Tarea 1

Ejercicio 1.

El agujero de Fermi

• Escriba la función de onda para un estado 3S del átomo de helio y verifique que:

$$|\rho(r_1, r_2)| \neq |\rho(r_1)||\rho(r_2)|$$
 (1)

• Escriba un programa para graficar la función de distribución radial de esta función de onda y verifíque que los electrones no se mueven de forma independiente. ¿A qué atribuye este comportamiento?

Ejercicio 2.

Método variacional lineal en el átomo de helio: Interacción de configuraciones.

Una buena función de onda aproximada para el helio es:

$$\Psi_{CI} = c_1 |1s^2| + c_2 |1s2s| + c_3 |2s^2| + c_4 |2p^2|$$
(2)

Esta función de onda incluye funciones de mayor momento angular para poder describir el movimiento correlacionado de los electrones. Para poder encontrar los coeficientes que minimizan la energía es necesario resolver la ecuación matricial:

$$HC = CW (3)$$

Escriba todos los elementos matriciales de la matriz Hamiltoniana. No es necesario que calule las integrales.

Fecha entrega: 28 de Septiembre 2017