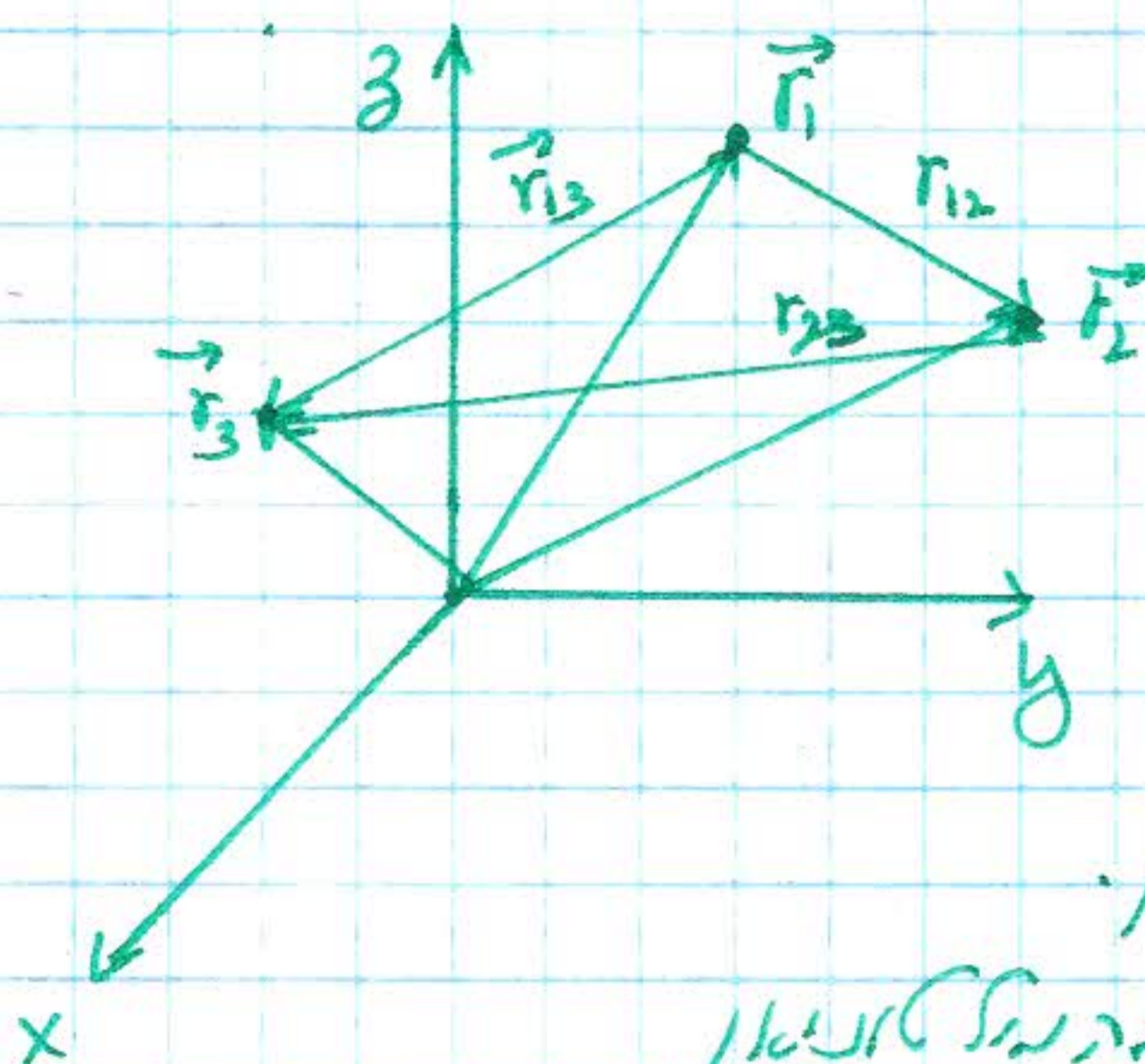


אטום הליתיום Li

למדור כפי לטיקול באטום הליתיום. האופול המדויקת 15 וצגים למג
 כיצד צבאר מערכות בעלות מספר קטן של אלקטרונים (1-2) למדויקת
 מרובות אלקטרונים אשר צבארן נכס לביטוי סוגות רובסאית ולענות



