# *C6.3 Energia Variațională a Atomului de Hidrogen*

Pentru o abordare corectă, simetria sferică a atomului de Hidrogen trebuie reflectată și la nivelul formei radiale a Hamiltonianului asociat; pentru a realiza acest deziderat se rescrie termenul Laplacian pe baza legii lui Gauss de transformare integrală suprafață-volum, ținându-se cont de anularea funcției de undă la frontiera infinită a spațiului

$$\boxed{0 = \int_{\Sigma\to\infty} \left(\psi^* \nabla \psi\right) d\Sigma_V = \int \nabla\left(\psi^* \nabla \psi\right) dV = \int \psi^* \nabla^2 \psi dV + \int \nabla \psi^* \nabla \psi dV}$$

Din ecuația Gauss rezultă identitatea integrală

$$\int \psi^* \nabla^2 \psi dV = -\int \left|\nabla \psi\right|^2 dV$$

ceea ce permite scrierea operatorului radial

$$\int_0^\infty \psi^* \nabla_r^2 \psi \, r^2 dr = -\int_0^\infty \left|\partial_r \psi\right|^2 r^2 dr$$

iar integrala energiei devine

$$E_Z(\alpha) = 2\frac{\alpha^5 \hbar^2}{m_0} \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r^2 dr - 4\alpha^3 Z e_0^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r dr$$

$$= 2\frac{\alpha^5 \hbar^2}{m_0} \frac{2!}{2^3 \alpha^3} - 4\alpha^3 Z e_0^2 \frac{1}{2^2 \alpha^2} = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m_0} - \alpha Z e_0^2$$

care supusă principiului variaţional

$$\boxed{0 = \partial_\alpha E_Z(\alpha) = \frac{\alpha \hbar^2}{m_0} - Z e_0^2}$$

permite obţinerea parametrului $\alpha$

$$\alpha = \frac{Z e_0^2 m_0}{\hbar^2} = \frac{1}{a_0}$$

în relație inversă cu prima rază Bohr.

Acum, prima funcţie de undă radială a atomului de Hidrogen devine

$$\boxed{\psi_Z(r) = 2 a_0^{-3/2} \exp\left(-r / a_0\right)}$$

la fel și prima (eigen) energie

$$\boxed{E_{Z,n=1} = -\frac{Z^2 e_0^4 m_0}{2\hbar^2} = -\frac{Z^2 e^4 m_0}{2\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2 e^4 m_0}{8\varepsilon_0^2 h^2}}$$

în deplin acord cu formulările Bohr și Schrödinger pentru numărul cuantic *n*=1 în atomul de Hidrogen.