1.1.3 Problema

Stimare l'errore che si commette nel calcolare l'energia dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno usando la funzione gaussiana $\psi(r) = e^{-cr^2}$ $(c > 0)$ in luogo dell'autofunzione corretta $\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$.

Soluzione

Applicando il principio variazionale al calcolo del valore di aspettazione dell'energia si ottiene

$$E(c) = \frac{\left\langle \psi \left| -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{r} \right| \psi \right\rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\left\langle e^{-cr^2} \left| -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{r} \right| e^{-cr^2} \right\rangle}{\left\langle e^{-cr^2} | e^{-cr^2} \right\rangle}.$$

Nei problemi sfericosimmetrici $\nabla^2 = \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2}$; pertanto

$$E(c) = 4\sqrt{\frac{8c^3}{\pi}} \left\{ 3c\int_0^\infty dr \psi^2 r^2 - 2c^2 \int_0^\infty dr \psi^2 r^4 - \int_0^\infty dr \psi^2 r \right\} = \frac{3}{2}c - \sqrt{\frac{8c}{\pi}}.$$

Minimizzando $E(c)$ si ha

$$\frac{dE}{dc} = \frac{3}{2} - \sqrt{\frac{2}{\pi c}} = 0 \text{ da cui } c = \frac{8}{9\pi}.$$

Conseguentemente

$$E = -\frac{4}{3\pi} = -0.424 u.a..$$

L'errore percentuale rispetto al valore esatto ($E_{1s} = -0.5$ $u.a$) è

$$\frac{\Delta E}{E} \cong 15\%.$$