

Frumeinda- og ljósfræði:

Helín

Kafli 3

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

3. vika vor 2020

Inngangur

- Helín hefur aðeins tvær rafeindir
- Til að lýsa kerfi sem hefur tvær agnir þarf að grípa til aðferða sem nýtast í fjöleindakerfum
- Skilningur á tveggja rafeinda kerfi er nægjanlegur til að skilja flest atómkerfi sem hér verður fjallað um

Grunnástand helíns

- Tveimur rafeindum í Coulomb mætti með hleðslu Ze , kjarna atóms, er lýst með Schrödinger jöfnu

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 + \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right) \right\} \psi = E\psi$$

- Hér er $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ fjarlægð milli rafeindar 1 og rafeindar 2 og rafstöðufráhrindikrafturinn er í réttu hlutfalli við $1/r_{12}$
- Ef við lítum fram hjá þessum fráhrindikrafti má rita

$$(H_1 + H_2)\psi = E^{(0)}\psi$$

þar sem

$$H_1 \equiv \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \quad \text{og} \quad H_2 \equiv \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

Grunnástand helíns

- Ef við ritum bylgjufall atómsins sem margfeldi bylgjufalla fyrir hvora rafeind

$$\psi = \psi(1)\psi(2)$$

Þá má kljúfa $(H_1 + H_2)\psi = E^{(0)}\psi$ upp í tvær einnar rafeindar Scrödinger jöfnur

$$H_1\psi(1) = E_1\psi(1)$$

og

$$H_2\psi(2) = E_2\psi(2)$$

- Lausnir þessara einnar rafeindar jafna eru hydrogenic bylgjuföll með orku sem er gefin með Rydberg jöfnunni

Grunnástand helíns

- Helín hefur $Z = 2$ og í grunnástandi beggja rafeindanna hefur orku

$$E_1 = E_2 = -4hcR_\infty = -54.4 \text{ eV}$$

- Heildar orka atómsins (lítum framhjá fráhrindikrafti) er

$$E^{(0)} = E_1 + E_2 = -109 \text{ eV}$$

- Nú reiknum við truflun sem stafar af fráhrindikrafti
- Kerfið hefur rúmbylgjufall

$$\psi_{1s^2} = R_{1s}^{Z=2}(r_1)R_{1s}^{Z=2}(r_2) \times \frac{1}{4\pi}$$

Grunnástand helíns

- Væntigildi fráhrindikraftsins er

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \int_0^\infty \psi_{1s^2}^* \frac{1}{r_{12}} \psi_{1s^2} r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 = 34 \text{ eV}$$

- Þegar þetta er lagt við $E^{(0)}$ fæst orkan

$$E(1s^2) = -109 + 34 = -75 \text{ eV}$$

- Það kostar 75 eV að fjarlægja báðar rafeindirnar frá helín atómi og skilja það eftir sem tvíjónað He^{++}
- Til að fara frá He^+ til He^{++} tekur 54.4 eV
- Svo að fyrsta jónunarorka – fjarlægja eina rafeind frá He til að mynda He^+ – er $\mathcal{E}_{iz} \simeq 75 - 54 \simeq 21 \text{ eV}$

Grunnástand helíns

- En væntigildið er stórt í samanburði við bindiorkuna og hefur því veruleg áhrif á bylgjufallið
- Nauðsynlegar leiðréttingar á bylgjufallinu eru fengnar með því að beita hnikunaraðferðum
- Þessi aðferð gefur gildi sem er nálegt mældri jónunarorku helíns 24.6 eV
- Helín hefur stærstu aðra jónunarorku allra frumeinda vegna lokaðs $n = 1$ hvels

Grunnástand helíns

- Samkvæmt einsetulögmáli Pauli geta tvær rafeindir ekki haft sömu skammtatölur
- Þess vegna þarf að vera enn ein skammtatala fyrir 1s rafeindir – sem er spuni
- Það hvernig hvel atóma eru fyllt í lotukerfinu bendir til að tvö spunaástand séu tengd við hvert mengi rúmskammtatalna n , l , og m_l
- Hafið í huga að rafstöðuorka er óháð spuna og finna má rúmbylgjuföllin án þess að finna eiginföll spuna

