ศักย์ยังผลของอะตอมอัลคาไล

นายวิชิต ศรีตระกูล

004694

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
แผนกวิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย
๒๕๒๐

I 17558761

THE EFFECTIVE POTENTIAL OF AN ALKALI ATOM

Mr.Wichit Sritrakool

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1977

Thesis Title	The effective Potential of an Alkali Atom
by	Mr. Wichit Sritrakool
Department	Physics
Thesis Advisor	Associate Professor Virulh Sayakanit

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial fulfillment of the requirements for the Master's degree.

.....Dean of Graduate School

(Professor Visid Prachuabmoh, Ph.D.)

Thesis Commitee

.....Chairman

(Anantasin Tachagumpuch, Ph.D.)

.....Member

(Assistant Professor Wijit Senghaphan, Ph.D.)

.....Member

(I-Ming Tang, Ph.D.)

.....Member

(Associate Professor Virulh Sayakanit, F.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

Thesis Title	The Effective Potential of an Alkali Atom
By	Mr. Wichit Sritrakool
Department	Physics
Thesis Adviser	Associate Professor Virulh Sayakanit
Academic Year	1977

ABSTRACT

The effective potential of Li atom is constructed by using the Bohr-Sommerfeld quantization rule. An analytical form of the effective potential which is similar to that of Sodium atom is found. The potential is compared with the well-known numerical Li Potential given by Seitz. The atomic energy levels reproduced from our potential are computed by using the Quantum Defect Method for alkali Rydberg states given recently by Jaffé and Reinhardt. The results obtained are not as good as those obtained by using the Seitz's potential; but when the polarization correction term is considered, good results for outer energy levels are obtained.

The effective potential of Sodium atom is reconstructed and is tested by the same procedure as that applied to Lithium. The ground state energy level of Sodium is also calculated quantum mechanically and it is found that the result deviates from the experimental value only by 0.3 % while the Prokofjew's Sodium potential gives an error of about 0.9 % .

The applications of an effective potential to problems in solid state physics and some improvement upon the potential are also discussed.

หัวข้อวิทยานิพนธ์	ศักย์ยังผลของอะตอมอัลคาไล
ชื่อนิสิต	นายวิชิต ศรีตระกูล
แผนกวิชา	ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายคณิต
ปีการศึกษา	๒๕๒๐

หอสมุดกลาง จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

ศักย์ยังผลของอะตอมลิเธียม ถูกสร้างขึ้นโดยอาศัยกฎควอนไตเซชันของบอห์ร-ซอมเมอร์เฟลด์ ศักย์ยังผลนี้สามารถเขียนในรูปสมการได้เช่นเดียวกับศักย์ยังผลของอะตอมโซเดียม เมื่อนำเอาไปคำนวณระดับพลังงานต่างๆ โดยวิธีการของเจฟเฟกับเรนยาดท์ ที่เรียกว่า ควอนตัมดีเฟคท์สำหรับสถานะอัลคาไลริดเบอร์ก พบว่าได้ผลด้อยกว่าผลที่ได้ เมื่อใช้ศักย์ยังผลตัวเลขของลิเธียมที่มีชื่อเสียงของไซท์ซ แต่เมื่อใส่พจน์แก้โปลาไลเซชันแล้ว จะทำให้ ผลการคำนวณระดับพลังงานชั้นนอกๆดีขึ้น

ศักย์ยังผลของโซเดียมถูกสร้างใหม่อีกครั้งหนึ่ง แล้วถูกนำไปทดสอบด้วยวิธีการเช่นเดียวกับที่ใช้กับลิเธียม นอกจากนี้ ยังได้คำนวณระดับพลังงานของสถานะต่ำสุดของอะตอมโซเดียม โดยวิธีการทางกลศาสตร์ควอนตัม พบว่า ผลการคำนวณได้ผลต่างจากผลที่ได้จากการทดลองเพียง ๐.๓ เปอร์เซ็นต์ ในขณะที่ศักย์ยังผลของโซเดียมที่สร้างขึ้นโดยโปรโคฟจิว ให้ผลผิดพลาดถึง ๐.๔ เปอร์เซ็นต์

การประยุกต์ศักย์ยังผลต่อปัญหาต่างๆทางฟิสิกส์ของแข็ง และการปรับปรุงศักย์ยังผล จะถูกนำมากล่าวด้วย

ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his appreciation to Dr. Virulh Sayakanit for his advice, guidance and encouragement given throughout the course of investigation.

