

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 8

1. שיטת הוריאציה (34 נק') .1

החלק הרדיאלי של המילטוניאן אטום דמוי מימן ביחידות אטומיות הנו:

$$\hat{H}_R = -\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right]; \quad \hbar = m_e = a_0 = q_e = 1$$

א. השתמשו בפונקצית וריאציה מהצורה: $\phi(r; \lambda) = e^{-\lambda r}$ וחשבו את ביטוי באנרגיה

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{\int_0^\infty \phi^*(\lambda) \hat{H}_R \phi(\lambda) d\tau}{\int_0^\infty \phi^*(\lambda) \phi(\lambda) d\tau}$$

הוריאציונית:

ב. מהו ערכו המינימלי של $\varepsilon(\lambda)$? האם ערך זה קטן, שווה או גדול לערך המדויק עבור מצב

הייסוד של אטום דמוי מימן? האם קיים הבדל בין $\phi(r; \lambda^*)$ לפונקצית הגל האמיתית של מצב

הייסוד. (λ^* הנו הערך בו האנרגיה הוריאציונית מינימלית).

ג. חזרו על החישובים של סעיף א' ו- ב' עם פונקציית וריאציה מהצורה $\phi(r; \lambda) = e^{-\lambda r^2}$. מהו

היחס בין האנרגיה המתקבלת בחישוב הנוכחי לבין אנרגיית מצב הייסוד המדויקת?

- נתון:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}; \quad \int_0^\infty x^m e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2\alpha^{(m+1)/2}}$$

$$\Gamma(x+1) = x! \quad \text{עבור ערכי } x \text{ שלמים}; \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}; \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$$

2. שיטת הוריאציה (33 נק') .2

עבור אטום דמוי He עם גרעין הנושא מטען Ze ושני אלקטרונים הוצעה פונקציית וריאציה

מהצורה: $\psi_{1,2} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\zeta}{a_0}\right)^3 e^{-\zeta r_1/a_0} e^{-\zeta r_2/a_0}$. נמצא כי אינטגרל הוריאציה ניתן ע"י הביטוי:

$$\int \psi_{1,2}^* \hat{H} \psi_{1,2} d\tau = \langle \psi_{1,2} | \hat{H} | \psi_{1,2} \rangle = \left(\zeta^2 - 2Z\zeta + \frac{5}{8}\zeta \right) \cdot \frac{e^2}{a_0}$$

א. רשמו את ההמילטוניאן במפורש וציינו את המשמעות הפיזיקלית של כל איבר ואיבר.

ב. מהי המשמעות הפיזיקלית של ζ ? אילו ערכים יכול ζ לקבל?

ג. חשבו את ζ עבורו מתקבל מינימום של אינטגרל הוריאציה ואת ערכו של האינטגרל

במינימום עבור היונים: Li^+ ו- H^- .

3. עקרון פאולי (33 נק')

- א. לו לאלקטרונים היה ספין 0, מה הייתה פונקציית הגל של מצב הייסוד והמצב המעורר הראשון של אטום הליתיום? (הזניחו את האינטראקציה בין האלקטרונים).
- ב. לחלקיק המיואון מטען וספין זהים לאלו של האלקטרון אך מסתו גדולה מזו של האלקטרון. מה תהיה קונפיגורציית מצב הייסוד של אטום ליתיום בעל שני אלקטרונים ומיואון אחד?

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 8

1. עקרון הוריאציה

- א. השתמשו בפונקציית וריאציה מהצורה $\phi(r; \lambda) = e^{-\lambda r}$ על מנת לקרב את אנרגיית מצב הייסוד של אוסצילטור הרמוני תלת ממדי ($\sqrt{3}h\nu$).
- ב. מהו ערך אנרגיית מצב הייסוד שהיה מתקבל אילו היינו בוחרים פונקציית וריאציה מהצורה $\phi(r; \lambda) = e^{-\lambda r^2}$?