

Tarea 5

A.González

4 de septiembre de 2009

Problema 1, Interacción de Van der Waals

Se trata de calcular la interacción electrostática entre dos átomos de hidrógeno neutro separados por una distancia (R) grande comparada con el radio de Bohr

1. Escriba el Hamiltoniano completo para este sistema y haga un desarrollo de la interacción entre los átomos en $1/R$
2. Si ambos átomos están en el estado fundamental. Calcule la energía de interacción mostrando en particular que varía como R^{-6} .
- 3.Cuál es el origen físico de la interacción de Van de Waals?.

(Hint: Use Teoría de perturbaciones a segundo orden.)

Ud. usando teoría de perturbaciones encontró que la interacción correcta está acotada por abajo de tal forma que

$$W(R) \geq \frac{-8e^2 a_0^5}{R^6} \quad (1)$$

Ahora se trata de encontrar una cota superior usando el método variacional. Considere funciones de prueba tal que

$$\Phi(r_1, r_2) = u_{100}(r_1) \cdot u_{100}(r_2)(1 + AH_1) \quad (2)$$

dónde u_{100} son las respectivas funciones de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno. r_1 y r_2 son las coordenadas que describen la posición de cada electrón. A es el parámetro a variar, y H_1 es para R grande:

$$H \sim \frac{e^2}{R^2}(x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) \quad (3)$$

Porqué Ψ es una elección razonable? encuentre que para R grande

$$W(R) \leq \frac{-6e^2 a_0^5}{R^6} \quad (4)$$