ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΕΠΙ ΤΩΝ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ

(α) Ὑδρογονοειδὲς ἄτομο ἐντὸς σταθεροῦ ἠλεκτρικοῦ πεδίου

Ἀναφερόμεθα στὸ Σχῆμα 1. τῆς σελ. 61
Ἡ Χαμιλτονιανὴ τοῦ συστήματος εἶναι

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla^2(1) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2(2) - \frac{Ze^2}{r_{12}} + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) \qquad (1)$$

ὅπου $V_1(\vec{r}_1)$ εἶναι ἡ δυναμικὴ ἐνέργεια τοῦ σωματιδίου 1 στὸ σημεῖο $\vec{r}_1$ καὶ $V_2(\vec{r}_2)$ ἡ δυναμικὴ ἐνέργεια τοῦ σωματιδίου 2 στὸ σημεῖο $\vec{r}_2$. Συμβολίζουμε μὲ $\vec{E}$ τὸ ἠλεκτρικὸ πεδίο. Ἡ δύναμις ἡ ὁποία ἀσκεῖται ἐπὶ φορτισμένου σωματιδίου λόγω τοῦ πεδίου $\vec{E}$ εἶναι κατὰ τὰ γνωστὰ

$$\vec{F} = \vec{E}q = -\nabla V \qquad (2)$$

ὅπου q τὸ φορτίο ($+$ ἢ $-$). Μὲ τὴν προϋπόθεση ὅτι τὸ πεδίο $\vec{E}$ εἶναι σταθερὸ λύνουμε κατ' εὐθεῖαν τὴν διαφορικὴ ἐξ. (2)

$$V = -q\vec{E}\cdot\vec{r} + V(0) \qquad (3)$$

(Ἡ (3) εἶναι προφανὴς διότι: Ἐὰν ἡ διεύθυνσις τοῦ πεδίου καθορίζῃ τὴν κατεύθυνση z τότε ἡ ἐξ. (2) γράφεται
$\vec{E}q = \hat{e}_z Eq = -\nabla V \Rightarrow Eq = -\frac{\partial V}{\partial z} \Rightarrow V = -qEz + V(0)$)
Ἡ ποσότης $V(0)$ εἶναι σταθερὰ καὶ δίχως βλάβη τῆς γενικότητος μποροῦμε νὰ θέσουμε $V(0) = 0$. Ἄρα ἡ (1) γράφεται:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla^2(1) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2(2) - \frac{Ze^2}{r_{12}} - Ze\vec{E}\cdot\vec{r}_1 + e\vec{E}\cdot\vec{r}_2 \qquad (4)$$

e τὸ φορτίο τοῦ ἠλεκτρονίου, > 0. Ἐὰν τώρα ἀνάγουμε τὸ τό πρόβλημα σέ "κίνηση ἑνός σωματιδίου", δηλ. κάνουμε τόν μετασχηματισμό συντεταγμένων ὅπως ἔγραψα στήν σελ. 61 καταλήγουμε στήν Χαμιλτωνιανή (13α) τῆς σελ. 64, δηλ.

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_T(\vec{R}) + \hat{\mathcal{H}}_I(\vec{r}) \qquad (5)$$

ὅπου

$$\hat{\mathcal{H}}_T(R) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_R^2 + (1-Z)e\vec{E}\cdot\vec{R} \qquad (6)$$

"μεταφορᾶς" , $m = m_1 + m_2$

$$\hat{\mathcal{H}}_I(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{Ze^2}{r} + e\left\{1 + \frac{m_2}{m}(Z-1)\right\}\vec{E}\cdot\vec{r} \qquad (7)$$

"ἐσωτερική"

Ἀπό τήν Χαμιλτωνιανή $\hat{\mathcal{H}}_T$ βλέπουμε ὅτι τό φορτισμένο (θετικώς) ὑδρογονοειδές ἄτομο ἐπιταχύνεται λόγω τοῦ $\vec{E}$ κάτι τό ὁποῖο αναμένετο. Γιά οὐδέτερο ἄτομο ὑδρογόνου, $Z=1$, παρατηροῦμε ὅτι ἡ κίνησις τοῦ κέντρου βάρους δέν ἐπηρεάζεται ἀπό τήν παρουσία τοῦ ἠλεκτρικοῦ πεδίου, ἡ δέ $\hat{\mathcal{H}}_I$ μετασχηματίζεται στήν

$$\hat{\mathcal{H}}_I = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + e\vec{E}\cdot\vec{r} \qquad (8)$$

