VI. HELYUM ATOMU :

Helyum atomu için Hamilton operatörü aşağıdaki formda verilir:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_1^{\,2}}{2m} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^{\,2}}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Bu Hamilton operatörünün yazılması sırasında çekirdeğin hareketinin etkisi, spin-yörünge etkileşmeleri gibi birtakım etkileşmeler ihmal edilmiştir. Hamilton operatöründeki terimlere bakalım.

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\vec{p}}_1^{\,2}}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1}$$ Hidrojen atomu için Hamilton op.

$$\hat{H}_2 = \frac{\hat{\vec{p}}_2^{\,2}}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2}$$ Hidrojen atomu için Hamilton op.

$$\hat{H}_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$ Elektronlar arası etkileşme terimi

Görüldüğü gibi Helyum atomu için Hamilton op. basitleştirilmiş şekliyle, iki adet Hidrojen atomu Hamiltoniyeni ve elektronlar arası etkileşme Hamiltoniyeneninden oluşur.

Helyum atomu için taban durum enerjisini hesaplayalım:

$\hat{H}_{12} = \dfrac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ terimi ihmal edilirse enerji iki adet Hidrojen atomunun enerjileri toplamına eşittir. Buna göre,

$$E_{n,m} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0}\left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{m^2}\right) \Rightarrow E_{1,1} = -\frac{Z^2 e^2}{a_0}$$

şeklinde olur. $\hat{H}_{12}$ teriminin katkısını pertürbasyon teorisi çerçevesinde hesaplayabiliriz.

1.mertebe pertürbasyon katkısını belirleyelim.

$$\Delta E^1 = \langle \psi_0 | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \psi_0 \rangle$$

$$\Delta E^1 = \int\int dr_1^{\,3} dr_2^{\,3} |u_{100}(\vec{r}_1)|^2 |u_{100}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Dalga fonksiyonlarını integralde yerine yazarsak ve küresel koordinatları kullanırsak,

$$\Delta E^1 = \int\int dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2 r_1^2 r_2^2 \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1\, r_2 \cos\gamma}} \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) \exp(-\frac{2Zr_2}{a_0})$$

Eksenleri z-ekseni $\vec{r}_1$ vektörüyle çakışacak şekilde döndürürsek integral aşağıdaki forma dönüşür:

$$\Delta E^1 = \frac{8e^2 Z^6}{a_0^6} \int\int dr_1 dr_2 du\; r_1^2 r_2^2 \frac{1}{\sqrt{u}} \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) \exp(-\frac{2Zr_2}{a_0})$$

$$= \frac{8e^2 Z^6}{a_0^6} \int_0^\infty dr_1\; r_1 \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) \left\{ -2\int_0^{r_1} r_2^{\,2} \exp(-\frac{2Zr_2}{a_0}) dr_2 \right.$$

$$\left. - 2r_1 \int_{r_1}^\infty r_2 \exp(-\frac{2Zr_2}{a_0}) dr_2 \right\}$$

İntegralin değeri hesaplanırsa

$$\Delta E^1 = \frac{5Ze^2}{8a_0}$$

olarak bulunur. Buna göre Helyum atomu için taban durum enerjisi

$$E_{1,1} = -\frac{Z^2 e^2}{a_0} + \frac{5Ze^2}{8a_0}$$

Şeklindedir.

KAYNAKLAR:

*Kuantum Mekaniği Temel Kavramlar ve Uygulamaları,

T. Dereli ve A. Verçin, Türkiye Bilimler Akademisi Ders Kitapları, Türkiye 2014.

*Quantum Physics, S. Gasiorowicz , Wiley, New York 1976.