⇒ Dæmi 3.1

⇒ Dæmi 3.2

Örvuð ástönd helíns

- Til að finna orku örvaðra ástanda beitum við sömu aðferðum og fyrir grunnástandið
- Fyrst lítum við framhjá fráhrindikrafti og skoðum tvær einnar rafeindar lausnir

$$u_{1s}(1) = R_{1s}(r_1) \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$u_{nl}(2) = R_{nl}(r_2)Y_{l,m}(\theta_2, \phi_2)$$

fyrir röðunina $nl1s$

Örvuð ástönd helíns

- Rúmhluti bylgjufalls atómsins er margfeldið

$$\psi_{\text{space}} = u_{1s}(1)u_{nl}(2)$$

- Annað bylgjufall hefur sömu orku

$$\psi_{\text{space}} = u_{1s}(2)u_{nl}(1)$$

- Þetta er skipta margfeldni (e. exchange degeneracy)
- Til að taka með í reikningin fráhrindikraftinn verður að beita truflanareikningum

Örvuð ástönd helíns

- Ritum jöfnu Schrödinger sem

$$(H_0 + H')\psi = E\psi$$

þar sem $H_0 = H_1 + H_2$ og við tökum fráhrindikraftinn milli rafeindanna

$$H' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

sem truflun

- Einnig er

$$H_0\psi = E^{(0)}\psi$$

þar sem $E^{(0)} = E_1 + E_2$ er ótruflaða orkan

Örvuð ástönd helíns

- Orkan sem stafar af trufluninni er

$$\Delta E = E - E^{(0)}$$

eða

$$H'\psi = \Delta E\psi \quad (*)$$

- Almenn jafna fyrir bylgjufall með orku $E^{(0)}$ er

$$\psi = au_{1s}(1)u_{nl}(2) + bu_{1s}(2)u_{nl}(1)$$

þar sem a og b eru stuðlar

Örvuð ástönd helíns

- Ef $u_{1s}^*(1)u_{nl}^*(2)$ eða $u_{1s}^*(2)u_{nl}^*(1)$ er stungið inn í jöfnu (*) og tegrun yfir rúmhnitin fyrir hvora rafeind (r_1, θ_1, ϕ_1) og (r_2, θ_2, ϕ_2) gefur tvær tengdar jöfnur

$$\begin{pmatrix} J & K \\ K & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \Delta E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

sem er jafna (*) í fylkjaframsetningu

- Beint tegur er

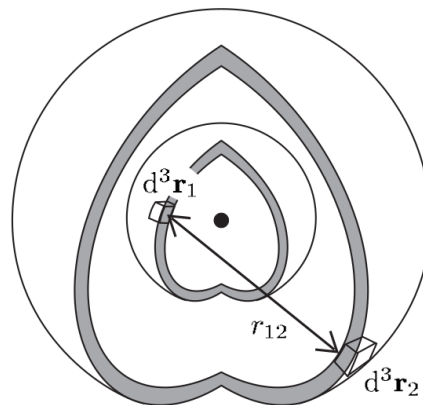
$$J = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \int |u_{1s}(1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |u_{nl}(2)|^2 d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3$$

eða

$$J = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \int \frac{\rho_{1s}(r_1)\rho_{nl}(r_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3$$

Örvuð ástönd helíns

- Hér er $\rho_{1s} = -e|u_{1s}(1)|^2$ er hleðsluþéttleikadreifing fyrir rafeind 1 og $\rho_{nl} = -e|u_{nl}(2)|^2$ er hleðsluþéttleikadreifing fyrir rafeind 2
- Þetta tegur lýsir Coulomb fráhrindikrafti þessara hleðsluskýa



Frá Foot (2005)

- Bein tegur fyrir $1snl$ í helíni sem svarar til Coulomb fráhrindikrafts milli tveggja kúlusamhverfra hleðslu skýa

