Zadatak 1.

Razmak između dviju susjednih energijskih razina neutrona u Zemljinu gravitacijskom polju iznosi ΔE . Koliko će razmak između istih razina iznositi na Mjesecu?

Rješenje:

Zadatak ćemo riješiti primjenom virijalnog i Hellmann-Feynmanovog teorema. Gravitacijsko je polje u blizini površine Zemlje, ili Mjeseca, jednoliko. Potencijalna energija ima oblik

$$V(x)=\begin{cases} m g x & , \quad x \geq 0 \\ +\infty & , \quad x<0 \end{cases}$$

Primjenom virijalnog teorema dobivamo

$$\langle V(x)\rangle = 2\langle E_{kin}\rangle = \frac{2}{3} E$$

a primjenom Hellman-Feynmanovog teorema dobivamo

$$\frac{dE}{dg} = \frac{\langle V(x)\rangle}{g} = \frac{2}{3}\frac{E}{g} \quad \Rightarrow \quad E = g^{\frac{2}{3}} f(m, \hbar)$$

Primjenom ove jednakosti za Zemlju i Mjesec, dobivamo

$$\Delta E_M = \Delta E \left(\frac{g_M}{g_Z}\right)^{\frac{2}{3}} \approx \Delta E \left(\frac{1}{6}\right)^{\frac{2}{3}} \approx 0{,}3\,\Delta E$$

Zadatak 2.

Napišite Schrödingerovu jednadžbu za ion H_2^+ smatrajući da su protoni nepokretni i da se nalaze na udaljenosti *R* jedan od drugoga. Kakvu probnu valnu funkciju biste izabrali za izračunavanje osnovne energije toga iona? Kako biste odredili energiju energiju vezanja toga iona?

Rješenje:

Budući da je riječ samo o jednom elektronu, Schrödingerova jednadžba ima oblik:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r})=E\,\Psi(\vec{r})$$

Potencijalna energija ima oblik

$$V(\vec{r})=-k\frac{e^2}{\left|\frac{\vec{R}}{2}-\vec{r}\right|}-k\frac{e^2}{\left|\frac{\vec{R}}{2}+\vec{r}\right|}$$

Uvedimo atomske jedinice za duljinu i energiju:

$$a=\frac{\hbar^2}{m\,k\,e^2}=0.052918\,nm \quad , \quad E_h=\frac{m(k\,e^2)^2}{\hbar^2}=27.211\,eV$$

i pokrate

$$r_{\pm}=\left|\frac{\vec{R}}{2}\pm\vec{r}\right|=\sqrt{\frac{R^2}{4}+r^2\pm R\,r\cos(\theta)}$$

Dakle, ovdje sve udaljenosti mjerimo u jedinicama a i energiju u jedinici E_h . Tako energija osnovnog stanja vodikova atoma u toj jedinici ima vrijednost -1/2 . Schrödingerova jednadžba sada ima oblik

$$\left(-\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2-\frac{1}{r_+}-\frac{1}{r_-}\right)\Psi(\vec{r})=E\,\Psi(\vec{r})$$

odnosno funkcional energije ima oblik

$$E[\Psi]=\int\left[\frac{1}{2}\left|\vec{\nabla}\Psi(\vec{r})\right|^2-\left(\frac{1}{r_+}+\frac{1}{r_-}\right)\left|\Psi(\vec{r})\right|^2\right]d^3\vec{r}$$

gdje je valna funkcija normirana na 1.

Kao najjednostavniju smislenu probnu valnu funkciju možemo izabrati linearni spoj dviju funkcija, koje na jednak način ovise o udaljenosti od jezgre i koje su jednake valnoj funkciji vodikova atoma u osnovnom stanju:

$$\Psi(\vec{r})=a\,\mathrm{e}^{-r_+}+b\,\mathrm{e}^{-r_-}$$

Ukupna energija iona sastoji se od energije elektrona i energije odbijanja jezgara:

$$E_{ion}=E[\Psi]+\frac{1}{R}$$

Energija veze je jednaka razlici energije iona kad su jezgre beskonačno udaljene i energije koju imaju za neku konačnu udaljenost. Kad su jezgre beskonačno udaljene onda elektron "pripada" jednoj, ili drugoj jezgri, (tj. ili je b=0, ili je a=0), pa je njegova energija jednaka -1/2. Dakle, energija veze je

$$E_{veze} = -\frac{1}{2} - E[\Psi] - \frac{1}{R}$$

Izračun elektronske energije i njezine ovisnosti o udaljenosti između jezgara je zahtjevniji posao, premda je izravan.