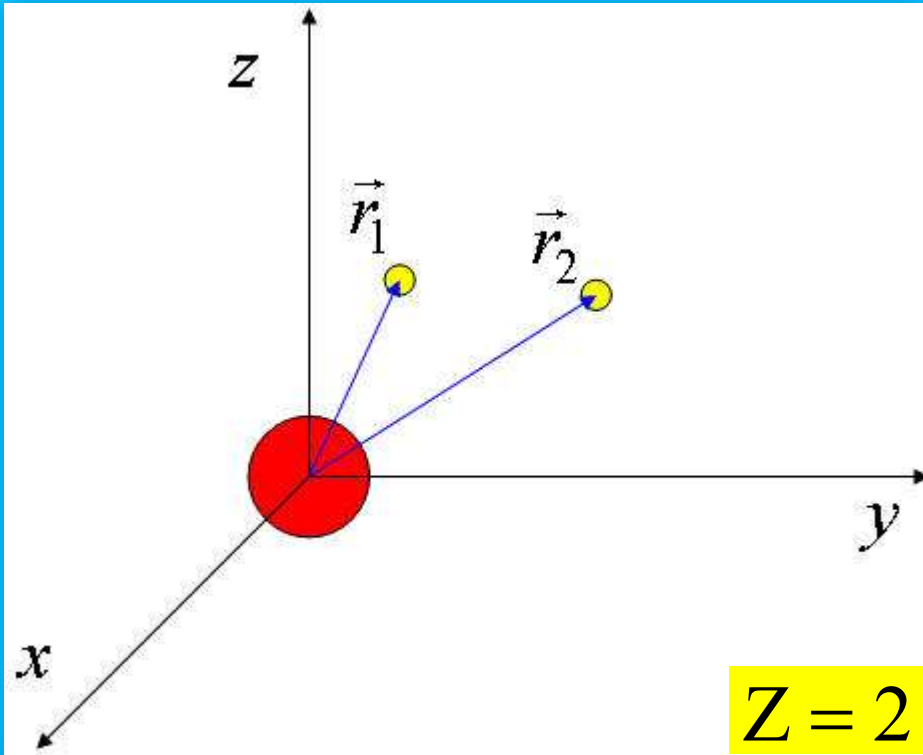


The Helium Atom

اتم هلیوم



فرض می کنیم که نیروهای دیگری غیر از
نیروهای الکترومغناطیسی (با تقریب خیلی
خوب فقط نیروهای کولمبی) برای توصیف
کوانتومی اتم هلیوم ضروری نمی باشند.

خواهیم دید که فرض فوق فرض درستی است

با صرف نظر کردن از حرکت هسته اتم:

$$H = \frac{1}{2m} P_1^2 + \frac{1}{2m} P_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

$$H = \frac{1}{2m} P_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{1}{2m} P_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

$H^{(1)}$

$H^{(2)}$

V

$$H = H^{(1)} + H^{(2)} + V$$

$$H = H^{(1)} + H^{(2)}$$

$$(H^{(1)} + H^{(2)}) u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{n_1 l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}_2)$$

$$E = E_{n_1} + E_{n_2}$$

$$E_n = -(mc^2 / 2)(Z\alpha)^2 / n^2$$

حال اگر از پتانسیل برهمکنش الکترون-الکترون صرف نظر کنیم، خواهیم داشت

در این صورت می توان دو الکترون را مستقل در نظر گرفت، پس فعلا در چارچوب هارتری می توان تابع موج را به صورت زیر نوشت

بنابراین در حالت ایده آلی که دو الکترون اثر یکدیگر را نادیده می گیرند می توان انرژی حالت پایه اتم هلیوم را به صورت زیر به دست آورد:

$$E = 2E_1 = -2 \times (mc^2 / 2)(Z\alpha)^2 / n^2$$

$$E = -2 \times (mc^2 / 2)(2\alpha)^2 / 1^2$$

$$E = -8 \times (mc^2 / 2)(\alpha)^2$$

$$E = -8 \times 13.6 \text{ eV} = -108.8 \text{ eV}$$

$$E = E_1 + E_2$$

انرژی اولین تراز برای نیکسته اتم هلیوم

$$E = -(mc^2 / 2)(2\alpha)^2 / 1^2 - (mc^2 / 2)(2\alpha)^2 / 2^2$$

$$E = -4 \times 13.6 - 4 \times 13.6 / 4 = -68.0 \text{ eV}$$

انرژی یونیزاسیون عبارت است از انرژی لازم برای کندن یک الکترون از حالت پایه به بی نهایت است