Örvuð ástönd helíns

- Skiptitegrið er

$$K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \int u_{1s}^*(1)u_{nl}^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} u_{1s}(2)u_{nl}(1) d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3$$

- Þetta tegur hefur enga sígilda samsvörun með hleðslu dreifingu
- Kúlusamhverfa 1s bylgjufallsins gerir það að verkum að þetta tegur er fremur auðvelt að framkvæma
- Eigingildin ΔE eru fundin með

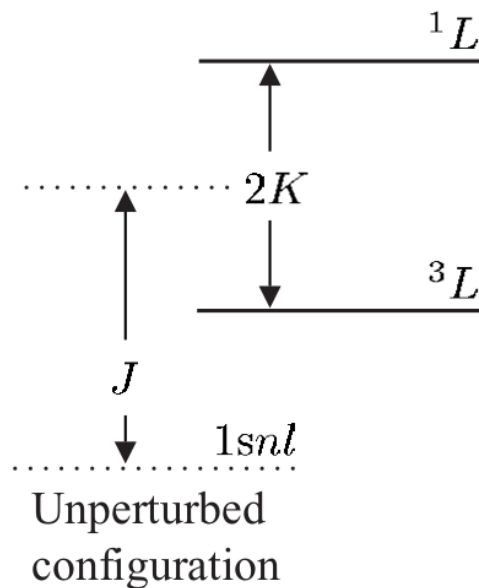
$$\begin{vmatrix} J - \Delta E & K \\ K & J - \Delta E \end{vmatrix} = 0$$

Örvuð ástönd helíns

- Rætur þessarar ákveðu eru

$$\Delta E = J \pm K$$

- Beina tegrið hliðrar báðum orkustigum saman en skipti tegrið veldur orkuklofnun sem nemur $2K$



Frá Foot (2005)

Örvuð ástönd helíns

- Stungið aftur inn í

$$\psi = au_{1s}(1)u_{nl}(2) + bu_{1s}(2)u_{nl}(1)$$

gefur tvo eiginviga þar sem $b = a$ og $b = -a$

- Þeir svara til samhverfs (S) og andsamhverfs (A) bylgjufalla

$$\psi_{\text{space}}^{\text{S}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_{1s}(1)u_{nl}(2) + u_{1s}(2)u_{nl}(1)\}$$

$$\psi_{\text{space}}^{\text{A}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_{1s}(1)u_{nl}(2) - u_{1s}(2)u_{nl}(1)\}$$

Örvuð ástönd helíns

- Bylgjufallið ψ_{space}^A hefur eiginorku

$$E^{(0)} + J - K$$

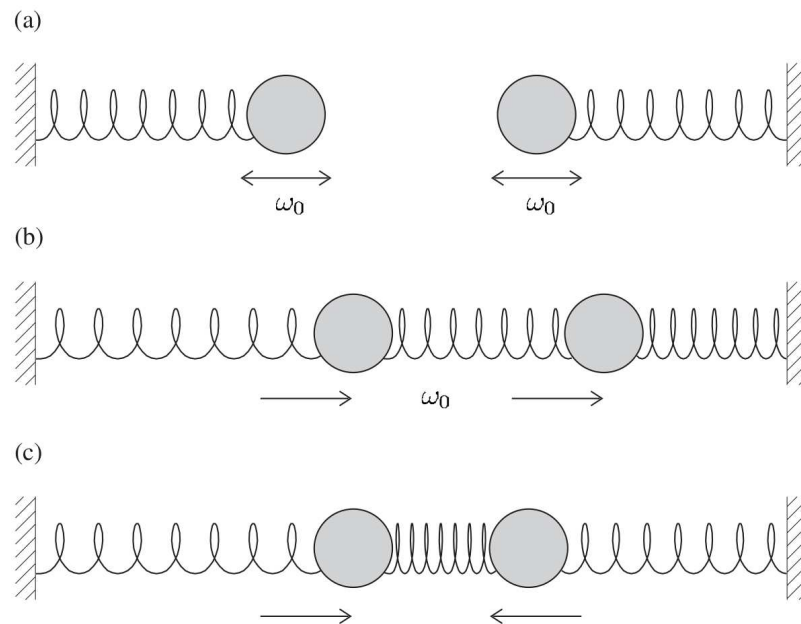
og bylgjufallið ψ_{space}^S hefur eiginorku

