

## כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 8 שיטת הוריאציה

1. (נק' 34) השתמשו בפונקציה הוריאציה  $\phi(x) = C/(a^2 + x^2)$  ע"מ למצוא חסם עליון לאנרגיה של אוסילטור הרמוני חד מימדי. נרמלו את  $\phi$  תחילה מצאו את האנרגיה ואת ערכה המינימלי כפונקציה של  $a$ . מה אחוז השגיאה באנרגיה מהערך של מצב היסוד האמיתי.

$$\left( \begin{array}{l} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(a^2 + x^2)^2} = \frac{\pi}{2a^3} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(a^2 + x^2)^3} = \frac{3\pi}{8a^5} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(a^2 + x^2)^2} = \frac{\pi}{2a} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(a^2 + x^2)^4} = \frac{\pi}{16a^5} \end{array} \right. : \text{ (העזרו באינטגרלים הבאים)}$$

2. (נק' 33) א. השתמשו בפונקציה הוריאציה  $\phi(r) = Ce^{-\lambda r}$  וחשבו מפורשות את האנרגיה הוריאציונית של אטום המימן. (זכרו לנרמל את  $\phi$  תחילה.) מהו ערכה המינימלי (כפונקציה של  $\lambda$ )? השוו לאנרגית מצב היסוד של אטום המימן והסבירו את תשובתכם.  
ב. על סמך תשובתכם ב-א. איזה אנרגיה היינו מקבלים אילו היינו משתמשים בפונקציה הוריאציה  $\phi(r) = (1 - \lambda r)e^{-\lambda r}$ ?

ג. האם האנרגיה של פונקציה הוריאציה  $\phi(r) = e^{-\lambda r^2}$  קטנה או גדולה מזו של סעיף א. ? הסבירו.

### 3. עקרון פאולי (נק' 33)

א. אילו לאלקטרונים היה ספין 0 (כלומר עיקרון פאולי לא היה חל עליהם), מה תהייה פונקציה הגל שלהם במצב היסוד של אטום ליתיום? מה תהייה פונקציה הגל של המצב המעורר הראשון? (הזניחו את האינטראקציה בין האלקטרונים).  
ב. מהן האנרגיות של שתי רמות אלו באטום שכזה ומהי אנרגית היסוד של אטום ליתיום "אמיתי"?

## כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 8

1.

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