

Índice general

3. Problemas - 3	94
------------------	----

Capítulo 3

Problemas - 3

Problema 3.1.

Obtener la expresión de la energía y de las funciones propias normalizadas del estado fundamental y del primer estado excitado del sistema H_2^+ , aplicando el método variacional a la función de prueba:

$$\Psi = C_a \phi_{1s_a} + C_b \phi_{1s_b}$$

tal que: $\phi_{1s_a} = \sqrt{\frac{k^3}{\pi}} \cdot e^{-kr_a}$ $\phi_{1s_b} = \sqrt{\frac{k^3}{\pi}} \cdot e^{-kr_b}$

y sabiendo que:

1. Las funciones ϕ_{1s_a} y ϕ_{1s_b} están normalizadas.
2. $S_{ab} = e^{-kR}[1 + kR + \frac{1}{3}k^2R^2] > 0$
3. $H_{aa}^e = \frac{1}{2}k^2 - k - \frac{1}{R} + e^{-2kR}(k + R^{-1})$
4. $H_{ab}^e = -\frac{1}{2}k^2S_{ab} + k(k - 2)(1 + kR)e^{-kR}$

Representar el valor de la energía para los dos estados, a las distancias internucleares (R) de 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0 y 8.0 u.a, sabiendo que $\left(\frac{\partial W_1}{\partial C_a}\right)_{R_e} = k - 1.24$, siendo W_1 la energía del estado electrónico fundamental, y considerando este valor del parámetro k para toda curva de energía potencial.

Calcular la energía de disociación en u.a., eV y Kcal/mol, considerando que la distancia de equilibrio es 2.0 u.a. y que se encuentra disociado a 8.0 u.a..