$$E_{\text{ioniz}} = (E_1 + E_{\infty}) - 2E_1$$

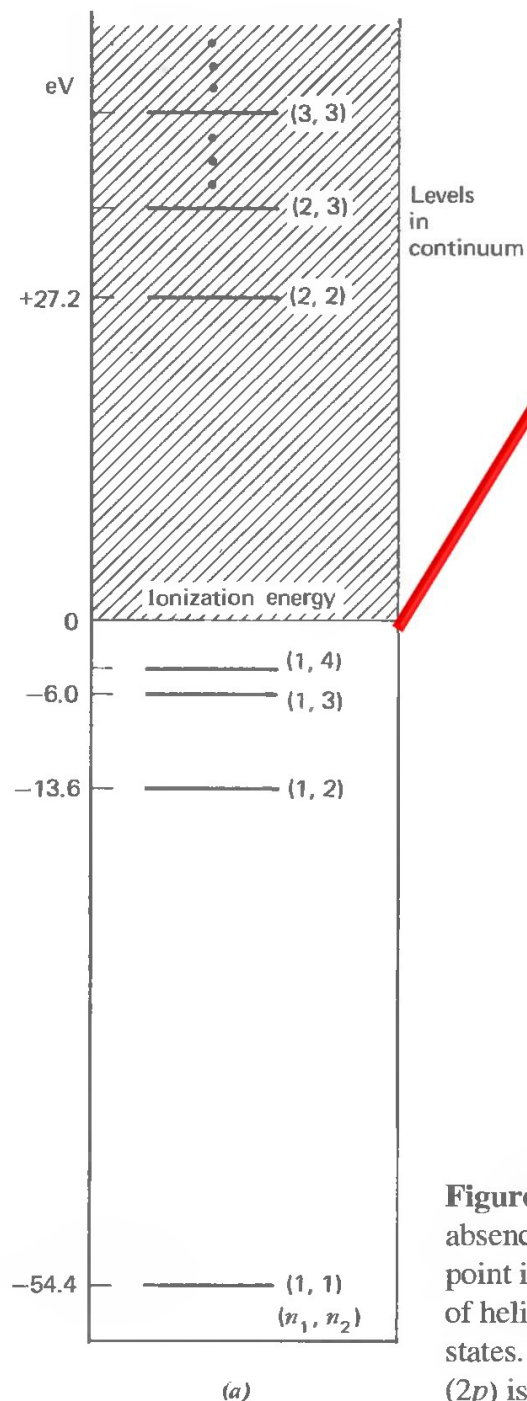
$$\begin{aligned} &= (Z^2 \times (-13.6 \text{ eV}) + 0) - 2 \times Z^2 \times (-13.6 \text{ eV}) \\ &= -4 \times 13.6 + 8 \times 13.6 = 4 \times 13.6 = 54.4 \text{ eV} \end{aligned}$$

نکته جالب توجه این است که شروع طیف پیوسته زیر تراز برانگیخته ای قرار می گیرد که در آن هر دو الکترون در حالت $n=2$ واقع شده باشند

$$\begin{aligned} E &= 2E_2 \\ &= 2 \times Z^2 \times (-13.6 \text{ eV}) / 2^2 \\ &= -27.2 \text{ eV} \end{aligned}$$

انرژی تراز فوق عبارت است از:

نکته فوق کوپای یک پیده فیزیکی است:



