



APANTALLAMIENTO EN EL ÁTOMO DE HELIO Y EN EL ÁTOMO DE MOSHINSKY

Humberto Laguna¹, Robin Sagar¹

¹Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa, San Rafael
Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, CP 09340, Ciudad de México, México
e-mail: hlag@xanum.uam.mx

El apantallamiento en las funciones de onda variacionales es una manifestación de la correlación electrónica en la aproximación orbital. En este trabajo se comparan el estado singulete basal de la serie isoelectrónica del helio, el estado basal del átomo de Moshinsky en 3 dimensiones como función del potencial entre partículas, y el estado basal del átomo de Hooke (dos electrones confinados en un potencial armónicos que interactúan entre sí por un potencial de Coulomb). El apantallamiento puede ser estudiado desde la perspectiva de la teoría de la información utilizando una medida de correlación, la información mutua.

Así, se calcula la correlación, por medio de la información mutua, en las funciones de onda de variacionales del átomo de Moshinsky en 3 dimensiones y su comportamiento se compara: 1. Con las soluciones analíticas del modelo; 2. Con las funciones variacionales del átomo de helio; 3. Con las funciones variacionales del átomo de Hooke.

En esta perspectiva, se discuten los efectos previamente observados en funciones variacionales sencillas del helio, y con el átomo de Moshinsky se demuestra que el apantallamiento es un fenómeno que se manifiesta cuando el potencial de interacción es repulsivo, no así cuando éste es atractivo.

El enfoque del análisis es estudiar si el criterio energético es consistente con la correlación estadística que demuestran las densidades (que puede ser un criterio de qué tan buena es la densidad). También se discute la localización mediante la comparación de las entropías de Shannon de los modelos.

Finalmente, utilizando el átomo de Moshinsky en una dimensión, se demuestra que las partículas no se apantallan cuando interactúan, sea atractiva o repulsivamente.