Výpočet vazbové energie deuteronu

Hledáme vlnovou funkci $\psi(x)$ a vazbovou energii B dvoučásticového systému p a n, jejichž interakci popisuje potenciál $V(r)$, $r = |x|$:

$$V(r) = -162\ \frac{\mathrm{e}^{-0{,}7\,r}}{r}\ \text{MeV}, r \text{ ve fm pro } r > 0{,}5 \text{ fm},$$
$$V(r) = \infty \text{ pro } r \leq 0{,}5 \text{ fm}$$

Omezíme se na sféricky symetrickou vlnovou funkci (tj. stav s nulovým orbitálním momentem), praktická je substituce

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u(r)}{r},$$

která vede k jednoduché normovací podmínce pro $u(r)$:

$$1 = \int |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}^3x = \int |\psi(x)|^2\, r^2\mathrm{d}r\ \mathrm{d}\varphi\ \sin\vartheta\ \mathrm{d}\vartheta = 4\pi \int |\psi(x)|^2\, r^2\mathrm{d}r = \int_0^\infty |u(r)|^2\,\mathrm{d}r$$

Schrödingerova rovnice pro funkci $u(r)$ zní

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} = \alpha\,\big(B + V(r)\big)\,u;\ \alpha = 0{,}024\ \text{MeV}^{-1}\text{fm}^{-2}$$

Řešíme ji od $r = 0{,}5$ fm (menší r jsou nedostupné díky nekonečnému potenciálu) s počáteční podmínkou $u(0{,}5\text{ fm}) = 0, u'(0{,}5\text{ fm}) = 1$ a hledáme B takové, aby řešení $u(r)$ bylo kvadraticky integrovatelné, tj. pro velká r dostatečně rychle (zde exponenciálně) klesalo k 0. Očekávejte B kolem 2 MeV. Poté, co takové řešení získáme, můžeme je nanormovat na 1, abychom například mohli spočítat střední kvadratický poloměr deuteronu

$$\langle r^2\rangle = \int_{0{,}5}^\infty |u(r)|^2\, r^2\,\mathrm{d}r$$

Poznámky:

1. Při úvodním zkoumání jednoduchých algoritmů řešení diferenciálních rovnic druhého řádu jsme zjistili, že je obtížné „udržet se“ při numerickém řešení na klesající exponenciále, zde asymptoticky (pro dostatečně velké r, kde je potenciál zanedbatelně malý) $u(r) \cong \mathrm{e}^{-\sqrt{\alpha B}\,r}$. Můžeme se spokojit s řešením, které v oblasti kolem zhruba 10 fm poklesne k nule, i když ve vzdálenosti desítek fm exponenciálně ulétne.
2. Reálie o deuteronu viz např. http://en.wikipedia.org/wiki/Deuterium, o jaderné interakci viz http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_force