Ξαναγράφουμε τήν (8)

$$\hat{\mathcal{H}}_I = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}^{(1)}, \text{ μέ } \hat{\mathcal{H}}^{(1)} = e\vec{E}\cdot\vec{r} = e|\vec{E}|z \qquad (9)$$

ἐάν θεωρήσουμε ὅτι ἡ διεύθυνσις τοῦ πεδίου $\vec{E}$ καθορίζει τόν ἄξονα τῶν z. Προφανῶς ἡ $\hat{\mathcal{H}}_0$ καθορίζει τό ἀδιατάρακτο πρόβλημα τό ὁποῖο εἶναι τό ἄτομο τοῦ ὑδρογόνου δίχως ἠλεκτρικό πεδίο. Σέ πολικές σφαιρικές συντεταγμένες

$$\hat{\mathcal{H}}^{(1)} = e|\vec{E}|z = e|\vec{E}|r\cos\theta \qquad (10)$$

Θεωροῦμε τὴν διόρθωση πρώτης τάξεως, $E_0^{(1)}$ τῆς θεμελιώδους καταστάσεως

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \Psi_0^{(0)} \rangle = e|\vec{E}| \langle \Psi_0^{(0)} | r\cos\theta | \Psi_0^{(0)} \rangle = 0$$

Ἄρα πρέπει νά προχωρήσουμε στήν $E_0^{(2)}$ ἐάν θέλουμε νά διορθώσουμε τήν ἐνέργεια. Σύμφωνα μέ τήν ἐξ. (48) τῆς σ. 217 ἀπαιτεῖται ἡ $\Psi_0^{(1)}$, δηλ. πρέπει νά λυθῇ ἡ

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_0^{(0)})\Psi_0^{(1)} = -\hat{\mathcal{H}}^{(1)}\Psi_0^{(0)} + \underset{0}{\cancel{E_0^{(1)}}}\Psi_0^{(0)}$$

ἤ

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_0^{(0)})\Psi_0^{(1)} = -\hat{\mathcal{H}}^{(1)}\Psi_0^{(0)} \qquad (11)$$

Ἡ (11) συμβαίνει νά λύνεται ἀκριβῶς, δηλ. δέν χρειάζεται νά ἐφαρμόσουμε τήν μέθοδο Rayleigh–Schrödinger. Ἡ λύσις εἶναι λίγο περίπλοκη καί παραθέτουμε ἀπ' εὐθείας τό ἀποτέλεσμα

$$\Psi_0^{(1)} = -\sqrt{\frac{4a}{3}}\,\frac{|\vec{E}|}{e}\,\xi(1+\xi/2)\,e^{-\xi}\,Y_{10}(\theta,\phi) \qquad (12)$$

ὅπου $\xi = r/a$, $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ καί $Y_{10}(\theta,\phi)$ οἱ σφαιρικές ἁρμονικές $l=1$, $m=0$. Ἄρα σύμφωνα μέ τήν ἐξ. (49) τοῦ προηγουμένου κεφαλαίου

$$E_0^{(2)} = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \Psi_0^{(1)} \rangle$$

$$= -\sqrt{\frac{4a}{3}}\,\frac{|\vec{E}|}{e}\left\langle \xi(1+\xi/2)e^{-\xi}Y_{10} \middle| e|\vec{E}|a\xi\cos\theta \middle| \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\xi} \right\rangle$$

$$= -\sqrt{\frac{4}{3\pi}}\,|\vec{E}|^2\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left\langle \xi(1+\xi/2)e^{-\xi}\cos\theta \middle| \xi\cos\theta \middle| e^{-\xi} \right\rangle, \quad \text{ἤ}$$