مبدأ انرژی به انرژی یونیزاسیون
شیفت داده شده است

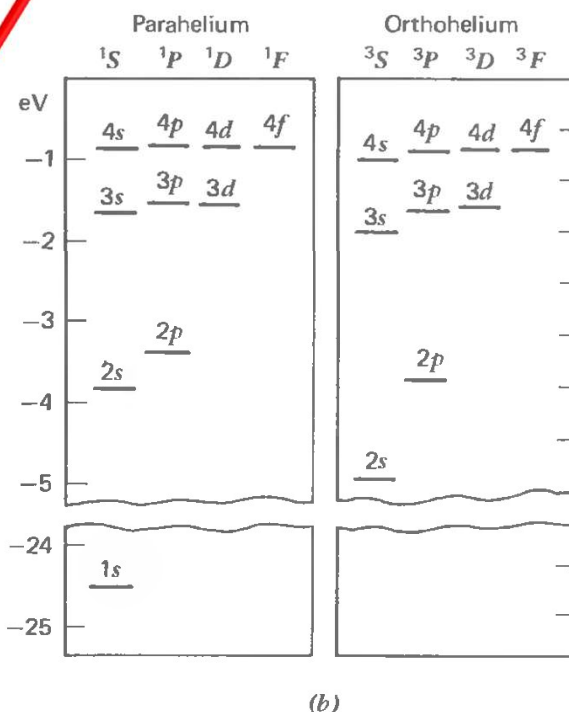


Figure 14-2(a) The spectrum of helium as it would look in the absence of the electron–electron interaction. The zero energy point is chosen at the ionization energy. **(b)** The actual spectrum of helium for the singlet (parahelium) and triplet (orthohelium) states. The level labeling has a suppressed $(1s)$, so that the level $(2p)$ is approximately described by the $(1s)(2p)$ orbital.

آن پدیده فیزیکی این است که
وجود یک تراز گسته در طیف
پایه برای هامیلتونی غیر برهمکنشی

$$H = H^{(1)} + H^{(2)}$$

مشاهده می شود. این تراز گسته در
بالای انرژی یونیزاسیون قرار
دارد.

الکترونیایی که در ترازهای کسته واقع در ناحیه پیوسته قرار دارند پس از تحریک لزومی ندارند که به تراز پایه بازگردند.

زیرا آنها می توانند به ترازهای مجاز بشمار دیگری در ناحیه پیوسته گذار داشته باشند

چون ناحیه پیوسته طیف علام مربوط به ناحیه یونیتراسیون است، الکترونها پس از تحریک می توانند به هر تراز می در این ناحیه بروند که در آن اتم هلیوم به یک یون یک بار مثبت و یک تک الکترون یونیزه شده تبدیل شوند.

در این صورت دیگر مفهوم تراز کسته در قلب ترازهای پیوسته مفهوم گسستگی خود را از دست می دهد

اما در عمل هنوز هم این ترازهای کسته وجود دارند و شکل زیر گواه آن است

اما در غل هنوز هم این ترازهای گسته وجود دارند و شکل زیر کوآه آن است

می گوئیم که انرژی تراز (2و2) دیگر دقیقا معین نیست بلکه بایک عدم یقین روبه رواست طول عمر و پهنای خط تراز را می توان از آن به دست آورد