$$E^{(0)} + J + K$$

- Oft er litið svo á að í andsamhverfu bylgjufalli að rafeindirnar forðist hvor aðrar $\psi_{\text{space}}^A = 0$ fyrir $r_1 = r_2$ og líkur á að finna rafeind 1 nálægt rafeind 2 séu litlar

Örvuð ástönd helíns

- Það að bæði samhverf og andsamhverf bylgjuföll koma fram hefur sígilda samsvörun



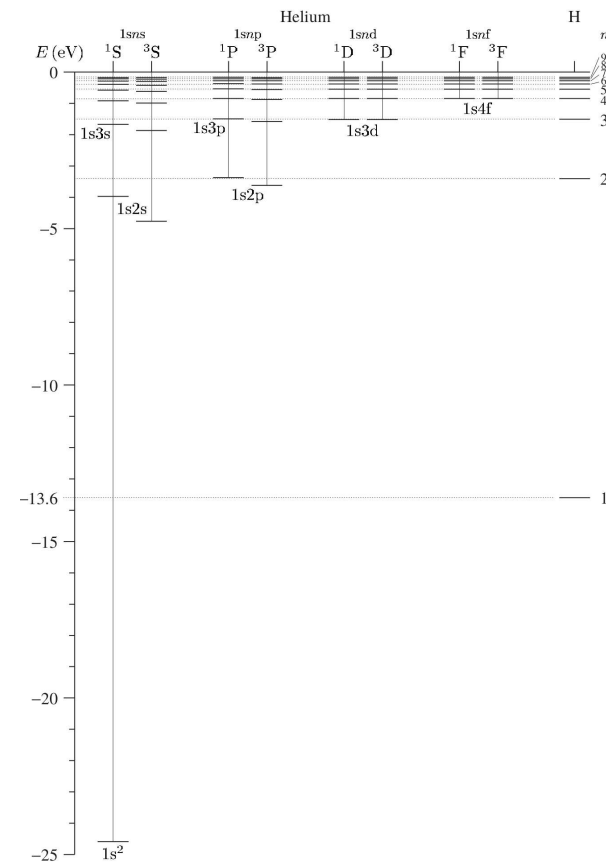
Frá Foot (2005)

- Kerfi tveggja sveiflna sem hafa sömu hermitíðni sem víxlverka hefur samhverfa og andsamhverfa bylgjuhætti

Örvað ástönd helíns

- Skiptitegrið minnkar með hækkandi n og l vegna minnkandi skörunar bylgjufalla örvaðrar rafeindar og $1s$ -rafeinda
- Þetta kemur til vegna lögunar bylgjufalla rafeindanna
- Þrátt fyrir þetta stefnir beina tegrið ekki á núll með hækkandi n og l
- Örvaða ástandið sér kjarnhleðslu $+2e$ sem er umlukin með hleðsluskýi $1s$ rafeindar – fjarri kjarnanum þar sem nl -rafeindin hefur verulega viðkomu finnur hún fyrir Coulomb mætti frá $+1e$ hleðslu
- Þannig hefur örvaða rafeindin svipaða orku og rafeind á vetnisatómi
- En við byrjuðum með þau rök að bæði $1s$ - og nl -rafeindin hafi orku sem er gefin með Rydberg jöfnunni fyrir $Z = 2$
- Beina tegrið J er jafnt mismun þessara orkustiga

Örvuð ástönd helíns



Frá Foot (2005)

