Anvendt kvantemekanikk, oppgave 9.2 med mellomregninger

Ragnhild Tjervåg, Henning F. Hansen og Lars Erik Walle

I denne oppgaven skal utvekslingsintegralet i (9.13) for tilstandene 100 og $2lm = 200$ beregnes og energiforskjellen mellom orto- og parahelium for denne tilstanden finnes.

$$< \psi \mid \hat{H} \mid \psi > = E_1^0 + E_2^0 + \int_0^\infty\!\!\int_0^\infty \mid \psi_{100}(\vec{r_1})\,\psi_{200}(\vec{r_2}) \mid^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \mid \vec{r_2} - \vec{r_1} \mid}\, d^3r_1\, d^3r_2$$
$$\pm \int_0^\infty\!\!\int_0^\infty \psi_{100}^*(\vec{r_1})\,\psi_{200}^*(\vec{r_2})\,\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \mid \vec{r_2} - \vec{r_1} \mid}\,\psi_{100}(\vec{r_2})\,\psi_{200}(\vec{r_1})\, d^3r_1\, d^3r_2$$

Det siste leddet er *utvekslingsenergien* som vi skal se nærmere på. Med bølgefunksjonene $\psi_{100} = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$ og $\psi_{200} = (32\pi a^3)^{-1/2}(2-r/a)e^{-r/a}$, (hvor $a = a_0/Z$, her $Z = 2$), blir "utvekslingsintegralet":

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\pi a^3}\frac{1}{32\pi a^3}\int_0^\infty\!\!\int_0^\infty e^{-r_1/a}\,(2 - r_2/a)\,e^{-r_2/2a}\,\frac{1}{\mid \vec{r_2} - \vec{r_1} \mid}(2 - r_1/a)\,e^{-r_1/2a}\,e^{-r_2/a}\,d^3r_1\,d^3r_2$$
$$= \frac{e^2}{128\pi^3 a^6 \epsilon_0}\int_0^\infty\!\!\int_0^\infty e^{-\frac{3}{2a}(r_1+r_2)}(2 - r_1/a)(2 - r_2/a)\frac{1}{\mid \vec{r_2} - \vec{r_1} \mid}\,d^3r_1\,d^3r_2$$

Vi setter inn

$$\frac{1}{\mid \vec{r_2} - \vec{r_1} \mid} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}}$$

og

$$d^3r_2 = r_2^2 \sin\theta\, dr_2\, d\theta\, d\phi$$

Vinklene integreres ut først

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} = 2\pi\Big[\frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}}{r_1 r_2}\Big]_0^\pi = 2\pi\frac{r_1 + r_2 - |r_2 - r_1|}{r_1 r_2}$$

Den neste integranden er ikke avhengig av noen vinkler, så vi kan sette $d^3r_1 = 4\pi\, r_1^2\, dr_1$ Dermed får vi:

$$\frac{e^2}{128\pi^3 a^6 \epsilon_0}\cdot 2\pi \cdot 4\pi \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{3}{2a}(r_1+r_2)}(2 - r_1/a)(2 - r_2/a)\frac{r_1 + r_2 - |r_2 - r_1|}{r_1 r_2}\, r_1^2\, r_2^2\, dr_1\, dr_2$$

Her har vi en symmetrisk integrand i r_1 og r_2, slik at integralene over området $r_1 \geq r_2$(hvor $r_1 + r_2 - |r_2 - r_1| = 2r_2$) er like stort som integralene hvor $r_1 \leq r_2$. Dermed fås:

$$\frac{e^2}{128\pi^3 a^6 \epsilon_0} \cdot 2\pi \cdot 4\pi \cdot 2 \cdot 2 \int_0^\infty dr_2 \int_{r_2}^\infty e^{-\frac{3}{2a}(r_1+r_2)} (2 - r_1/a)(2 - r_2/a)\, r_1 \, r_2^2 \, dr_1$$
$$= \frac{e^2}{4\pi a^6 \epsilon_0} \int_0^\infty r_2^2 \,(2 - r_2/a)\, e^{-\frac{3}{2a} r_2} \, dr_2 \int_{r_2}^\infty r_1 (2 - r_1/a) e^{-\frac{3}{2a} r_1} \, dr_1$$

