Computer practikum QCB III, Opdracht 2

2008

2 Gaussische basis functies

Het $1s$ orbitaal voor het H atoom is gegeven door

$$\phi_{1s,H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \tag{1}$$

waarbij $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$ en $r = |\mathbf{r}|$. Bij berekeningen aan moleculen blijkt dat integralen waar dit soort exponentiële functies in voorkomen heel moeilijk zijn. Integralen waar zogenaamde Gaussische orbitalen in voorkomen:

$$g_{s,\alpha}(\mathbf{r}) = N_i e^{-\alpha r^2} \tag{2}$$

$$N_i = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \tag{3}$$

zijn beter te doen. Daarom proberen we nu het H-atoom met variatie rekening te benaderen in een basis van Gaussische functies.

Om deze opgave te maken heb je een aantal MATLAB routines nodig. Koppel eerst de benodigde disk aan met:

```
Windows explorer
   Tools
      Map Network Drive
         T:
            \\QCB3_Comprac
```

Geef nu in MATLAB het commando:

```
>> addpath('T:\QCB3_Comprac')
```

In deze directory staat o.a. het Matlab script `voorbeeld1.m` waarmee een variationele berekening voor het H-atoom in een basis van twee Gaussische orbitalen kan worden uitgevoerd. In dit script kun je ook zien hoe je de golffunctie kunt plotten.

Opgave 2.1 *Bestudeer* `voorbeeld1` *regel voor regel en voer het uit. Je hoeft niet alle hulp-functies in detail te bekijken. Schrijf nu een* MATLAB *script om de optimale exponent te bepalen om de energie van het H-atoom uit te rekenen in een basis bestaande uit één Gaussian. Welke exponent vind je en wat is de optimale energie? Vergelijk dit antwoord met de uitkomst van opgave 4.2 van het Werkcollege QCB II. Ga na of het antwoord voldoet aan het variatie-principe door het te vergelijken met de exacte grondtoestandsenergie van het H atoom.*

Opgave 2.2 *Maak een goede basis voor het H-atoom bestaande uit een aantal Gaussische basis functies. Je kunt dit het beste doen door met twee basis functies te beginnen en verschillende exponenten te proberen. Door naar een plot van de golffunctie te kijken kun je een idee krijgen in welk gebied een Gaussian met een bepaalde exponent het meeste bijdraagt.*