SOLUCION VARIACIONAL DEL ÁTOMO BIELECTRÓNICO

Tomemos la función espacial (de la que depende la energía del sistema) obtenida con el modelo de las partículas independientes:

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Z_{efect}^3}{\pi} e^{-Z_{efect}(r_1 + r_2)}$$

y consideremos la carga efectiva Z_{efect} como el parámetro con respecto al cual se minimizará la energía.

Entonces:

$$E[\phi] = \int \phi^* \hat{H} \phi d\tau = \int \phi^* \left| -\frac{1}{2}\nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{r_2}^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}} \right| \phi d\tau$$

donde se pueden calcular por separado los valores con cada operador y se convierte en:

$$E[\phi] = \frac{1}{2} Z_{efect}^2 + \frac{1}{2} Z_{efect}^2 - ZZ_{efect} - ZZ_{efect} + \frac{5}{8} Z_{efect}$$

$$E[\phi] \equiv E\left[Z_{efect}\right] = Z_{efect}^2 - 2ZZ_{efect} + \frac{5}{8} Z_{efect}$$

© Reservados todos los derechos de reproducción. Luis A. Montero Cabrera, Universidad de La Habana, Cuba, 2002.

Si se minimiza con respecto a Z_{efect} se llega a que:

$$\frac{\partial E}{\partial Z_{efect}} = 2Z_{efect} - 2Z + \frac{5}{8} = 0$$

$$Z_{efect} = Z - \frac{5}{16}$$

que sustituído en la expresión de la energía arroja:

$$E[\phi] \equiv E\left[Z - \frac{5}{16}\right] = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2$$

Recordemos que:

$$E_0^{exp} = -2.90$$

$$E_0^{(0)} = -4.00$$

$$\frac{\partial E}{\partial Z_{efect}} = 2Z_{efect} - 2Z + \frac{5}{8} = 0$$

y esta aproximación del método de las variaciones da:

$E[\phi] = -2.848$ Hartrees

que es muy parecido al valor experimental.

© Reservados todos los derechos de reproducción. Luis A. Montero Cabrera, Universidad de La Habana, Cuba, 2002.