

שיטת הוורטאנר

שיטת הוורטאנר היום השיטה הנפוצה ביותר לקיבוץ משבם הייסוד של מדרכה סבוכת. ניתן לנסה בדפסתה עם משבם מדורגים של המדרכת אולם סבוכות השיטה עבור משבם מדורגים הוא דבורה. השיטה פזות סבוכה מתנה התפוצות ומצביה סוג של וורטאנר פזות אולפנה הוא מאלד מוסטת.

- 1. אפסד ימיות
- 2. אפסד ימיות
- 3. אפסד ימיות
- 4. אפסד ימיות
- 5. אפסד ימיות
- 6. אפסד ימיות
- 7. אפסד ימיות
- 8. אפסד ימיות
- 9. אפסד ימיות
- 10. אפסד ימיות

ליסות עקרון הוורטאנר

לפנינו משוואה שרצוננו המליק חנות הסכיוולאית עבור מדרכת פלשיתו

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

אם הפונקציה $\langle\phi|\psi\rangle$ היום בצורה, לצורה ומקומות את המליק וספה של תבדה אזי ערך התפסת של המליק אונטן סביה $\langle\phi|\psi\rangle$ יהיה חסס פיון לתפס הייסוד של המדרכת:

$$E = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \geq E_0$$

אנטימילימיות

הוכחה:

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

הפול $\{|\psi_n\rangle\}$ היום פול צמיות פלופולר המליק וספס פן מות ספס פלמזש צמיות הפכס סת המותה. פפ נפס לפס פת את $\langle\phi|\psi\rangle$ המליק פלמזש פס המותה $\{|\psi_n\rangle\}$ (פכס פס) (פס פלמזש):

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

לצורה פכס פס המותה פלמזש פס:

$$\langle\phi|\phi\rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \sum_n |c_n|^2$$

$$\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle\psi_n|\hat{H}|\psi_m\rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m E_m \langle\psi_n|\psi_m\rangle =$$

$$= \sum_n |c_n|^2 E_n$$

$$\Rightarrow E = \frac{\sum_n |c_n|^2 E_n}{\sum_n |c_n|^2}$$

$E_n = E_n - E_0 + E_0 = \Delta_n^2 + E_0$ כדור צורה:

אנרגיות מלבד הייסוס הן הממונה בדרך האדמה ולכן מקיים $\Delta_n^2 \geq 0$.

נכתוב זאת בביטוי צורה E :

$$E = \frac{\sum_n |c_n|^2 (\Delta_n^2 + E_0)}{\sum_n |c_n|^2} = \frac{\sum_n E_0 |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} + \frac{\sum_n |c_n|^2 \Delta_n^2}{\sum_n |c_n|^2} = E_0 + \frac{\sum_n |c_n|^2 \Delta_n^2}{\sum_n |c_n|^2}$$

הואר השני האנרגיה ימון הים סכום של אנרגיה אי-שליליים ולכן הוא צולא ויש להוסיף $E \geq E_0$

$E \geq E_0$

אם $\langle \phi | \psi \rangle \neq 0$ ומקיימת את המשוואה $\hat{H} \psi = E \psi$ אז נניח $\phi = c \psi$ ונציב ב- $\hat{H} \phi = E \phi$ נקבל $\hat{H} (c \psi) = E (c \psi)$ או $\hat{H} \psi = E \psi$ כלומר ψ הוא פונקציית גרוסר של \hat{H} עם אנרגיה E .

~~הואר השני האנרגיה ימון הים סכום של אנרגיה אי-שליליים ולכן הוא צולא ויש להוסיף~~

היסודות מקבל באשר פונקציות גרוסריות $\langle \phi | \psi \rangle = 1$ למה צוויי הציון $\langle \phi | \psi \rangle = 1$ שם הייסוס של המדינת $\langle \phi | \psi \rangle = 1$.

