v atomu vodíku. Pokud uvažujeme jádro nekonečně těžké takže se vůči elektronu nepohybuje (jádro je cca 6000krát těžší než elektron) jsou vlnové funkce stacionárních stavů stejné jako v atomu vodíku:

opakování .. atom vodíku $V(r) = -\frac{\gamma}{r} \equiv -\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}$

vázané stavy: $E_n = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 n^2} \equiv -\frac{E_1}{n^2}$ $n = 1, 2, 3, \ldots$ hlavní kvant. číslo

vln. fce: $\psi(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$ kde $l = 0, 1, \ldots, n-1$
$m = -l, -l+1, \ldots, l$

v nápovědě k úloze 3 je tvar R_{10}, R_{20} a R_{21}

tj. na začátku úlohy je elektron v atomu tritia v základním stavu popsaném funkcí:

$$\boxed{\psi_i(r,\theta,\varphi) = 2\frac{1}{\sqrt{a^3}}e^{-r/a}\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}$$ kde $a = \frac{\hbar^2}{m|\gamma|}$ s energií E_1

ROZPAD JÁDRA: β-rozpad znamená, že jeden neutron se přeměnil na proton $n \to p^+ + \underbrace{e^- + \bar{\nu}_e}$

uvolněný elektron a neutrino mají velkou energii a opustí atom aniž by interagovaly s původním elektronem

mimochodem jedním z hlavních zdrojů technického He^3 je údržba termonukleárních hlavic v níž se nálož β-rozpadá

to vede k přeměně $T \to He^+ + e^- + \bar{\nu}_e$, ale z hlediska elektronu, který už v atomu byl to vypadá jakoby se v potenciálu najednou změnila konstanta $\gamma \to \gamma' = 2\gamma$

z hlediska energií po přeměně to znamená

$$E_n' = -\frac{m\gamma'^2}{2\hbar n^2} = -4\frac{E_1}{n^2}$$

z hlediska vlnových funkcí stacionárních stavů se změní $a \to a' = \frac{\hbar^2}{m|\gamma'|} = \frac{a}{2}$.

vlnová funkce elektronu se přeměnou nezměnila a je ψ_i, ale není to již stacionární stav. Úloha se ptá na pravd. přechodu do ψ'_{nlm} pro základní stav $(n,l,m) = (1,0,0)$ a excitovaný stav

$(n,l,m) = (2,0,0)$ nebo $(2,1,0)$ nebo $(2,1,\pm 1)$

Tedy

$$p_0 \equiv |\langle \psi_i | \psi'_{100} \rangle|^2 \quad ①$$

$$p_1 \equiv \sum_{\ell=0}^{1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\langle \psi_i | \psi'_{2\ell m} \rangle|^2 \quad ②$$

① teď je již výpočet přímočarý

$$\langle \psi_i | \psi'_{100} \rangle = \underbrace{\int Y_{00}^* Y_{00}\, d\Omega}_{=1 \text{ ortogonalita sfér. harmonik}} \int_0^\infty R_{10}^*(r) R'_{10}(r) r^2 dr \quad \ldots a' = \frac{a}{2}$$

$$= \int_0^\infty 2\frac{1}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}\, 2\frac{1}{\sqrt{a'^3}} e^{-r/a'} r^2 dr = \frac{4\cdot\sqrt{8}}{a^3} \int_0^\infty e^{-r\left(\frac{1}{a}+\frac{2}{a}\right)} r^2 dr$$

$$= \frac{8\sqrt{2}}{a^3} \int_0^\infty e^{-\frac{3r}{a}} r^2 \frac{9}{a^2} dr \frac{3}{a} \cdot \frac{a^3}{27} = \frac{8\sqrt{2}}{27} \int_0^\infty e^{-y} y^2 dy = \frac{16\sqrt{2}}{27} \quad \rightarrow p_1 = \left|\frac{16\sqrt{2}}{27}\right|^2 \doteq 0.7023$$

$y = \frac{3r}{a}$

②

Všimneme si, že díky ortogonalitě sférických harmonik (zákonu zachování momentu hybnosti) přispěje jen jediný člen.

$$p_2 = |\langle \psi_i | \psi'_{200} \rangle|^2 = \left| \int Y_{00}^* Y_{00}\, d\Omega \int_0^\infty R_{10}^*(r) R'_{20}(r) r^2 dr \right|^2$$

$R_{10} = 2\frac{1}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}$, $\quad R'_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a'^3}}\left[1-\frac{r}{2a'}\right] e^{-r/2a'}$, $\quad a' = \frac{a}{2}$

$$\frac{4}{a^3} \int_0^\infty \underbrace{e^{-r/a} \cdot e^{-r/a}}_{e^{-2r/a}} \left[1 - \frac{2r}{2a}\right] \frac{4r^2}{a^2} \frac{2dr}{a} \frac{a^2}{4} \cdot \frac{a}{2} = \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-y}\left[y^2 - \frac{1}{2}y^3\right] dy$$

$y = \frac{2r}{a}$, $\quad 0! = 1$, $\quad 1! = 1$

pozn.: Gama funkce .. $\Gamma(n+1) = \int_0^\infty e^{-t} t^n dt = n!$ (pro $n \in \mathbb{N}$)

$$\frac{1}{2}\left[2! - \frac{3!}{2}\right] = -\frac{1}{2} \qquad \boxed{p_2 = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}}$$

poznámka: celkově jsme dostali, že $p_1 + p_2 = 95\%$.

dají se dopočíst pravděpodobnosti do zbylých excitovaných stavů: $p_3 + p_4 + \ldots \doteq 2\%$.