לפתרון מתונה של בעיה.
 טיפוסית לצבאר את הבעיה:

אנחנו מנסים עם כאלו כי בקירוב העדיף עונו.
 כלומר העדיף כבד משמעות מן הווקטורנש
 ושם נכבד העשרה משל בקירוב במכשיר העדיף.

הפוסט אנו מאפשר את איבר הווקטור היתריות בהתאמתו.

הערה: כאשר נצבאר לטיקול במתקנת נבצר קורה מתחיל המכונש קורה בורן-
 אלקטרוני.

כפי שמתן לטות מן הווקטור, גם יתתי בקירוב בו העדיף קטאו, הבעיה הפכת
 לסבוכה מאוד. צבאר עם שבתאו את התאמתו:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_3^2 - \frac{ze^2}{|r_1|} - \frac{ze^2}{|r_2|} - \frac{ze^2}{|r_3|} + \frac{e^2}{|r_{12}|} + \frac{e^2}{|r_{13}|} + \frac{e^2}{|r_{23}|}$$

או האופן כעלוי:

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{j=1}^N \nabla_j^2 - ze^2 \sum_{j=1}^N \frac{1}{|r_j|}}_{\hat{H}_0} + e^2 \sum_{\substack{j < k \\ j, k=1, \dots, N}} \frac{1}{|r_{jk}|}$$

כאשר האבר העתק סכום קרם לענן בסיס המערכות כפולש ומתאמתן
 הווקטור j=1 עד במחצית שלטמו אלקטרון איתו צובה אוטוטיקציה של 1/3.
 אנו מניחים לביטוי את הבעיה:

$$\hat{H} \Psi(r_1, r_2, r_3) = E \Psi(r_1, r_2, r_3)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V$$

$$\hat{H}_0 = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + \hat{h}(3)$$

\hat{H}_0 הינו אופרטור פירוק האופן הבא:

כאשר $\hat{h}(j)$ הינו האינטרטמון של אטום פנימי מן הסוג $Z=3$:

$$\hat{h}(j) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_j^2 - \frac{ze^2}{|r_j|}$$

אדם פתח משוואת שדוואר הספרואית של \hat{H}_0 היא מצבית של הפעם והאנרגיה היא סכום פונקציות האנרגיה של איתר מן האלקטרונים הנותרים תלום.

התמונה הנלווה " להתראות הקורה מספר אננס עבור הפעם

היוסר האנס הבא: $\Psi^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = 1s(1)1s(2)1s(3)$

ערב כיה צרר
810000000
ערבור סני
151

נתסה את אנרגיות האנס וקרבל:

$$E_{1s,1s,1s}^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} \right) = -\frac{27e^2}{2a_0} = -367.4 \text{ eV}$$

נתסה כעת את התקון הראשון התעית התפרדות עבור האנרגיה:

$$E_{1s,1s,1s}^{(1)} = \langle 1s(1)1s(2)1s(3) | \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{13}} + \frac{e^2}{r_{23}}}_{V_1} | 1s(1)1s(2)1s(3) \rangle =$$

ערב
הוא הפעם
הכמה

$$= \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 |1s(1)|^2 |1s(2)|^2 |1s(3)|^2 \left[\frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{13}} + \frac{e^2}{r_{23}} \right]$$

$$= \int d^3r_1 d^3r_2 |1s(1)|^2 |1s(2)|^2 \int d^3r_3 |1s(3)|^2 \left[\frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{13}} + \frac{e^2}{r_{23}} \right]$$

$$= 3 \int d^3r_1 d^3r_2 |1s(1)|^2 |1s(2)|^2 \int d^3r_3 |1s(3)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} = 3 \left(\frac{52}{4} \right) \frac{e^2}{2a_0} = 153.1 \text{ eV}$$