He would like to express his sincere thanks to Dr.I-Ming Tang for assistance in suggestion the thesis outline and correcting the English manuscript.

He is indebted to Dr. Sombat Charoenwong for assistance in translating the German Prokofjew's paper into Thai.

Finally, appreciation is extended to the University Development Commission of National Council and the Graduate School of Chulalongkorn University for providing the scholaships to support the author for the period of his studies.

TABLE OF CONTENTS

page

ABSTRACT..... iv

ACKNOWLEDGEMENTS..... vi

TABLE OF CONTENTS..... vii

LIST OF TABLES..... ix

LIST OF FIGURES..... x

CHAPTER I INTRODUCTION..... 1

CHAPTER II THE BOHR-SOMMERFELD QUANTIZATION RULE..... 5

2.1 Old Quantum Theory Approach..... 5

2.2 The WKB Approach..... 10

2.3 The Generalized Bohr-Sommerfeld Quantization Rule..... 16

CHAPTER III THE QUANTUM DEFECT METHOD..... 19

3.1 Introduction..... 19

3.2 Fundamental Features..... 19

3.3 Relation of the Quantum Defect to the Effective Potential..... 22

CHAPTER IV CONSTRUCTION OF THE EFFECTIVE POTENTIAL..... 29

4.1 Solution of the Radial Wave Equation..... 29

4.2 Asymptotic Survey..... 32

4.2.1 Potential near the Nucleus..... 32

4.2.2 Potential outside the Ion Core..... 32

4.2.3 Potential between the Two Regions..... 33

page

4.3 The Procedure..... 33

4.3.1 Outside the Ion Core..... 33

4.3.2 The Matching..... 35

4.3.3 Region near the Nucleus..... 40

4.3.4 Constructed Parts without Data..... 41

CHAPTER V DATA AND RESULTS..... 42

5.1 Energy Spectra..... 42

5.2 Na Effective Potentials..... 42

5.2.1 The Prokofjew's potential..... 42

5.2.2 The Newly Constructed Na potential..... 42

5.2.3 The Na Potential with Polarization..... 47

5.3 Li Effective Potentials..... 48

5.3.1 The Seitz's Potential..... 48

5.3.2 The Newly Constructed Li Potential..... 48

5.3.3 The Li Potential with Polarization..... 49

5.4 Potential Testings..... 51

5.4.1 By Using the QDH..... 51

5.4.2 By Using Quantum Mechanical Method... 55

CHAPTER VI DISCUSSIONS..... 62

REFERENCES..... 66

APPENDICES..... 69

VITA..... 85

LIST OF TABLES

Table page

5.1 Energy spectra, $\epsilon_{nl}(exp)$, of the alkali series..... 43

5.2 The Prokofjew's Na potential..... 44

5.3 The constructed Na potential..... 47

5.4 The constructed Na potential with polarization..... 47

5.5 The Seitz's Li potential..... 48

5.6 The constructed Li potential..... 49

5.7 The constructed Li potential with polarization..... 51

5.8 Energy levels reproduced from constructed Na potentials..... 52

5.9 Energy levels reproduced from constructed Li potentials..... 53

5.10 The wave function for $\epsilon_{3d} = .3800$ rydberg by using the Prokofjew's Na potential..... 57

5.11 The wave function for $\epsilon_{3d} = .3815$ rydberg by using the Prokofjew's potential..... 58

5.12 The wave function for $\epsilon_{3d} = .37889$ rydberg by using the constructed Na potential..... 60

5.13 The wave function for $\epsilon_{3d} = .37895$ rydberg by using the constructed Na potential..... 61

B.1 Integration program..... 72

B.2 User instructions for Simpson's integration formula..... 73

C.1 Parameter determination program..... 75

C.2 Instructions for calculating ρ_{min}..... 76

C.3 Instructions for determining parameters..... 78

D.1 Program for the matching functions..... 80

D.2 User instructions for calculating matching functions..... 81

LIST OF FIGURES

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Figure		page
2.1	Phase plane of the harmonic oscillator	6
2.2	Phase plane of the rotator	9
2.3	A typical linear turning point	13
2.4	One dimensional potential well	13
4.1	Diagram for constructing $Q(\rho)$	35
5.1	The constructed Na potential against the Prokofjew's potential	46
5.2	The constructed Li potential against the Seitz's potential	50
5.3	The wave functions reproduced from the Prokofjew's Na potential and from the constructed Na potential	59