

TAREA # 6

Física atómica, molecular y materia condensada

Entrega 16 de abril de 2010 antes de la clase

1. Demuestra para la molécula H_2^+ que

$$\frac{1}{2}(E_1 + E_2) - E_{1s} > 0.$$

Discute que significa esto para los estado de enlace y antienlace.

2. Para la molécula H_2^+ evalua la densidad de probabilidad de un electrón en el punto medio del enlace $R_0/2$ y graficala en función de la separación entre iones R . Calcula la diferencia entre densidades,

$$\rho_{\pm} = \psi_{\pm}^2 - \frac{1}{2}(\phi^2(r_a) + \phi^2(r_b)),$$

a lo largo de la línea que une los 2 iones. Discute el resultado.

3. Para la molécula H_2 evalua la densidad de probabilidad de un electrón en el punto medio del enlace $R_0/2$ y graficala en función de la separación entre iones R . Calcula la diferencia entre densidades,

$$\rho_1 - \frac{1}{2}(\phi^2(r_a) + \phi^2(r_b)),$$

a lo largo de la línea que une los 2 iones. La densidad de probabilidad para el electrón 1 se obtiene como $\rho_1 = \int \psi^2(1, 2)d\tau_2$, integrando la amplitud de la función de onda sobre el volumen del electrón 2. Discute el resultado.