C6.2 Hamiltonianul Atomului de Hidrogen

Fie funcţia de undă staţionară caracterizată de doi parametrii ce trebuie determinați

$$\psi_Z(C,\alpha,r)=C\exp(-\alpha r)$$

prin aplicarea condiţiilor de normalizare a funcției de undă și a variației minime a eigen-energiei.

Pe baza formulei generale a lui “Slater” (a se vedea secțiunea C6 Anexa)

$$I_k(m)=\int_0^\infty r^k e^{-mr}dr=\frac{k!}{m^{k+1}},\ \forall k\in N\ \&\ m\in C,\mathrm{Re}(m)>0$$

funcţia de undă radială se normalizează astfel

$$1=\int_0^\infty \psi_Z^*\psi_Z r^2dr=C^2\int_0^\infty e^{-2\alpha r}r^2dr=C^2\frac{2!}{(2\alpha)^3}=\frac{C^2}{4\alpha^3}$$

de unde rezultă constanta de normalizare. Cu aceasta funcția de undă se rescrie

$$\psi_Z(\alpha,r)=2\alpha^{3/2}\exp(-\alpha r)$$

fiind acum o funcție de un singur parametru rămas spre determinare – din principiul variațional al energiei totale

$$E_Z(\alpha)=\int_0^\infty \psi_Z^*(\alpha,r)\hat{H}\psi_Z(\alpha,r)r^2dr$$

cu Hamiltonianul pentru atomul de hidrogen

$$\hat{H}_Z=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2-\frac{Ze_0^2}{r},\ \ e_0^2=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$$