

8. vaja: Kvantna mehanika

1. naloga

Za elektron v okolini protona poznamo analitične rešitve. Napišite program, s katerim poiščete rešitve numerično. Funkcije normirate, ko dobite željeno energijo. V poročilu predstavite rešitve, napako numerično določenih funkcij ter energije.

D1. naloga

Osnovno stanje vodikovega atoma bi radi določili z variacijsko metodo z uporabo baznega seta sestavljenega iz štirih Gaussovih funkcij

$$\phi_i = e^{-\alpha_i r^2}$$

s parametri enakimi

$$\alpha_1 = 13.00773$$

$$\alpha_2 = 1.962079$$

$$\alpha_3 = 0.444529$$

$$\alpha_4 = 0.1219492$$

D2.naloga

Osnovno stanje helijevega atoma bi radi določili s Hartree-Fockovo metodo z uporabo baznega seta sestavljenega iz štirih Gaussovih funkcij

$$\phi_i = e^{-\alpha_i r^2}$$

s parametri enakimi

$$\alpha_1 = 38.474970$$

$$\alpha_2 = 5.782948$$

$$\alpha_3 = 1.242567$$

$$\alpha_4 = 0.298073$$