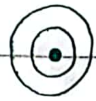
شقایق شیرازی

جلسه ۱۱: اولین جلسه حضوری بعداز تعطیلات نوروز



"اتم هلیوم" ← ۲ تا الکترون دارد!

روش وردشی   Rayligh - Ritz ← از روش احتمالی

- این یه روش خوبیه برای اینکه تقریبا همه مسائل در فیزیک قابل حل نیست!

هامیلتونی $H = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{2}{r_1} \right) \right] - \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right] + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$

پتانسیل بین کولنی و هسته   جریان کولنی بین الکترون و جفت!   رابطه بین کولنی و الکترونها

انگاری ۲ تا اتم هیدروژن در هم ضرب شده‌اند.

اگر برهم کنش نداشته باشد: $\Psi = \psi_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1)\, \psi_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2)$

$\psi_0(\vec{r}_1) = \sqrt{\frac{2}{\pi a_0^3}}\, e^{-\frac{2}{a_0} r_1}$

$E_0 = -18{,}6$

$\psi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) = \frac{8}{\pi a_0^3}\, e^{-\frac{2}{a_0}(r_1 + r_2)}$

$E = -78{,}975\,eV$ مقدار واقعی

پادمتقارن است. ← تابع موج کل .... $\psi_{\text{کل}} = \psi\, \chi$

$E = -109\,eV$ بدون برهم کنش $\Psi = \psi_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1)\, \psi_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_2)$ n_2 یا $n_1 \neq 1$

حالت برانگیخته اول $E = -68\,eV$

انرژی یک الکترون به ∞ برود $E = -54{,}4\,eV$

* در حالت برانگیخته یکی تو حالت پایه است و دیگری توی حالت برانگیخته است!

خب پس ما ۲ تا حالت داریم = 1, پارا هلیوم χ singlet

2, اورتو هلیوم χ triplet

- پارا هلیوم ← انگار گفته استاد: تابع موج فضایی متقارن است یعنی نزدیکترین و کمترین فاصله

پس انرژی‌شون بیشتره ولی اونی که انرژی کمتری دارد زودتر پر می‌شود یعنی اورتو هلیوم!

— وقتی ۲ تا الکترون برهم کنش نمی کنند ...!

وقتی ۲ تا الکترون برهم کنش نمی کنند ما ۲ تا الکترون رو از بیرون می بینیم که می چرخند ولی برهم کنش نمی کنند انگاری یکی انرژی اون یکی رو میگیره پس یکی بار بیشتری داره.

$$\psi = \psi_{100}(\vec{r}_1)\,\psi_{100}(\vec{r}_2)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{Z^2e^2}{r}\right)\psi_{100}(\vec{r}_1) = E\,\psi_{100}(\vec{r}_1) \qquad E = -\frac{mc^2(Z^*\alpha)^2}{2}$$

میانگین انرژی اتم هلیوم

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int d^3r_1 \int d^3r_2\, \psi^2_{100}(r_1)\,\psi_{100}(r_2)$$

$$\left(\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \dots + \frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\right)\psi_{100}(\vec{r}_1)\,\psi_{100}(\vec{r}_2) = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left(4ZZ^* - 2Z^2 - \frac{5}{4}Z^*\right)$$

$$\frac{dE}{dZ^*} = 0 \longrightarrow 4Z - 4Z^* - \frac{5}{4} = 0 \longrightarrow Z^* = Z - \frac{5}{4}$$

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left(4Z\left(Z-\frac{5}{16}\right) - 2\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2 - \frac{5}{4}\left(Z-\frac{5}{16}\right)\right) = -77.08\,eV$$

یه Z^* می خوایم به کمترین مقدار باشد بنابراین مناسب حالت پایه است و دلیل گشتن ما به دنبال min است.

■ حل های تحلیلی بسیار نادر هستند!

