

Collection

Alejandra Marulanda Gallego

October 24, 2022

1 Tesis Valeria (Modelo molecular exacto para los estados S de los átomos de dos electrones. Aplicación al estado basal del He y de su serie isoelectrónica)

Se introdujo una factorización exacta y única de la función propia en términos de una amplitud marginal. Está depende funcionalmente de la distancia interelectrónica (r_{12}) y de una amplitud condicional, la cual a su vez depende funcionalmente de las distancias electrón-núcleo r_1, r_2 y paramétricamente de r_{12} . Luego, se aplicó el principio variacional deduciendo así las ecuaciones de valor propio para las dos amplitudes.

La ecuación marginal incluye un hamiltoniano efectivo, el cual contiene una curva de energía potencial no adiabática que toma en cuenta todas las correlaciones entre las partículas de manera promediada, cuyo valor propio único es la energía interna. Por otro lado, en cada punto r_{12} tal curva es, a su vez, el valor propio único en **la ecuación condicional**.

En conclusión, empleando el estado basal del He y de su serie isoelectrónica como prototipo, se demostró que dicha curva proporciona una interpretación de la estructura del átomo análoga a la de una molécula diatómica.

La ecuación de Schrödinger para los sistemas atómicos conformados por más de un electrón no tiene solución exacta debido a las repulsiones interelectrónicas.

Conceptos

Tesis Valeria

- Factorización exacta:
- Función propia:
- Amplitud marginal:
- Distancia interelectrónica:
- Amplitud condicional:
- Dependencia funcional:
- Dependencia paramétrica:
- Principio variacional:
- Ecuación de valor propio:
- Ecuación marginal:
- Hamiltoniano efectivo:
- Curva de energía potencial:

- No adiabática:
- Correlaciones:
- Valor propio:
- Ecuación condicional:

2 Formalismo

Coordenadas de Hylleraas: Hylleraas mostró que la función de onda electrónica para cualquier estado S de un átomo de dos electrones, considerando el centro de masa el núcleo, se puede factorizar en una parte angular y otra interna, donde la última se puede expresar en términos de r_1 , r_2 y r_{12} .

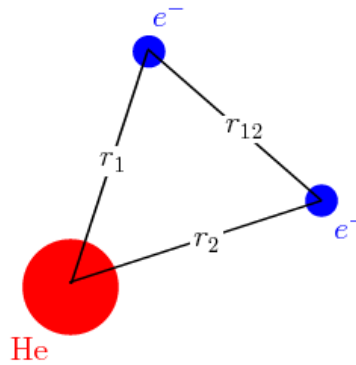


Figure 1: Modelo de átomo de helio.

Estas coordenadas determinan la forma y el tamaño del triángulo electrón-núcleo-electrón y son independientes entre sí, excepto que deben satisfacer la desigualdad triangular:

$$|r_{12} - r_2| \leq r_1 \leq r_{12} + r_2$$

Por otro lado, la función angular determina la orientación de dicho triángulo en el espacio. Para nuestros propósitos, no se necesita especificar esta función, debido a que los estados S tienen simetría esférica. Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger interna,