

Actividades

- 1-** Considere la configuración del estado fundamental del helio; la distribución de carga resulta:

$$\rho(\mathbf{x}) = e \left[\int 2\delta_3(\mathbf{x}) - \int d^3x_2 |\phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)|^2 - \int d^3x_1 |\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})|^2 \right]$$

donde $\phi(x_1, x_2)$ es la función de onda del estado fundamental de los electrones. El primer término, representa la carga del núcleo, mientras que el segundo y tercer término son la densidad de carga de los dos electrones. Como veremos más adelante, no existe una solución analítica para la función de onda de los electrones, sin embargo, podemos utilizar una muy buena aproximación obtenida a través del cálculo variacional:

$$\phi(x_1, x_2) = \chi(x_1)\chi(x_2)$$

con

$$\chi(\mathbf{x}) = \alpha(\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} \left(e^{-\frac{zr}{a}} + \beta e^{-\frac{2zr}{a}} \right)$$

con $\alpha = 1,48, \beta = 0,61, z = 1,45$.

- a-** Grafique la densidad de carga utilizando el programa Mathematica.
- b-** Calcule la aproximación de Born para la distribución de carga presentada.
- c-** Compare la sección eficaz obtenida, con los datos experimentales obtenidos por Bromberg.
(Bromberg, J. P. (1969). Absolute differential cross sections of elastically scattered electrons. I. He, N₂, and CO at 500 eV. The Journal of Chemical Physics, 50(9), 3906-3921.)