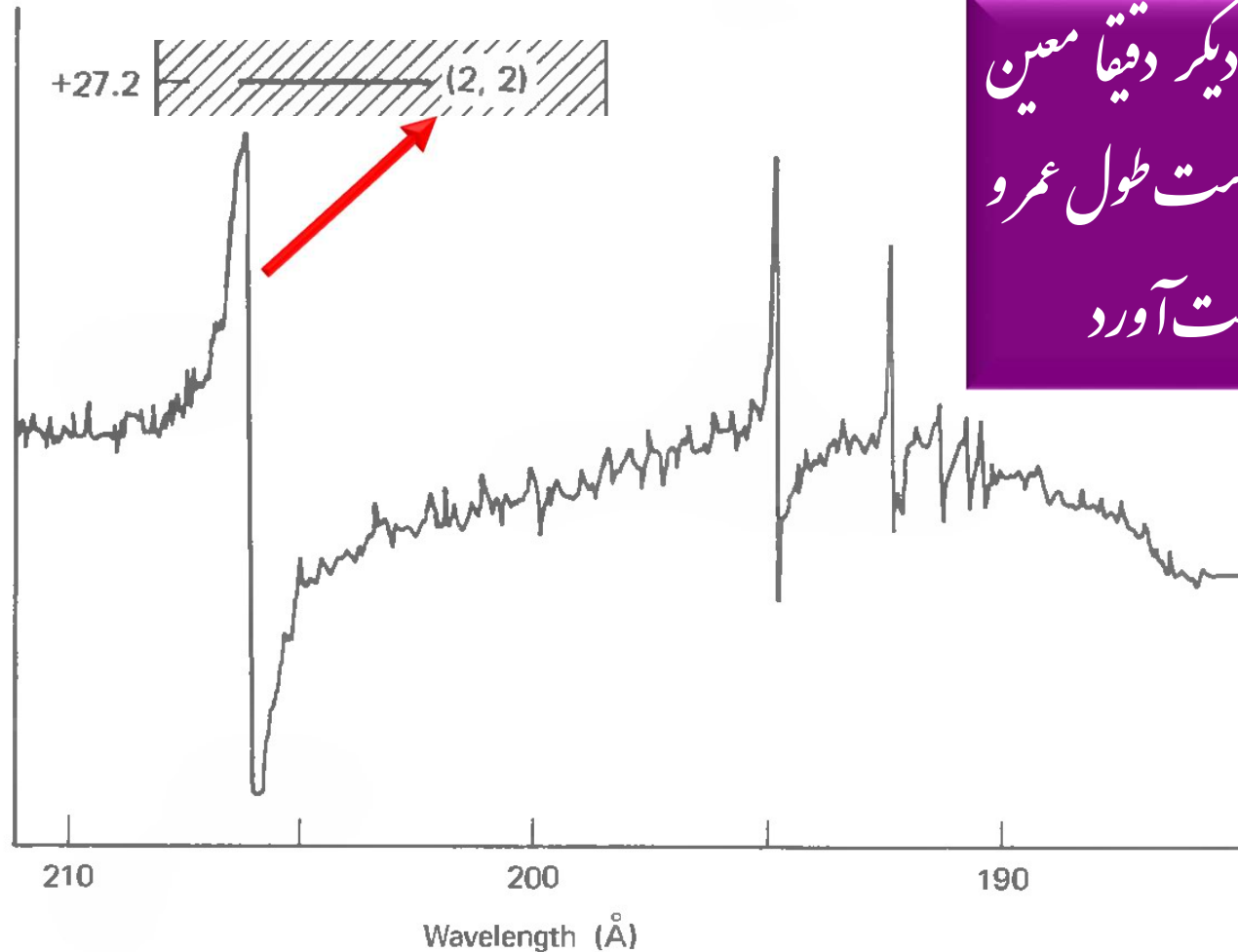


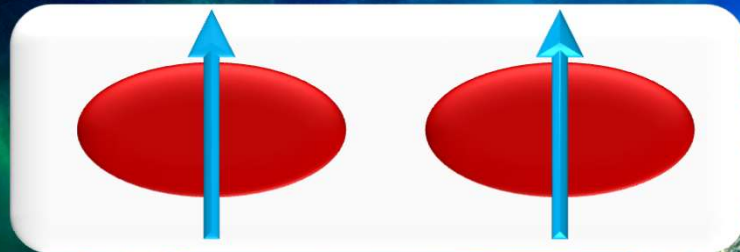
Figure 14-4 Resonance in the helium absorption spectrum above the continuum threshold; the first peak occurs at the energy corresponding to the location of the $(2s)(2p)$ level. (From R. P. Madden and K. Codling, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 516 (1963), by permission.)

$$\Delta E \geq \hbar / \Delta t$$

پهنای خط

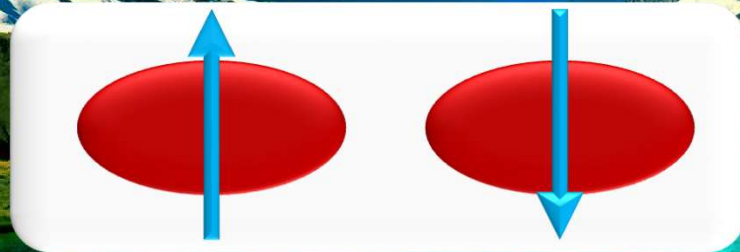
طول عمر

چون دو الکترون فرمیونهای یکسانند، باید تابع موج کل تحت جابه جایی محلی فضایی و اسپینی پادمقارن باشد



