

Zadatak 1.

Izračunajte energiju osnovnog stanja vodikova atoma varijacijskom metodom s valnom funkcijom

$$\Psi(r) = \frac{A}{(a+r)^\nu}$$

gdje su a, ν varijacijski parametri.

Rješenje:

Normiranje valne funkcije:

$$A^2 4\pi \int_0^\infty \frac{r^2}{(a+r)^{2\nu}} dr = A^2 4\pi \int_0^\infty \frac{(r+a)^2 - 2a(r+a) + a^2}{(r+a)^{2\nu}} dr =$$

$$= A^2 4\pi \left(\frac{a^{3-2\nu}}{2\nu-3} - 2 \frac{a^{3-2\nu}}{2\nu-2} + \frac{a^{3-2\nu}}{2\nu-1} \right) = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} a^{\nu - \frac{3}{2}} \sqrt{(2\nu-3)(\nu-1)(2\nu-1)}$$

Energija:

$$E(a, \nu) = A^2 4\pi \int_0^\infty \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nu(\nu+1)}{(r+a)^{2\nu+2}} - \frac{2}{r} \frac{\nu}{(r+a)^{2\nu+1}} \right) - k \frac{e^2}{r} \frac{1}{(r+a)^{2\nu}} \right] r^2 dr$$

$$\int_0^\infty \frac{r^2}{(r+a)^{2\nu+2}} dr = a^{1-2\nu} \frac{1}{\nu(2\nu-1)(2\nu+1)}$$

$$\int_0^\infty \frac{r}{(r+a)^{2\nu+1}} dr = a^{1-2\nu} \frac{1}{2\nu(2\nu-1)}$$

$$\int_0^\infty \frac{r}{(r+a)^{2\nu}} dr = a^{2-2\nu} \frac{1}{2(\nu-1)(2\nu-1)}$$

Dobivamo:

$$E(a, \nu) = a^{2\nu-3} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} a^{1-2\nu} \left(\frac{\nu+1}{(2\nu-1)(2\nu+1)} - \frac{1}{(2\nu-1)} \right) - k e^2 a^{2-2\nu} \frac{1}{2(\nu-1)(2\nu-1)} \right] (2\nu-3)(2\nu-1)(\nu-1) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\nu(\nu-1)(2\nu-3)}{2\nu+1} - \frac{ke^2}{a} \frac{2\nu-3}{2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \Rightarrow a = a_0 = \frac{\hbar^2}{mk e^2} \frac{2\nu(\nu-1)}{2\nu+1}$$

$$E(a_0, \nu) = -m \frac{(ke^2)^2}{2\hbar^2} \left[\frac{(2\nu+1)(2\nu-3)}{4\nu(\nu-1)} \right]$$

Funkcija $E(a_0, \nu)$ ima minimum za $\nu \rightarrow +\infty$, kada se dobije vrijednost energije koja je ista kao i njezina egzaktna vrijednost. Kako je to moguće? U čemu je stvar?

Zadatak 2.

Uzimajući u obzir rezultat prethodnog zadatka, kakvu biste probnu valnu funkciju uzeli za prvo pobuđeno s -stanje vodikova atoma?

Zadatak 3.

Varijacijskom metodom izračunajte približnu energiju osnovnog stanja čestice u potencijalnom polju

$$V(x) = \begin{cases} F_0 x & , \quad x > 0 \\ +\infty & , \quad x \leq 0 \end{cases}$$

Da vidimo prijedloge za probnu valnu funkciju !

KVANTNA KEMIJA 10. vježbe