המיושלים ה-6 מתקנים המופיעים בפעם הראשית ישנות הינם כמעט סך האלקטרונים אולם למעשה להבתם. ניתן לתפס אנרגיה איתר מכוחות ז"י תלכה פסוקה של סומט האונדקסס - תלכה '2' ה- '3' תעיה התעיה הראשונה את תעיה השניה עם ~~התפרדות~~ הצורה הפונקציונלית של הצמיתה בין האלקטרונים צבה לפעם האלקטרונים שייש נעשה להבתם.

$$\Rightarrow E \approx E^{(0)} + \frac{1}{2} E^{(1)} = -367.4 \text{ eV} + 153.1 \text{ eV} = \underline{\underline{-214.3 \text{ eV}}}$$

בצורה למתשמות עבור אדם האננס, אדם נפתח בעתה $\Psi^{(0)}$ תמונה אנרגיות הומוציה וראו ביצור ~~התפרדות~~ והומוציה של התלכה האנרגיות לתפס הצמיתה את איתר הדרך כמו סתבלת התעית התפרדות מספר כהן.

אנרגיות הנורמלציה תפיה: $\Sigma = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle + \langle \phi | \hat{V} | \phi \rangle$

גאוסר: $\langle \phi | \hat{H}_0 | \phi \rangle = E_{15,15,15}^{(0)} = -367.4 eV$
 $\langle \phi | \hat{V} | \phi \rangle = E_{15,15,15}^{(1)} = 153.1 eV$
 $\Rightarrow \Sigma = E_{15,15,15}^{(0)} + \frac{1}{\lambda} E_{15,15,15}^{(1)} = -214.3 eV$

אנרגיות משלב הייסוד העשיריית ניתנה למערכה הנשיון ד"י ונמצאה משולש של אנרגיה - L_i . אנרגיה זו היום $E_{g.s.}^{exp} = -203.5 eV$

כלומר האנרגיה הנורמלציונית שחשבתו נמוכה מאנרגיות משלב הייסוד האמיתיות של המדככפ. כלומר הנורמלציה אינה מתנהגת תסס עליון!

הסיבה לכך היא שפונקציות משלב הייסוד המקורבת בהי התמשט להיות משלב הייסוד האמיתי של המדכככ אינם פוזיקאליות ואם כן אינם מתאומם לטאור מקורב של משלב הייסוד של אטום ה- L_i .

הכפי להפוך את הפולי המקורבת לפוזיקאליות עלינו לפנות אליה את עקרון פאולי האוס כי פולי העל הכללת צריכה להיות אוטו-סומטית להתלפת אלקטרונם.

התלק המסתבי של פולי העל המקורבת בהי התמשטנו היום:

$\Psi_{למבוי}^{(1,2,3)} = 1s(1)1s(2)1s(3)$

פולי זה היום סומטית תסת התלפת זוג אלקטרונם. ואם כן, בדומה לסיפול שהוצמד עבור אטום ה- He, נכנס להכפיל את התלק המסתבי הסומטיו הפולי ספון אוטו-סומטית תסת התלפת אלקטרונם כן הפולי הכללת תקינם את עקרון פאולי. המדכככ שלפנת צ אלקטרונם את התמשט נפל לנכנס הפולי $(1) \alpha$ את השני הפולי ספון $(2) \beta$ והשלישי אוב $(3) \beta$ לבתר לצנעמא את $(3) \alpha$. הכפי לתמת משלוש פולי ספון אלו פולי ספון אוטו-סומטית להתלפת אלקטרונם למתמש הכלי שפיתמט אוטו-סומטית של פולי על - ציטרמנטל סלניט. ציטרמנטל סלניט ר עבור צ-ים היום היתבה