E پایین   E بالا

$QCD, Gr \leftarrow H = H_0 +$ کوچک ← مستقل از زمان (غیر تبهگن / تبهگن)

حل های تقریبی   ۱) روش اختلال ← وابسته به زمان

۲) روش وردشی ← فقط انرژی حالت پایه در مورد تابع موج حرفی نمی توانیم بزنیم.

۳) تقریب WKB ← برای سیستم های به کار می رود که حد کلاسیکی داشته باشند، انرژی و تابع موج هم می توانیم به دست بیاریم.

$$H\,|\underset{?}{\underline{\psi_n}}\rangle = \underset{?}{\underline{E_n}}\,|\psi_n\rangle$$

روش اختلال مستقل از زمان غیر تبهگن

$$\overset{H_p}{\longrightarrow}$$ هرجا دیدیم یعنی قسمت کوچک!

$$H = H_0 + \lambda\omega$$

می‌دانیم $H_0|\phi_n\rangle = E_n^0|\phi_n\rangle$ $\qquad (H_0+\lambda\omega)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda^1|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \lambda^3|\psi_n^3\rangle + \dots$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots$$

$$(H_0+\lambda\omega)\left(|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots\right)$$

$$(H_0+\lambda\omega)\left(|\phi_n\rangle + \lambda|\psi_n\rangle\right) = (E_n^0 + \lambda E_n^1)\left(|\phi_n\rangle + \lambda|\psi_n\rangle\right)$$

$$H_0|\phi_n\rangle + \lambda H_1|\psi_n\rangle + \lambda\omega|\phi_n\rangle = E_n^0|\phi_n\rangle + E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|$$

$$\phi_n\rangle \qquad H_0|\phi_n\rangle = E_n^0|\phi_n\rangle$$ مرتبه صفر اختلال

$$H_0|\psi'_n\rangle + \omega|\phi_n\rangle = E_n^0|\psi'_n\rangle + E'_n|\phi_n\rangle$$ مرتبه یک اختلال

$$\langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1 \qquad \langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}$$

$$\langle\psi_n|\phi_n\rangle \neq 1 \xrightarrow{\text{فرض}} \langle\psi_n|\phi_n\rangle = 1$$

$$\left(\langle\phi_n| + \lambda\langle\psi'_n| + \lambda^2\langle\psi_n^2|\dots\right)|\phi_n\rangle = 1$$

$$\underbrace{\cancel{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}}_{=1} + \lambda\langle\psi'_n|\phi_n\rangle + \lambda^2\langle\psi_n^2|\phi_n\rangle + \dots = 1$$

$$\langle\psi_n^i|\phi_n\rangle = 0$$ همه مراتب اختلال بر ϕ_n عمود هستند!

important! $E_n = E_n^0 + \lambda E'_n = E_n^0 + \langle\phi_n|\lambda\omega|\phi_n\rangle =$

$$E_n^0 + \underline{\langle\phi_n|H_p|\phi_n\rangle}$$

$\{|\phi_n\rangle\}$ $\quad |\Psi_n^1\rangle = \sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\Psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n}\left(\langle\phi_m|\Psi_n^1\rangle\right)|\phi_m\rangle = \sum_{m\neq n}\left(\frac{\langle\phi_m|W|\phi_n\rangle}{E_n^\circ - E_m^\circ}\right)|\phi_m\rangle$

$n\neq m \quad \underbrace{\langle\phi_m|H_\circ|\Psi_n^1\rangle}_{E_m^\circ\langle\phi_m|\Psi_n^1\rangle} + \langle\phi_m|W|\phi_n\rangle = E_n^\circ\langle\phi_m|\Psi_\circ^1\rangle + E_n^1 \cancel{\langle\phi_m|\phi_n\rangle} \rightarrow \circ$

$$\langle\phi_m|\Psi_n^1\rangle_{n\neq m} = \frac{\langle\phi_m|W|\phi_n\rangle}{E_n^\circ - E_m^\circ}$$