- Orkustig helium atóms og vetnis atóms

Örvuð ástönd helíns

- Hamiltonian fyrir rafstöðu fráhrindingu er í réttu hlutfalli

$$\frac{1}{r_{12}} \equiv \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

sem víxlast við virkjann breytir ögn 1 í ögn 2 eða $1 \longleftrightarrow 2$

- Rafeindir eru fermíeindir (e. fermions) svo að atóm hefur heildarbylgjuföll sem eru andsamhverf með tilliti til umröðunar áa merkingum
- Þetta krefst þess að $\psi_{\text{space}}^{\text{S}}$ tengist andsamhverfa spuna fallinu $\psi_{\text{spin}}^{\text{A}}$ og öfugt

$$\psi = \psi_{\text{space}}^{\text{S}} \psi_{\text{spin}}^{\text{A}} \quad \psi = \psi_{\text{space}}^{\text{A}} \psi_{\text{spin}}^{\text{S}}$$

Örvuð ástönd helíns – eiginástönd spuna

- Rafstöðu fráhrindikraftur á milli tveggja rafeinda leiðir til bylgjufallana

$$\psi_{\text{space}}^S \quad \text{og} \quad \psi_{\text{space}}^A$$

í örvuðu ástandi helín atóms

- Grunnástandið er sértilfelli þar sem báðar rafeindirnar hafa sama rúmbylgjufall og bara samhverfar lausnir koma fram
- Hvorki H_0 né H' hafa vísun til spuna rafeindanna
- Fermíeindir hafa bylgjuföll sem eru andsamhverf fyrir með tilliti til breytingar á merkingu agna og bóseindir eru hafa samhverf bylgjuföll

Örvuð ástönd helíns – eiginástönd spuna

- Rafeindir eru fermíeindir svo atóm hafa heildarbylgjuföll sem eru andsamhverf með tilliti til breytingar á merkingu agna
- Þetta krefst þess að ψ_{space}^S er tengt andsamhverft spuna fall ψ_{spin}^A og öfugt

$$\psi = \psi_{\text{space}}^S \psi_{\text{spin}}^A \quad \text{og} \quad \psi_{\text{space}}^A \psi_{\text{spin}}^S$$

- Þau andsamhverfu bylgjuföll sem við setjum hér fram uppfylla það að hafa tiltekna samhverfu með tilliti til skipta á óaðgreinanlegum ögnum
- Við finnum nú spuna eiginföllin nákvæmlega
- Við notum táknið \uparrow og \downarrow fyrir $m_s = 1/2$ annars vegar og $m_s = -1/2$ hins vegar

Örvuð ástönd helíns – eiginástönd spuna

- Rafeindirnar hafa fjórar mögulegar samsetningar á

$$\psi_{\text{spin}}^S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

sem svara til $S = 1$ og $M_S = +1, 0, -1$ og andsamhverft fall

$$\psi_{\text{spin}}^A = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\}$$

sem svara til $S = 0$ (með $M_S = 0$)

Örvuð ástönd helíns – eiginástönd spuna

- Eiginástöndin eru oft táknuð ^{2S+1}L , þar sem S er heildar spuni og L er heildar hverfipungaskammtatala
- $1snl$ röðunin í helíni er $L = 1$, og leyfð ástönd eru 1L og 3L þannig að $1s2s$ röðunin í helíni gefur 1S og 3S , þar sem S stendur fyrir $L = 0$

