

## Una frase bastante buena...

**Author :** muammar

En la química cuántica existen dos formas de obtener las energías que tanto se buscan. Una forma es el método variacional y la otra es la teoría de las perturbaciones.

En la primera se altera o se trabaja con una función de onda de prueba, la cual se ajusta con un factor variacional. En caso de que la función de onda sea exacta, obtendremos la energía exacta del sistema si no, la energía obtenida será mayor a la real. Luego de obtener la función de prueba con su factor variacional, se procede a hallar la energía. Como esta energía va a tener al factor variacional que es el que no conocemos, se deriva dicha energía con respecto al factor, se iguala a cero y se despeja el factor. Luego lo que falta es sustituir el valor en la energía que se derivó y nos da el resultado.

La segunda forma es la teoría de las perturbaciones, en este caso se trabaja dividiendo el hamiltoniano, en un hamiltoniano no perturbado y uno perturbado. Para obtener estos resultados no suele ser tan fácil como en el método variacional, mas sin embargo, se puede llegar a la energía exacta. Para el átomo de helio, hallando la tercera perturbación se obtiene la energía de ionización exacta (-79 e-V) Este método tiene la limitación de que obligatoriamente se debe conocer la energía que genera el hamiltoniano no perturbado, y al momento de hallar la energía de perturbación es difícil que el problema pueda ser separado para lograr las integraciones. Luego de obtener las energías se suman (es decir la no perturbada, con las perturbadas)

¿Qué quiero decir con todo esto? La mayoría de los programas computacionales trabajan de manera variacional, llegando a hallar la traza de la matriz secular y sumándola se obtiene la energía. Existen métodos como los Moller – Plesset (MP) que trabajan con la teoría perturbacional. La gran frase es la que viene. Al terminar la clase el profesor dijo, antes de que yo le preguntara qué opinaba de ambos métodos:

*“La mayoría de los programas computacionales trabajan de manera variacional, entonces, trabajamos de manera variacional pensando perturbacionalmente”*

Y para mi, eso lo resume todo. Nadie tiene la verdad absoluta, la vida y la verdad es la unión de todo lo que sabemos. Nadie puede saberlo todo, y entre esos métodos ninguno es mejor o peor que otro. Solo hay que saber cómo utilizarlos. Uno de los caminos más rápidos para fracasar es pensar que se sabe todo :) [eso es lo que yo pienso]

**Muammar El Khatib.**