

Chemia kwantowa B – zadania domowe

Zestaw 8.

Zadanie 1. Oszacować energię stanu podstawowego układu dwóch cząstek o masach m_1 i m_2 oddziałujących ze sobą potencjałem Yukawy ($a > 0$, $V_0 > 0$):

$$V(r) = -\frac{aV_0}{r}e^{-\frac{r}{a}}. \quad (1.1)$$

Użyć funkcji próbnej

$$\phi(r; \lambda) = N(\lambda)re^{-\lambda r}. \quad (1.2)$$

Zadanie 2. Potencjał oddziaływania neutronu z protonem dany jest wzorem

$$V(r) = -V_0e^{-\frac{r}{a}}, \quad (2.1)$$

gdzie $a = 2,18 \cdot 10^{-15}$ m i $V_0 = 32,7$ MeV. Używając funkcji próbnej

$$\phi(r; \lambda) = N(\lambda)e^{-\frac{\lambda r}{2a}} \quad (2.2)$$

oszacować energię stanu podstawowego układu neutron-proton.

.....
Uwaga do zadań: operator energii kinetycznej obu cząstek,

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{\mathbf{r}_2},$$

w zmiennych

$$\begin{cases} \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1+m_2\mathbf{r}_2}{m_1+m_2} \\ \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \end{cases}$$

przyjmuje postać

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}},$$

gdzie

$$\begin{cases} M = m_1 + m_2 \\ \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \end{cases} .$$