Örvuð ástönd helíns – færslur í helíni

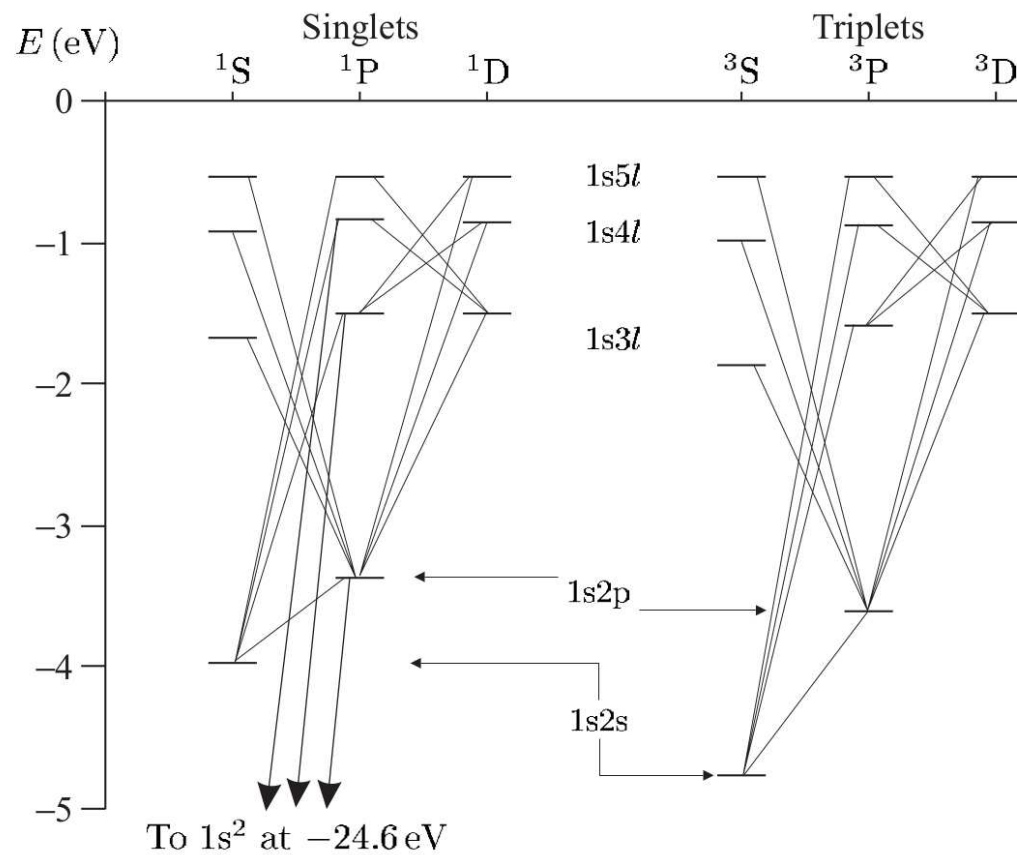
- Til þess að ákvarða hvaða færslur eru leyfðar í milli orkustiga helíns þarf að setja fram valreglu fyrir spuna
- Heildar skammtatala spuna tekur ekki breytingum í færslu rafsviðstíþóls
- Í fylkisstakinu

$$\langle \psi_{\text{final}} | r | \psi_{\text{initial}} \rangle$$

þá verkar virkinn r ekki á spunann

- Þar af leiðir að ef ψ_{final} og ψ_{initial} hafa ekki sama gildi á S , þá eru spunaföllin þverstæð (e. orthogonal) og fylkisstakið er núll
- Þessi valregla gefur færslurnar sem sjást á mynd

Örvuð ástönd helíns – færslur í helíni



Frá Foot (2005)

Mat á tegrum í helíni

- Hér reiknum við beina- og skiptitegrið til að fá mat á orkustig helín atóms
- Þetta gefur okkur dæmi um hvernig nota má bylgjuföllin til að framkvæma reikninga þar sem ekki eru fyrir hendi sígildar brautir
- Tegrin koma til vegna vegna Coulomb víxverkun milli rafeindanna og eru meðhöndluð með hreinni skammtafræði

Mat á tegrum í helíni – grunnástand

- Til að reikna orkustig $1s^2$ röðuninnar þarf að finna væntigildi $e/4\pi\epsilon_0 r_{12}$
- Þetta er sama og að reikna fráhrindingu milli tveggja hleðsluskýa í sígildri rafstöðufræði eins og

$$J = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \int \frac{\rho_{1s}(r_1)\rho_{nl}(r_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3$$

með $\rho_{1s}(r_1)$ og $\rho_{nl}(r_2) = \rho_{1s}(r_2)$

- Við gætum reiknað orku hleðsludreifingar rafeindar 1 í mættinu sem stafar frá rafeind 2 og öfugt
- En hér gerum við það ekki, heldur notum aðferð sem byggir á samhverfu

