Pr.1(Princíp variačnej metódy) Ukážte, že pre ľubovoľnú vlnovú funkciu ϕ - normovanú na jednotku - platí

$$\int \phi^* H \phi d^3\vec{r} \geq E_0 \tag{1}$$

kde, H je hamiltonián sústavy a E_0 je jeho najnižšia vlastná hodnota.

Postup: Ľubovoľnú ϕ možno napísať ako $\phi = \sum_n c_n \psi_n$, kde $H\psi_n = E_n\psi_n$. Dosadiť ϕ do ľavej strany rovnice (1) a pozrieť čomu sa rovná.

Pr.2 Napíšte hamiltonián pre atóm hélia(uvažujme nekonečne ťažké jadro).

Pr.3 Vlnová funkcia základného stavu pre atóm vodíka je $\psi = 1/\sqrt{\pi a^3} e^{-r/a}$, kde $a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2)$ je Bohrov polomer.

a) Ako by vyzerala vlnová funkcia atómu hélia, ak by sme zanedbali vzájomné pôsobenie elektrónov. (Neuvažujte o spine a antisymetrizácii vlnovej funkcie.)

b) Aká by bola energia takejto sústavy. Porovnajte ju s experimentálnou hodnotou základného stavu hélia $-78,975eV$.

Výsledok: $E = 8E_{H_{g.s.}} \approx -109eV$

Pr.4 Zoberme skúšobnú vlnovú funkciu základného stavu atómu hélia v tvare

$$\psi_T = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a} \tag{2}$$

a) Vypočítajte strednú hodnotu energie takéhoto stavu(tento krát už zahŕňame aj vzájomnú interakciu elektrónov).

Postup: Napíšme si hamiltonián hélia ako

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1^2 + \Delta_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2}\right) \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z-2}{r_1} + \frac{Z-2}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right) \end{aligned} \tag{3}$$

Pomocný integrál(viď Griffiths str. 263-264) $\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right)^2 \int \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)/a}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = -\frac{5Z}{4}\left|E_{H_{g.s.}}\right|$.

Pomocný integrál(použiť sa dá aj viriálový teorém z QM 1.) $\int \psi_T^* \frac{1}{r_1} \psi_T d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = \frac{Z}{a}$.
vyjde

$$\bar{E} = \left[2Z^2 - 4Z(Z-2) - \frac{5}{4}Z\right]\left|E_{H_{g.s.}}\right| = \left[-2Z^2 + \frac{27}{4}Z\right]\left|E_{H_{g.s.}}\right| \tag{4}$$

b) Nájdite hodnotu Z, pre ktorú má energia minimum.

Výsledok: $Z = 1,69$ a $\bar{E} = -77,5eV$

Poznámka: Hodnota $\bar{E} = -77,5eV$ sa líši od experimentu na úrovni 2%. Lepšie výsledky sa dostanú komplikovanejšími skúšobnými funkciami ako (2). Z sa zvykne nazývať ako efektívny jadrový náboj.

Pr.5 Zoberme skúšobnú vlnovú funkciu (2) a aplikujme ju na héliu podobný atóm i) H^- a ii) Li^+. Nájdite efektívny jadrový náboj Z a určite minimálny horný odhad základnej energie týchto atómov.

Výsledok: i) $Z = \frac{11}{16} \approx 0,69$, $E = -12,8eV$ ii) $Z = \frac{43}{16} \approx 2,69$, $E = -197,9eV$

Poznámka: Pre vodíkový anión nám vyšla hodnota $E = -12,8eV$, čo je viac ako $E = -13,6eV$. To znamená, že by vodíkový anión nemal existovať. Netreba zabudnúť, že $E = -12,8eV$ je len horný odhad na energiu. Komplikovanejšími skúšobnými funkciami ako (2)(viď. Problem 7.16 v Griffiths) sa dá ukázať, že $E < -13,6eV$. Vodíkový anión je však veľmi špeciálny tým, že je len veľmi slabo viazaný a nemá žiadne viazané excitované stavy. Preto je ho ťažké pozorovať v laboratórnych podmienkach avšak na slnku sa nachádza v hojnom počte.

Pr.6 Hamiltonián iónu molekuly vodíka H_2^+ je

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{R} \tag{5}$$

kde $r_1(r_2)$ je vzdialenosť elektrónu od prvého protónu (druhého protónu). Vzdialenosť medzi protónmi je rovná R.

Zoberme skúšobnú vlnovú funkciu v tvare

$$\phi = A\left(\psi(r_1) + \psi(r_2)\right), \tag{6}$$

kde A je normalizačná konštanta a ψ je vlnová funkcia základného stavu atómu vodíka.

a) normalizujte vlnovú funkciu (6).

b) nájdite energiu stavu (6) ako funkciu R.

c) Nájdite minimálnu energiu stavu (6) a dané R.

c) Namiesto protónov uvažujme deuteróny a namiesto elektrónu mión. Budú v takomto systéme deuteróny bližšie k sebe ako protóny v ióne molekuly vodíka H_2^+? Ak áno o koľko?

Postup: Griffiths str.267-268.