Polarizabilnost vodikovega atoma

Izračunali bomo polarizabilnost vodikovega atoma in na grobo ocenili dielektričnost trdne snovi sestavljene iz atomov vodika.
Zunanje električno polje naj bo orientirano v smer z, $\mathbf{E} = E\hat{e}_z$, kar nam prinese dodaten člen H' k hamiltonjanu

$$H = H_0 + H' = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eEz$$

Osnovno stanje nemotenega vodikovega atoma opisuje valovna funkcija

$$\psi_0 = \frac{2}{r_B^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}e^{-\frac{r}{r_B}}$$

predpostavimo, da je valovna funkcija osnovnega stanja z dodatnim električnim poljem oblike

$$\psi = A\psi_0(1 + \gamma z)$$

kjer je $A = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2 r_B^2}}$. Sedaj z variacijskim principom izračunamo vrednost faktorja γ.

$$< \psi|H|\psi > \geq \widetilde{E}_0$$

$$< \psi_0 + \psi_0\gamma z|H_0 + H'|\psi_0 + \psi_0\gamma z >=$$

$$\begin{aligned} =< \psi_0|H_0|\psi_0 > + < \psi_0|H_0|\psi_0\gamma z > \quad &+ \quad < \psi_0| - eEz|\psi_0 > + < \psi_0| - eEz|\psi_0\gamma z > + \\ + < \psi_0\gamma z|H_0|\psi_0\gamma z > + < \psi_0\gamma z|H_0|\psi_0 > \quad &+ \quad < \psi_0\gamma z| - eEz|\psi_0\gamma z > + < \psi_0\gamma z| - eEz|\psi_0 > \end{aligned}$$

Iz kvantne mehanike vemo da je parnost funkcij $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ kar enaka $p = (-1)^l$, integral oblike $\int \psi^*_{nlm} z \psi_{n'l'm'} d^3\mathbf{r}$ ima parnost $p = (-1)^l(-1)(-1)^{l'} = (-1)^{l+l'+1}$, integral funkcije z liho parnostjo po celotnem območju pa je enak nič. Zato so tretji, šesti ina pa sedmi člen enaki nič. Za to da bomo videli da sta drugi in pa peti člen enaka nič moramo izračunati $\gamma H_0|\psi_0 z >$. $z = r\cos\vartheta$ v krogelnih koordinatah, H_0 pa je

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Vemo da je $\hat{l}^2|Y_{lm} >= \hbar^2 l(l+1)|Y_{lm} >$ in $\cos\vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}$. Na koncu dobimo

$$< \psi|H|\psi >= \frac{E_0 - 2eE\gamma r_B^2}{1 + \gamma^2 r_B^2} = \widetilde{E}_0$$

kar nam prinesejo prvi in pa četrti ter osmi člen. Zdaj odvajamo zgornjo enačbo po γ, ker iščemo minimum $\widetilde{E}_0$.

$$\frac{\partial}{\partial\gamma} < \psi|H|\psi >= \frac{\partial}{\partial\gamma}(\frac{E_0 - 2eE\gamma r_B^2}{1 + \gamma^2 r_B^2}) = 0$$

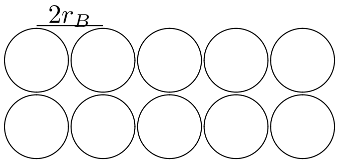
$$\gamma = \frac{E_0 \pm \sqrt{E_0^2 + 4e^2E^2r_B^2}}{2eEr_B^2}$$

Izračunajmo električni dipolni moment molekule vodika

$$p = -e\int \psi^* z\psi d^3\mathbf{r} = -e\int 2\psi_0^2\gamma z^2 = -2\gamma e r_B^2$$

ki je tudi enak $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}$, kjer je α polarizabilnost.

$$\alpha = 16\pi\epsilon_0 r_B^3$$



Polarizacija vodikove trdne snovi take strukture bi bila

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V}\sum_i \alpha E_i = \frac{N}{V}\alpha E$$

kjer je N število atomov, $V = 8r_B^3$ pa je volumen osnovne celice. Iz tega izračunamo susceptibilnost in pa dielektrično konstanto.

$$\chi = \epsilon - 1 = \frac{1}{\epsilon_0}\frac{\partial P}{\partial E}$$