Mat á tegrum í helíni – grunnástand

- Rafeind 1 myndar rafstöðumætti við r_2 sem er gefið með

$$V_{12}(r_2) = \int_0^{r_2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \rho(r_1) d^3\mathbf{r}_1$$

- Kúlusamhverfa s-rafeinda þýðir að hleðsla innan $r_1 < r_2$ virkar sem punkt hleðsla í upphafspunki, eða

$$V_{12}(r_2) = \frac{Q(r_2)}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

þar sem $Q(r_2)$ er hleðsla innan radía r_2 sem er gefin með

$$Q(r_2) = \int_0^{r_2} \rho(r_1) 4\pi r_1^2 dr_1$$

Mat á tegrum í helíni – grunnástand

- Rafstöðuorkan sem kemur til vegna fráhrindingar er

$$E_{12} = \int_0^{\infty} V_{12}(r_2) \rho(r_2) 4\pi r_2^2 dr_2$$

- Fyrir $1s^2$ röðunina er nákvæmlega sama framlag til orkunnar frá $V_{21}(r_1)$, (hlut)mættið við r_1 sem stafar frá rafeind 2
- Þar með er heildar orka fráhrindingar milli rafeindanna tvöföld það sem gefið er að ofan

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- Fyrir radíal bylgjufall 1s rafeindar er

$$J_{1s^2} = 2 \times \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \left\{ \int_0^{r_2} \frac{1}{r_1} 4Z^3 \exp(-(Z/a_0)2r_1) r_1^2 dr_1 \right\} \\ \times 4Z^3 \exp(-(Z/a_0)2r_2) r_2^2 dr_2$$

eða

$$J_{1s^2} = \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{2a_0} \frac{5}{4} Z = (13.6 \text{ eV}) \times \frac{5}{4} Z$$

- Fyrir helín gefur þetta

$$J_{1s^2}^{Z=2} = 34 \text{ eV}$$

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- $1snl$ röðunin í helíni hefur orkustig sem er nálægt þeim fyrir nl -rafeindina í vetni – það er $1s2p$ röðunin fyrir $2p$ rafeind hefur svipaða bindiorku og $n = 2$ hvelið í vetni
- Augljós skýring væri að, í Bohr líkaninu liggur $2p$ rafeindin utan við $1s$ brautina svo að innri rafeindin skermi þá ytri fyrir fullri helðslu kjarnans
- Ef við beitum sviðuðum rökum í skammtafræðilegri meðferð á helínu fáum við Hamiltonian

$$H = H_{0a} + H'_a$$

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- Hér er

$$H_{0a} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

og

$$H'_a = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right)$$

- Í jöfnunni fyrir H_{0a} finnur rafeind 2 fyrir Coulomb aðdrætti vegna hleðslu $+1e$
- Fyrir H'_a er frádráttur $e^2/4\pi\epsilon_0$ frá fráhrindikraftinum vegna þessa að truflunin stefnir á núll í mikilli fjarlægð frá kjarnanum

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- Ólík meðferð á rafeindunum gerir málið nokkuð flóknara en þetta hefur verið reiknað

$$J_{1snl} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \int \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right) |u_{1s}(1)|^2 |u_{nlm}(2)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$$

- Þetta tegur þarf að reikna með viðeigandi bylgjuföllum, þ.e. $u_{nlm}^{Z=1}$ fremur enn $u_{nlm}^{Z=2}$, og $u_{nlm}^{Z=2}$ eins og áður
- Fyrir örvaða rafeind

$$u_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

þar sem $R_{nl}(r)$ er radíal bylgjufall fyrir $Z = 1$

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- Við ritum þá beina tegrið

$$J_{1snl} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \int_0^\infty J(r_1, r_2) R_{10}^2(r_1) R_{nl}^2(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2$$

þar sem horhnþættirnir eru geymdir í fallinu

$$J(r_1, r_2) \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right) \frac{1}{4\pi} |Y_{lm}(\theta_2, \phi_2)|^2 \\ \times \sin \theta_1 d\theta_1 d\phi_1 \sin \theta_2 d\theta_2 d\phi_2$$

