

El átomo de helio

Funciones de onda para átomo de Helio

$$\begin{aligned}\Psi(r_1, r_2) &= N * (1s(r_1)1s(r_2)) * \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(\omega_1)\beta(\omega_2) + \alpha(\omega_2)\beta(\omega_1)) \\ &= \Psi_0(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi}\zeta^3 e^{-\zeta(r_1+r_2)}\end{aligned}$$

❖ Ventajas:

- ❖ Permite obtener una energía variacional con un error relativo de solamente 1.5%!
- ❖ Al obtener la energía variacional utilizando un Hamiltoniano exacto, la función de onda solamente considera las interacción coulombica entre las distribuciones de carga de los dos electrones sobre todo el espacio.

❖ Desventajas:

- ❖ La función de onda no considera el efecto de la posición instantánea relativa entre los electrones.

Función de onda de Hylleraas:

Una forma de incluir el efecto de la interacción electron electron en la función de onda es agregando una tercera variable a la función de onda: la distancia interelectrónica.

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, r_{12}) = Ne^{-\zeta(r_1+r_2)}(1 + br_{12}) \quad (1)$$

❖ Ventaje

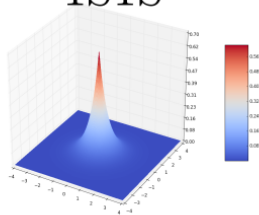
- ❖ Incluye explícitamente la coordenada interelectrónica lo que permite correlacionar el movimiento electrónico.
- ❖ Cumple con la condición de cuspe tanto Nucleo-Nucleo como electron-electron.

❖ Desventaja

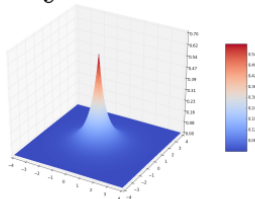
- ❖ Al tener átomos multielectrónicos aparecen integrales de 3, 4, etc. electrones las que son muy difíciles de evaluar.

Función de onda de Hylleraas:

1S1S



Hylleraas

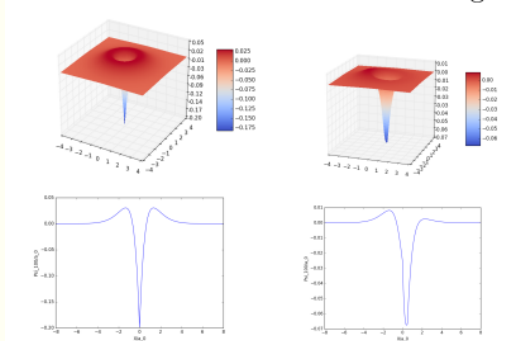


Función de onda de Hylleraas:

$$\Psi_{corr} = \Psi_{hyl} - \Psi_{ref}$$

Correlacion radial

Correlacion angular



Función de onda CI

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

¿Como puedo obtener los coeficientes?