

Krokový príklad 2 (metóda WS = Wigner + Seitz)

Nájdite radiačnú symetrickú pseudopotenciálu iónu Na^+ je

$$V(x) = -2E_0 \frac{Q(x)}{x^2}$$

kde $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2}$, $x = \frac{r}{a_B}$, $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$. Prilohou funkcie $Q(x)$ je

od	do	$Q(x)$
0.00	0.01	$11x$
0.01	0.15	$-26.4x^2 + 11.53x - 0.00264$
0.15	1.00	$-2.84x^2 + 4.46x + 0.5275$
1.00	1.55	$1.508x^2 - 4.236x + 4.876$
1.55	3.30	$0.1196x^2 + 0.2072x + 1.319$
3.30	6.74	$0.0005x^2 + 0.9933x + 0.0222$
6.74	∞	x

1. Vypočítajte energiu radikálneho elektrónu v bode $\vec{r}=0$ ako funkciu $x_0 = \frac{r_0}{a_B}$, kde $\frac{4}{3}\pi r_0^3$ je objem priradený k jednému atómu Na v kryštáli.

Návod: Ukážte, že radiačnú symetrickú vlnovú funkciu $\psi_{3s}(\vec{r})$

spĺňa rovnice

$$f''(x) + \left[\frac{2Q(x)}{x^2} + \frac{E_{3s}}{E_0} \right] f(x) = 0$$

kde $f(x) = x \cdot \psi_{3s}(x)$. Okrajové podmienky: $f(0) = 0$, $\psi'_{3s}(x_0) = 0$.

2. Použite metódu WS na určenie konstanty kovového radikálu

Návod: Minimalizujte energiu $E_{\text{tot}}(x) = E_{\text{kin}}(x) + E_{3s}(x)$.

3. Určite hodnotu energie radikálu. Energia elektrónu v atómovom radikáli je $E_{\text{ion}} = -0.38E_0$.