Vi ser nærmere på det siste integralet, som med bruk av delvis integrasjon blir:

$$\int_{r_2}^\infty e^{-\frac{3}{2a} r_1} r_1 (2 - r_1/a)\, dr_1 = 2 \int_{r_2}^\infty r_1 e^{-\frac{3}{2a} r_1} \, dr_1 - \frac{1}{a} \int_{r_2}^\infty r_1^2 e^{-\frac{3}{2a} r_1} dr_1$$
$$= 2 \int_{r_2}^\infty r_1 e^{-\frac{3}{2a} r_1} dr_1 - \frac{1}{a} \Big\{ \Big[-\frac{2a}{3} r_1^2 e^{-\frac{3}{2a} r_1} \Big]_{r_2}^\infty + \frac{4a}{3} \int_{r_2}^\infty r_1 e^{-\frac{3}{2a} r_1} \, dr_1 \Big\}$$
$$= \frac{2}{3} \int_{r_2}^\infty r_1 e^{-\frac{3}{2a} r_1} \, dr_1 - \frac{1}{a} \Big(\frac{2a}{3} r_2^2 \, e^{-\frac{3}{2a} r_2} \Big)$$
$$= \frac{2}{3} \Big(\Big[-\frac{2a}{3} r_1 e^{-\frac{3}{2a} r_1} \Big]_{r_2}^\infty + \frac{2a}{3} \int_{r_2}^\infty e^{-\frac{3}{2a} r_1} dr_1 \Big) - \frac{2}{3} r_2^2 e^{-\frac{3}{2a} r_2}$$
$$= \frac{4a}{9} r_2 e^{-\frac{3}{2a} r_2} + \frac{8a^2}{27} e^{-\frac{3}{2a} r_2} - \frac{2}{3} r_2^2 e^{-\frac{3}{2a} r_2} = \underline{\frac{2}{27} e^{-\frac{3}{2a} r_2} \,(6ar_2 + 4a^2 - 9r_2^2)}$$

Vi setter dette inn i vårt opprinnelige uttrykk og får:

$$\frac{e^2}{4\pi a^6 \epsilon_0} \frac{2}{27} \int_0^\infty r_2^2 (2 - r_2/a)(6ar_2 + 4a^2 - 9r_2^2) e^{-\frac{3}{a} r_2} \, dr_2$$
$$= \frac{e^2}{54\pi a^6 \epsilon_0} \Big(8a^2 \int_0^\infty r_2^2 e^{-\frac{3}{a} r_2} \, dr_2 + 8a \int_0^\infty r_2^3 e^{-\frac{3}{a} r_2} \, dr_2 - 24 \int_0^\infty r_2^4 e^{-\frac{3}{a} r_2} \, dr_2 + \frac{9}{a} \int_0^\infty r_2^5 e^{-\frac{3}{a} r_2} \, dr_2 \Big)$$

Generelt gjelder:

$$\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

Dermed får vi:

$$\frac{e^2}{54\pi a^6 \epsilon_0} \Big(8a^2 \frac{2a^2}{27} + 8a \frac{2a^4}{27} - 24 \frac{8a^5}{81} + \frac{9}{a} \frac{40a^6}{243} \Big) = \underline{\frac{4e^2}{729\pi a \epsilon_0}}$$

der $a = a_0/Z$. For helium har vi $Z = 2$. Energiforskjellen mellom orto- og parahelium for denne tilstanden blir følgelig 2 ganger verdien til utvekslingsintegralet, det vil si <u>2.4 eV</u>. Eksperimentelt er forskjellen målt til ca. 0.8 eV