

**Варьирование
нелинейных параметров:
атом водорода**

- Запишем пробную функцию для 1s атомной орбитали в виде

$$R(\zeta, r) = Ne^{-\zeta r},$$

**Гамильтониан (в атомной системе единиц)
имеет вид**

$$\hat{H} = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{2r^2} - \frac{1}{r}.$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$\begin{aligned}
\bar{E} &= -\frac{N^2}{2} \int_0^{\infty} R(\zeta, r) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(\zeta, r)}{\partial r} \right) r^2 dr - N^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{r} R^2(\zeta, r) r^2 dr = \\
&= -\frac{N^2}{2} \left(\int_0^{\infty} R(\zeta, r) \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(\zeta, r)}{\partial r} \right) dr + 2 \int_0^{\infty} R^2(\zeta, r) r dr \right).
\end{aligned}$$

$$N = 2\zeta^{3/2}.$$

$$\bar{E} = \frac{1}{2} (\zeta^2 - 2\zeta).$$

Пробная функция гауссового типа

$$R(\alpha, r) = Ne^{-\alpha r^2}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-r^2 x^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^{n+1} r^{2n+1}} \sqrt{\pi} \quad (r > 0, n = 1, 2, \dots),$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-r^2 x^2} dx = \frac{1}{2r^2}$$

$$N^2 = \frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2},$$

$$\bar{E} = \frac{3}{2}\alpha - \sqrt{\frac{2}{\alpha\pi}}. \quad \alpha = \frac{8}{9\pi}$$

$$\bar{E}(\text{min}) = -\frac{4}{3\pi} = -0.424 \text{ ат.ед.}$$