Zdánlivě to nesedí $\sum_{n=1}^{\infty} p_n = 97\%$, ale chybějící 3% představují přechod do spojité části spektra:

$$T \longrightarrow He^+ + e^- + \bar{\nu}_e \quad \ldots\ 97\%$$

$$He^{2+} + e^- + e^- + \bar{\nu}_e$$

z β-rozpadu .. vysoká energie

původní elektron z atomu T

Řešení úlohy 3

Úloha je jednoduchou aplikací základního formalismu QM. Je potřeba si uvědomit jaká je vlnová fce základního stavu atomu vodíku $n=1, l=m=0$:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad \left(= R_{10}(r)\, Y_{00}(\theta,\varphi)\right)$$

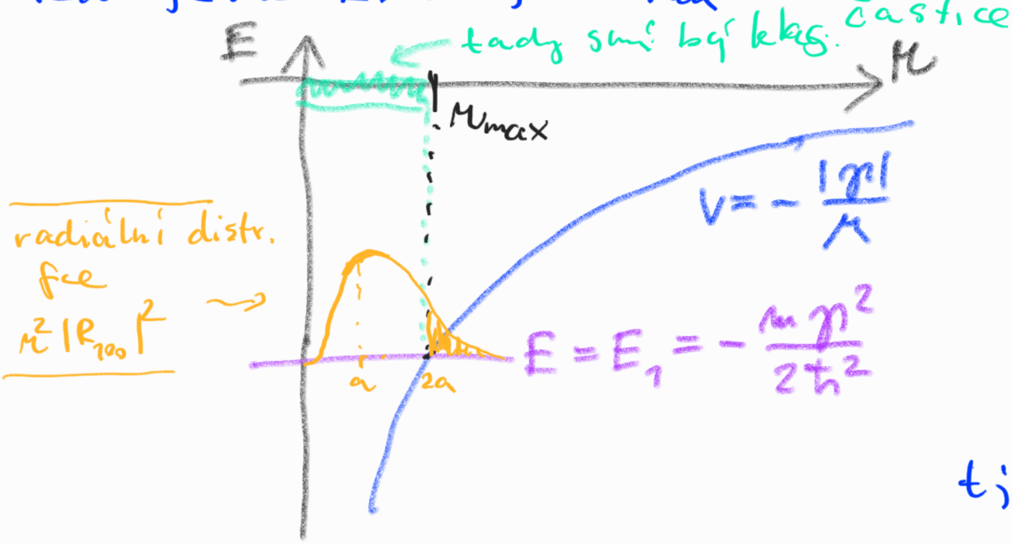
Otázka zní: jaká je pravděpodobnost, že elektron je od protonu dále ($r > r_{max}$) než povoluje klasická fyzika, tj.

$$p = \left| \int_{r_{max}}^{\infty} \int_{S_2} |\psi|^2 r^2 \, d\Omega \, dr \right|^2 = \left| \frac{4}{a^3} \int_{r_{max}}^{\infty} e^{-2r/a} \frac{4r^2}{a^2} \frac{2dr}{a} \frac{a^3}{8} \right|^2 \qquad y = \frac{2r}{a}$$

$$= \left| \frac{1}{2} \int_{\frac{2r_{max}}{a}}^{\infty} e^{-y} y^2 \, dy \right|^2 = \left| -\frac{1}{2} e^{-y} (y^2 + 2y + 2) \right|^2_{y = 2r_{max}/a}$$

2× per partes

Teď ještě kolik je r_{max}:



tj:

$$E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2} = -\frac{|\gamma|}{r_{max}}$$

$$\Rightarrow r_{max} = \frac{2\hbar^2}{|\gamma| m} = 2a$$

srovnej $a = \frac{\hbar^2}{m|\gamma|}$

tj $y = \frac{2r_{max}}{a} = 4$

závěr: $p = \left| \frac{1}{2} e^{-4} (\underbrace{4^2 + 8 + 2}_{26}) \right|^2 = 13^2 e^{-8} \doteq 0.057 \ldots \approx \boxed{6\%}$

důsledek Q-tunelování

- mimochodem $\langle r \rangle$ ve stavu ψ_{100} je

$$\langle r \rangle = \langle \psi_{100} | r | \psi_{100} \rangle = \frac{4}{a^3} \int_0^{\infty} e^{-2r/a} r^3 dr \cdot \frac{16}{a^4} \cdot \frac{a^4}{16} = \frac{a}{4} \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-y} y^3 dy}_{3!} = \frac{3}{2} a$$

- maximum radiální distribuční funkce $|R_{100}(r)|^2 \cdot r^2 = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}$ je v bodě $r_0 = a$