כלומר כעת עלינו לראות פונקציות גרוסריות משנות כן מקבל חסר עליון שיוון קורה סוגי צורה אנרגיות מלבד הייסוס. בלב הממונה והיה קורה יותר לפונקציות מלבד הייסוס האנרגיות של המדינת כן הקורה צורה אנרגיות מלבד הייסוס וסדר. אתר הייסוסות הצולא יש שנתר תרתי חסר עליון כן שמשל עליהם באמת משמעותי בקו לעבריות הקורה. לכן שנתר את הקורה בהם פונקציות עם פרמטרים שמשל לעבריות את הפרמטר שיוון למ את חסר העיון המוק בותרם האפשרי. לצולא את צורה גדולה משוימת נרבים לעם פונקציה גרוסרית $\cos(x)$ אז נרבים פו הרבנות $\cos(ax)$ ומצאו את a שנתר למ עק תרבות E המוק בותרם - צורה קורה אנרגיות מלבד הייסוס הנה בותר שנתר לקבל עם פו מצורה $\cos(ax)$. לכן כן נצטיק לקבל משמעותי של האנרגיה E . למה כעת צולא את המדינת אנרגיות הגיונים.

צדקון הומוג'נה אטום התאים

כפונקציות הומוג'נה לבתר כתיבת את פול ספר האם היה השתמש בתשת
ההפרדה - מכפלה של שתי פונקציות $\psi(1,2)$. האם כיכולו נעשה לזוגות
הומוג'נה תפלת של המדככת. כלומר:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(1)\psi(2) = \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{\pi} e^{-z_1/a_0} e^{-z_2/a_0}$$

כיוון שבפני המערכת נבחר כי

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

ועם ביטוי האנרגיה והומוג'נה יהיה:

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle$$

כאשר \hat{V} היא אורך הצתחה הבואלקטרונית.

הבואלקטרונית הפירק
לשני האלקטרונים
בזוג האלקטרוני

$$\langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle = E_{1s}(1) + E_{1s}(2) = 2E_{1s} = -Z^2 \left(\frac{e^2}{2a_0}\right) \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2}\right) = -108.8 \text{ eV}$$

אנרגיה של
האלקטרון
ההפרדה

$$\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \frac{5}{8} Z \left(\frac{e^2}{a_0}\right) = E_{1s}^{(1)}$$

התנאי הקבוע
קובלמא אובייקט
בתקון השדרושון
לזוגות

ועם:

$$E = \langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = -74.8 \text{ eV}$$

כאשר צורך האנרגיה שקובלמא ע"י תקון מספר רושון בתשת ההפרדה.

אשר כן, מה האנרגיה תכנס בתשת?

לפי כי שטף הומוג'נה מאפשרת עם אפשרות נשפת - התורה כרמטי

והומוג'נה תישפ נתן לבצר הומוג'נה. הפרמטר שנתר כאן יהיה Z .

המטען הדיפוזיטן ההבדל בין \hat{H} לבין \hat{H}_0 היא הצתחה הבין-אלקטרונית

אכהר הצתחה שאנן אולטראוולטית לתור את המדככת כך שבהצד הצתחה

הבין-אלקטרונית של אלקטרוני הש המטען לזוגות של $Z=2$ וכאשר יש צתחה

בין-אלקטרונית קיים מוסק אלקטרוני אתר ממסק את הצתחה מן האלקטרוני

השני ועם הצתחה האלקטרוני השני והוא המטען אופקטיבי קטן מ- $Z=2$. המטען האפקטיבי

יחד בן $Z=2$ - $Z=1$ - מוסק מלן (מטען הצתחה פחת מטען אלקטרוני)

אנחנו שולטים על זכרם ומאפשרים לעצמנו להשיג האנרגיה הנמוכה ביותר
האפשרית. אנו מחפשים את המרחק בין הפרוטונים. $Z_{eff} \approx 1.69$.
פיזיקת החומר הקונדנסט והאטומיקה!

האלקטרונים נמצאים ב-Z בממוצע, וניתן להשתמש בקירוב של
מחזוריות וקבל את המרחק האופטימלי שמבטיח את המרחק הנמוך ביותר
עבור אטומים נפרדים.
כאולם פני הנושאיה תפורה:

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\frac{\xi}{a_0}\right)^3 \frac{1}{\pi} e^{-\xi r_1/a_0} e^{-\xi r_2/a_0}$$

בזמן שהמרחק בין הפרוטונים $Z=2$.
נציין שיש לנו $\langle \phi | \phi \rangle = 1$
אנחנו:

$$E = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle + \langle \phi | \hat{V} | \phi \rangle$$

$$\begin{cases} \langle \phi | \hat{V} | \phi \rangle = \frac{5}{8} \xi \left(\frac{e^2}{a_0}\right) \\ \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle = (\xi^2 - 2Z\xi) \left(\frac{e^2}{a_0}\right) \end{cases} \Rightarrow E = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = (\xi^2 - 2Z\xi + \frac{5}{8}\xi) \left(\frac{e^2}{a_0}\right)$$

אם נציב $Z=2$ נקבל את הביטוי שמתאר את האנרגיה כפונקציה של
המרחק.

