

به نام خدا

دانشگاه صنعتی اصفهان - دانش‌گدهی فیزیک

تمرین سری ۷ - ساختار الکترونی

سه شنبه ۵ خرداد ۱۳۹۴

۱. معادله ۱.۱۳ کتاب Martin را بدست آورید.

۲. الف- تابع موج باید در شرط کاسپ الکترون- هسته (electron - nucleus cusp condition) صادق باشد تا از بی‌نهایت شدن انرژی کل الکترون- هسته جلوگیری شود. با توجه به اینکه معادله شرودینگر قسمت شعاعی (با فرض اینکه تابع موج به صورت $\Phi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$) برای یک اتم (هیدروژن گونه) به صورت زیر می‌باشد:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2E \right) R(r) = 0.$$

و با فرض اینکه بتوان تابع موج شعاعی را به صورت $R(r) = r^l \rho(r)$ نوشت، که $\rho(r)$ در مبدا صفر نمی‌شود، نشان دهید شرط کاسپ به صورت زیر خواهد بود:

$$\left. \frac{\rho'}{\rho} \right|_{r=0} = -\frac{Z}{l+1}.$$

ب- حال با استفاده از این شرط توابع موج (شعاعی) برحسب r برای $l = 0, 1, 2$ چگونه خواهند بود (از ثابت‌های نرمالیزاسیون صرف نظر کنید).

۳. یک تابع موج گوسی را به صورت کلی زیر می‌توان تعریف کرد:

$$G_{ijk}(r, \alpha, R_I) = (x - x_I)^i (y - y_I)^j (z - z_I)^k e^{-\alpha(r-R_I)^2}$$

برای حالتی که $i = j = k = 0$ باشد (که همان ارییتال s را نمایش می‌دهد) نشان دهید که:

$$G_s(r, \alpha, R_I) \times G_s(r, \beta, R_J) = e^{\gamma(R_I - R_J)^2} G_s(r, \kappa, R_\kappa)$$

$$\text{که } \kappa = \alpha + \beta \text{ و } \gamma = \frac{\alpha\beta}{\alpha+\beta} \text{ و } R_\kappa = \frac{\alpha R_I + \beta R_J}{\alpha + \beta}$$

«موفق باشید»