- Til að reikna þetta tegur þarf að rita $1/r_{12}$ á forminu

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{r_2} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^k \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^k Y_{k,q}^*(\theta_1, \phi_1) Y_{k,q}(\theta_2, \phi_2)$$

fyrir $r_2 > r_1$ (og $r_1 \leftrightarrow r_2$ þegar $r_1 > r_2$)

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- Aðeins liðurinn fyrir $k = 0$ lifir af tegrunina yfir hornin og

$$J(r_1, r_2) = \begin{cases} 0 & \text{fyrir } r_1 < r_2 \\ 1/r_1 - 1/r_2 & \text{fyrir } r_1 > r_2 \end{cases}$$

- Þegar $r_1 < r_2$ þá gilda skermunarrökin og

$$H'_a = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right)$$

er góð lýsing

- Þegar $r_1 > r_2$ er mættið í réttu hlutfalli við $-2/r_2 - 1/r_1$ og $J(r_1, r_2)$ tekur tillit til mismunar milli þessa og $-2/r_1 - 1/r_2$ sem er notað í H_{0a}

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd

- Þar með er

$$J_{1snl} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \left\{ \int_{r_2}^\infty \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) R_{10}^2(r_1) r_1^2 dr_1 \right\} R_{nl}^2(r_2) r_2^2 dr_2$$

- Mat á þessu tegri fyrir 1s2p gefur

$$J_{1s2p} = -2.8 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

sem er þremur stærðarþrepum lægra en $J_{1s^2}^{Z=2}$

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd – skiptitegur

- Skiptitegrið er

$$K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \int u_{1s}^*(1)u_{nl}^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} u_{1s}(2)u_{nl}(1) d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3$$

nema hvað nú er $u_{nlm}^{Z=1}$ fremur enn $u_{nlm}^{Z=2}$ (og $u_{1s}^{Z=2}$ eins og áður)

- Meðal bylgjufallanna

$$u_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

er það aðeins radíal þátturinn sem er háður Z

- Við ritum þess vegna skiptitegrið sem

$$K_{1snl} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \int K(r_1, r_2) R_{1s}(r_1) R_{nl}(r_1) R_{1s}(r_2) R_{nl}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2$$

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd – skiptitegur

- Fallið $K(r_1, r_2)$ inniheldur horntegrin og er

$$K(r_1, r_2) = \int \int \int \int \frac{1}{r_{12}} Y_{lm}^*(\theta_1, \phi_1) \frac{1}{4\pi} Y_{lm}(\theta_2, \phi_2) \\ \times \sin \theta_1 d\theta_1 d\phi_1 \sin \theta_2 d\theta_2 d\phi_2$$

- Fyrir 1snp röðina er það aðeins annar liður raðarinnar, með $k = 1$ lifir tegrinina, svo að

$$K(r_1, r_2) = \begin{cases} r_1/3r_2^2 & \text{fyrir } r_1 < r_2 \\ r_2/3r_1^2 & \text{fyrir } r_2 < r_1 \end{cases}$$

Mat á tegrum í helíni – örðuð ástönd – skiptitegur

- Fyrir 1s2p röðina er klofnunin á milli 3P og 1P

$$2K_{1s2p} \simeq 0.21 \text{ eV}$$

sem er nálægt mælda gildinu 0.25 eV

- Það að gera ráð fyrir að rafeindin liggi utan við 1s bylgjufallið er ekki góð nálgun fyrir 1sns röðina þar sem ψ_{ns} hefur endanlegt gildi og aðferðin við að reikna J og K hér að ofan er ekki alveg áreiðanleg
- 1s2s röðun helíns hefur singlet-triplet aðskilnað

$$E(^1S) - E(^3S) = K_{1s2s} \simeq 0.80 \text{ eV}$$

og beina tegrið er einnig stærra en fyrir 1s2p

⇒ Dæmi 3.3

Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 3 hjá Foot (2005).

Heimildir

Foot, C. J. (2005). *Atomic physics*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.