Tarea 7.

1. Obtener la energía del ion de hidrógeno molecular H_2^+ como función de la distancia internuclear R empleando funciones de onda de hidrógeno atómico como prueba. Usar la expresión:

$$E_\pm = E_{1s} + \frac{C \pm D}{1 \pm S} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

Las integrales S, C y D en este caso se pueden calcular de manera cerrada si se emplean coordenadas elípticas. (ξ,η,ϕ), donde

$$\xi = \frac{r_a + r_b}{R}$$
$$\eta = \frac{r_a - r_b}{R}$$

r_a es la distancia al núcleo a, r_b la distancia al núcleo b, separados por una distancia R, y el ángulo ϕ tiene el mismo significado que en coordenadas esféricas o cilíndricas. El intervalo de variación de estas coordenadas es:

$$1 \leq \xi < \infty$$
$$-1 \leq \eta \leq 1$$
$$0 \leq \phi < 2\pi$$

El elemento de volumen es:

$$dV = \frac{R^3}{8}(\xi^2 - \eta^2)d\xi d\eta d\phi$$

Emplear la función de onda 1s de hidrógeno atómico:

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{3/2}}\exp(-r/a_0)$$

a) Calcular la integral de traslape S:

$$S = \int \psi_{1s}(r_a)\psi_{1s}(r_b)dV$$

b) Calcular la energía de interacción de Coulomb C:

$$C = \int \psi_{1s}(r_a)\left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b}\right)\psi_{1s}(r_a)$$

c) Calcular la integral de intercambio D:

$$D = \int \psi_{1s}(r_a) \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} \right) \psi_{1s}(r_b)$$

c) Calcular la energía total del ión molecular en este estado.

Nota: Las siguientes integrales indefinidas pueden ser de alguna utilidad en este ejercicio.

$$\begin{aligned}
\int u \exp(\lambda u) du &= \left(\frac{u}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2} \right) \exp(\lambda u) \\
\int u^2 \exp(\lambda u) du &= \left(\frac{u^2}{\lambda} - \frac{2u}{\lambda^2} + \frac{2}{\lambda^3} \right) \exp(\lambda u)
\end{aligned}$$