במקרה זה נחפש את ξ שיתן לנו את האנרגיה הנמוכה ביותר:

$$\frac{dE}{d\xi} = (2\xi - 2Z + \frac{5}{8}) \left(\frac{e^2}{a_0}\right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \xi_{min} = Z - \frac{5}{16} \approx \underline{\underline{1.69}}$$

המספר ה"נ" הוא סגור עם האנרגיות $1 - \delta - 2$ כך שהאלקטרונים
אם נחשב את האנרגיה הנמוכה ביותר שיש בהם אנרגיה קינטית של $Z_{eff} = 1.69$
היא 2 .
כעת נציב ξ_{min} ונחשב את האנרגיה הנמוכה ביותר:

mean field.

$$E(\xi=1.69) = (1.69^2 - 2 \cdot 2 \cdot 1.69 + \frac{5}{8} \cdot 1.69) \left(\frac{e^2}{a_0}\right) = \underline{\underline{-77.48 eV}}$$

התנאי הנתון הוא $\chi = 0.36$ ו- $\xi = 1.85$ (כתיב אחר)

לשורה כזו את הדרכים השונות שקובלן זכור או שווה לשם היומיומי:

- גורם ההפרדת מספר 0 : 108.8 eV -
- גורם ההפרדת מספר 1 : 74.8 eV -
- דירקון הנומרוס : 77.48 eV -
- ציק מפורס ניסיונות : 79 eV -

ניתן לומר שנתק שמוס דירקון הנומרוס הפלחמ לשם משמעותית את הדק המוסק של האנרגיה הן בוסם לתחת הנומרוס מספר 0 והן בוסם לתחת מספר טוון.

צ"ה הוספת פרמטרים נוספים לפי העל הנומרוסונות נכלל להמסק ולשם את הדק המוסק של האנרגיה. השופנה הבולטת לפי העל וכתיב אחר מתיקו, ולפי כיון האלקטרונים. הפרמטרים הן אלקטרונות מאופיינת במרחק הבין-אלקטרונים ולכן נכנס מרחק זה לפי העל כק שהדוגמה שהאלקטרונים מוכנסו לתחתק האנרגיה מן השם הבולטת בוטווי:

הפרמטר χ מאפיין היקף הפיזור למעשה נגיד טורק בקירוב הטו.

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{-\xi(r_1+r_2)/a_0} (1 + \chi |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \quad \text{(צווארת)}$$

כק מתאפשרות פולי העל לרובל קורסנה.

כתיב אחר האנרגיה הנומרוסונות והיה תלוי ה- ξ ו- χ $\xi(\chi, \xi)$

$$E(\xi, \chi) = \frac{\int d^3r_1 \int d^3r_2 \phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{H} \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\int d^3r_1 \int d^3r_2 \phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}$$

אנשים לרובל מומנוסנה כק שיתקיש:

$$\frac{\partial E}{\partial \chi} = 0 ; \frac{\partial E}{\partial \xi} = 0$$

ולתת ביצוד המומנוסנה תהיל:

$$\xi_{min} = 1.85 ; \chi_{min} = 0.36$$

$$E(1.85, 0.36) = -79 \text{ eV} + 0.34 \text{ eV}$$

בלומם התקרה מ- 79 eV מן הדק הנומרוס ניסיונות (כתיב אחר)

הוספת קורסנה ולכן היה משמעותי היעדר מן הפיזור. מתאן שהמוסק תלוי ולכן ξ לרובל מ- 1.69 ו- 1.85 עם קורסנה.

כדי לתקן נתן להמשיך ולהוסיף פרטים לפי הוראות. בהתאמה
וספר את הדק המושב אל אנשים שיש היסטוריה ארוכה האוטומוניציה
הפיזיקלית ~~המיוחד~~ בתורה כי העל הוראותיו תיפגד.

*
המחשבה
עם דמיון
היטלוציה

מבואי האנשים כוונותיו ונתן לי את כי הקורה עבר האנשים גלוי
ברובו כי העל (בסיסית הטלוקרונות) ולכן הקורה האנשים והיה כחוד
עבור מהפיק הקורה ~~ה~~ כוונתו העל.