$$E_0^{(2)} = \frac{|\vec{E}|^2}{\pi} a^3 \int_0^\infty d\xi\, \xi^4 \left(1+\frac{\xi}{2}\right) \int_\Omega d\Omega(\theta,\varphi) \cos^2\theta \,, \quad \text{ἤ}$$

$$E_0^{(2)} = -\frac{9}{4} a^3 |\vec{E}|^2 \qquad (13)$$

Παρατηροῦμε κατ' ἀρχὰς ὅτι $E_0^{(2)} < 0$ ὅπως πρέπει.
Τώρα ἡ E_0 τοῦ ἀτόμου τοῦ ὑδρογόνου ἐντὸς σταθεροῦ ἠλεκτρικοῦ πεδίου ἐντάσεως $|\vec{E}| \equiv E$ ὡς πρὸς διόρθωση 2ας τάξεως εἶναι

$$E_0 = E_0^{(0)} + \underbrace{\cancel{E_0^{(1)}}}_{0} + E_0^{(2)} = -\frac{e^2}{2a} - \frac{9}{4} a^3 |\vec{E}|^2 \qquad (14)$$

Ἡ πολωσιμότης α συστήματος (ἱκανότης πρὸς πόλωσιν) ὁρίζεται ὡς ἡ δεύτερη παράγωγος τῆς ἐνεργείας ὡς πρὸς τὸ πεδίον τὸ ὁποῖο προκαλεῖ τὴν πόλωση, ἐδῶ τὸ πεδίο $|\vec{E}| = E$, ἄρα

$$\alpha \equiv -\frac{\partial^2 E_0}{\partial E^2} = \frac{9}{2} a^3 \qquad (15)$$

Ἡ σχέσις (15) μᾶς λέει ὅτι ἡ α εἶναι ἀνάλογη τοῦ ὄγκου τοῦ συστήματος ("ἠλεκτρονιακοῦ" ὄγκου) κάτι τὸ ὁποῖο ἐπιβεβαιώνεται ἀπὸ τὶς μετρήσεις.
Ὑπολογίζουμε καὶ τὴν τρίτης τάξεως ἐνέργεια διαταράξεως, $E_0^{(3)}$. Σύμφωνα μὲ τὴν (53), σ. 220 ἔχουμε

$$E_p^{(3)} = \langle \psi_p^{(1)} | (\hat{H}^{(1)} - E_0^{(1)}) | \psi_0^{(1)} \rangle = \langle \psi_0^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_0^{(1)} \rangle$$

διότι $E_0^{(1)} = 0$. Ἡ τελευταία λόγω τῆς (12) γράφεται

$$E_0^{(3)} = \left\langle -\sqrt{\frac{4a}{3}}\,\frac{E}{e}\,\xi\left(1+\frac{\xi}{2}\right)e^{-\xi}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \,\middle|\, eE\xi a \,\middle|\, -\sqrt{\frac{4a}{3}}\,\frac{E}{e}\,\xi\left(1+\frac{\xi}{2}\right) \times e^{-\xi}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \right\rangle$$

$$= \frac{4a}{3}\left(\frac{E}{e}\right)^2 \frac{3}{4\pi}\, eEa \int_0^\infty d\xi\, \xi^2 a^2\, \xi^2 \left(1+\frac{\xi}{2}\right)^2 e^{-2\xi}\, \xi \int_\Omega d\Omega(\theta,\varphi)\cos^2\theta$$

$$E_0^{(3)} = \frac{4}{3}\,\frac{a^5E^3}{e} \times \left(\frac{5!}{2^6} + \frac{7!}{2^{10}} + \frac{6!}{2^7}\right) = \underline{16.563\,\frac{a^5E^3}{e}} \quad (16)$$

Ans

$$E_0 = E_0^{(0)} + \underbrace{\cancel{E_0^{(1)}}}_{0} + E_0^{(2)} + E_0^{(3)} = -\frac{e^2}{2a} - \frac{9}{4}a^3|\vec{E}|^2 + 16.563\,\frac{a^5|\vec{E}|^3}{e}$$