

## Química Computacional (2020-2021)

### Trabalho Prático 2b. Princípio variacional: aplicação ao átomo de hidrogénio

- 1) Construa um programa em Python que permita calcular: (i)  $E(\alpha)$  em função de  $\alpha$ ; (ii) determine numericamente o valor de  $\alpha$  para o qual a função é mínima (considere o intervalo  $0 \leq \alpha \leq 1.5$ ); (iii) a energia no mínimo de  $E(\alpha)$ ; e (iv) os valor da função de onda  $|\psi\rangle$  em função de  $r$ , de forma a possibilitar a sua representação gráfica (considere  $0 \leq r/\text{u.a.} \leq 6$  e um intervalo entre pontos  $dr = 0.05$  u.a.). Use:

a)  $|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}$  para a qual  $E(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^2 - \alpha$

b)  $|\psi\rangle = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha r^2}$  para a qual  $E(\alpha) = \frac{3\alpha}{2} - 2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$

- 2) Partindo do(s) programa(s) do exercício anterior, calcule a distribuição de probabilidade,  $|\psi|^2$ , em função da distância  $r$  ao núcleo. Seguidamente, determine a função de densidade de probabilidade radial,  $P(r)$ , de encontrar o eletrão num determinado volume esférico à distância  $r$  do núcleo e com espessura  $dr$ , de acordo com a expressão:

$$P(r) \approx 4 \cdot \pi \cdot r^2 |\psi|^2 \cdot dr$$

- 3) Compare graficamente as representações obtidas para cada função teste no ponto anterior, e discuta as diferenças entre as representações de  $|\psi|^2$  e  $P(r)$ .

#### Bibliografia Auxiliar

- Attila Szabo, Neil S. Ostlund; "Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Theory." McGraw-Hill (1996).

- [https://www.youtube.com/watch?v=rPT\\_7MTp69I](https://www.youtube.com/watch?v=rPT_7MTp69I)