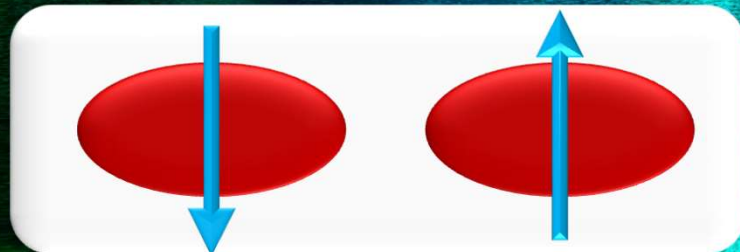
$$S = 1 / 2\hbar + 1 / 2\hbar = \hbar$$

$$\chi_{+}^{(1)} \chi_{+}^{(2)}$$



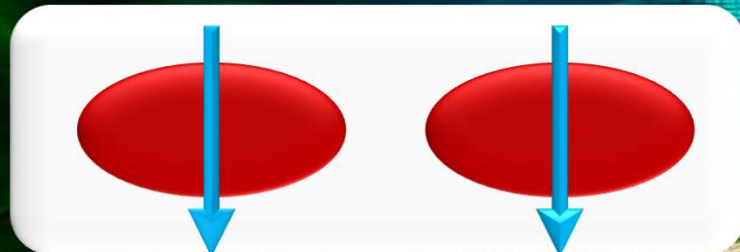
$$S = 1 / 2\hbar - 1 / 2\hbar = 0$$

$$\chi_{+}^{(1)} \chi_{-}^{(2)}$$



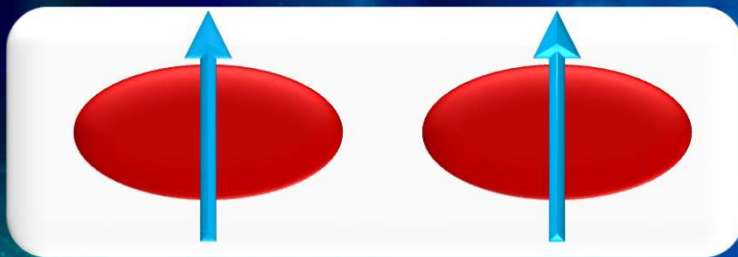
$$S = -1 / 2\hbar + 1 / 2\hbar = 0$$

$$\chi_{-}^{(1)} \chi_{+}^{(2)}$$

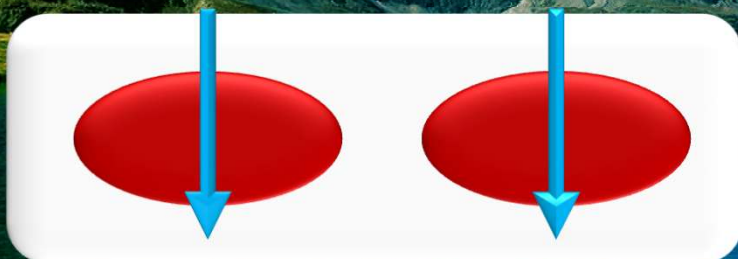
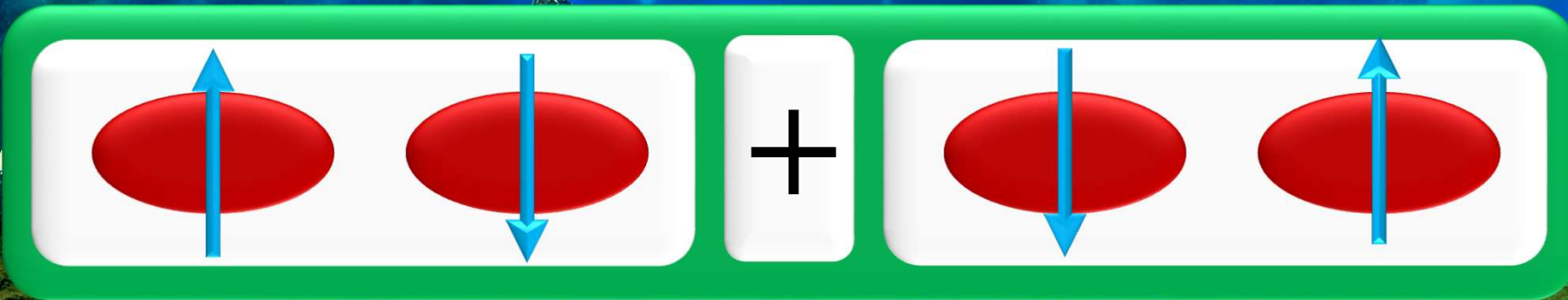


