

Química Computacional (2021-2022)

Trabalho Prático 3b. Princípio variacional: aplicação ao átomo de hidrogénio

- 1) Construa um programa em Python que permita calcular: (i) $E(\alpha)$ em função de α ; (ii) determine numericamente o valor de α 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 $\Delta r = 0.05$ 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 $\Delta r = 0.05$ u.a., de acordo com a expressão:

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

- 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