$$S = -1 / 2\hbar - 1 / 2\hbar = -\hbar$$

$$\chi_{-}^{(1)} \chi_{-}^{(2)}$$

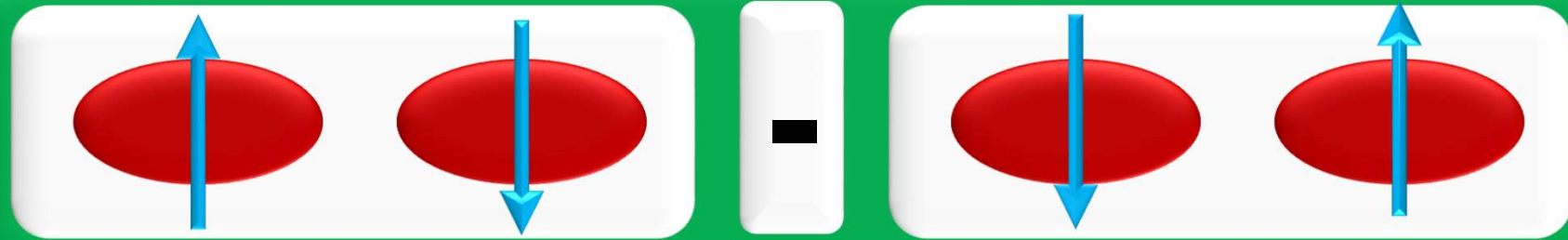


$$\frac{1}{\sqrt{2}}$$



$$\mathbf{X}_{\text{triplet}} = \begin{cases} \chi_{+}^{(1)} \chi_{+}^{(2)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{+}^{(1)} \chi_{-}^{(2)} + \chi_{-}^{(1)} \chi_{+}^{(2)} \right) \\ \chi_{-}^{(1)} \chi_{-}^{(2)} \end{cases}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}$$



$$X_{\text{singlet}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{+}^{(1)} \chi_{-}^{(2)} - \chi_{-}^{(1)} \chi_{+}^{(2)} \right)$$

$$\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)$$

بخش فضایی تابع موج حالت پایه اتم
هلیوم غیر برهمکنشی لزوماً فقط می‌تواند
متقارن باشد

بنابراین تابع موج کل حالت پایه فقط می‌تواند به صورت زیر باشد

چون فقط در این صورت تابع موج
کل پادمتقارن می‌شود

$$u_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2) X_{\text{singlet}}$$

اما بخش فضایی تابع موج اولین حالت برانگیخته اتم هلیوم غیر برهمکنشی توانده هر یک از دو صورت زیر باشد

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{2lm}(\mathbf{r}_2) + \phi_{2lm}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2))$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{2lm}(\mathbf{r}_2) - \phi_{2lm}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2))$$

بنابراین تابع موج کل اولین حالت برانگیخته باید به یکی از دو صورت زیر باشد

$$u_1^{singlet}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{2lm}(\mathbf{r}_2) + \phi_{2lm}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)) X_{singlet}$$

$$u_1^{triplet}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{2lm}(\mathbf{r}_2) - \phi_{2lm}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)) X_{triplet}$$

حال که اتم هلیوم غیر همگنشی را مطالعه کرده ایم می توان اثر پتانسیل بر همگنشی الکترون- الکترون را به صورت اختلال وارد کرد.

ابتدا شیفت انرژی حالت پایه تا مرتبه اول را بررسی می کنیم:

$$\Delta E = \int d^3 r_1 d^3 r_2 u_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} u_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

چون پتانسیل اختلال شامل اسپین نمی شود پس کافی است که بخش فضایی تابع موج را در انتگرال فوق در نظر بگیریم، چون انتگرال بخش اسپینی برابر یک می شود