של הציטרמנטל הצינו-אלקטרונם שרממט:

	$\alpha(1)$	$\beta(2)$	$\alpha(3)$	
$\Psi_{ספון}^{(1,2,3)} = \frac{1}{\sqrt{3!}}$	$\alpha(2)$	$\beta(2)$	$\alpha(2)$	=
	$\alpha(3)$	$\beta(3)$	$\alpha(3)$	

↑ למתמשט
 ↑ למתמשט, למתמשט

(16)

צרכנוטג צוממאפסט סק וס היה שטח צמזנות צמות!

נהנה במבניס:

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \alpha(1)\alpha(2)\beta(3) - \beta(1)\alpha(2)\alpha(3) + \beta(1)\alpha(2)\alpha(3) + \right. \\ \left. + \alpha(1)\alpha(2)\beta(3) - \alpha(1)\alpha(3)\beta(2) \right] = 0$$

צנומס נהנה צמות כו אומ ערו יכנלש עכנת פו לצ ספנת אטוי-סעטנות עיתרפת אוקרסרונש עכור צ אוקרסרונש!

ולכן, אומ ערונלש צכנש אור פו העל העקורבת בתק מסתבי הו צ הוקרסרונש מאולכסש הכו $1 \leq$ מוכפל הכו ספון אטוי סומטנית!
צנומס ערנין פאולו מונד מאומט (אוסר עעמ) אולכס אור שלש הוקרסרונש האותם הומה העבתות סק פו הספון האטוי-סומטנית מאופסאת פו העל הכוללת.

עצ כה, התקשמ לזכנש את פו העל בתק מסתבי מוכפל הפונקציות ספון ויאומ כו פו העל הכללת העקורבת ממאפסט. לשאלת הסולם האש נהנה לזכנש ספון-אורוקרסרונש, בצנומס לטיפל סביצמ עכורטלש ה-He, ועכנת מענן צרכנוטג סלייט אטוי סומטנית באשר ערנין נשכ לשעטנות שלש הוקרסרונש בתק העסתבי 15.
עלויס הספון אוקרסרונש שנגר הימ:

כדור הכו
אורטובה
תק מותבי
מרכפל
כדור ספון.

$$f(1) = 15(1)\alpha(1); \quad g(2) = 15(2)\beta(2); \quad h(3) = 15(3)\alpha(3)$$

צרכנוטג סלייט העתקבלת הימ:

$$\psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 15(1)\alpha(1) & 15(1)\beta(1) & 15(1)\alpha(1) \\ 15(2)\alpha(2) & 15(2)\beta(2) & 15(2)\alpha(2) \\ 15(3)\alpha(3) & 15(3)\beta(3) & 15(3)\alpha(3) \end{vmatrix} = 0$$

צרכנוטג כו אנה מצנרהשל פו מתבות המוכפלת הכו ספון אולכס הו ערנין ממאפסט סק אס היה ופע שטח צמזנות צמות (היאוסון והלויסי).
צנומס בת צכק שמיטת אונתן אולכס אור שלש הוקרסרונש ביתר צ ~~ממ~~ באוקרסרונש העסתבי 15 סק פו העל הכללת ממאפס ערק הרכויסה

לאנטי-סימטריה יחסית לתורת אלקטרונים, כלומר דקה דקרון פאולי.
 כלומר, עלינו למצוא פונקציה שתתאים את כל התנאים הנ"ל.

כיוון שאנחנו נמצאים ב-2 אלקטרונים וכל אחד מהם יכול להיות במצב ~~הוא~~

האנטי-סימטריה המסתתרת 15 פונקציות סימטריות מתאימות לאנטי-סימטריה

אנטי-סימטריה
 באיזום
 ארבעה קוונטים
 הסתת.

2 אלקטרונים ב-15 אנטי-סימטריה של המערכת הכוללת היא 25.

לפיכך נבחר את שלושת המצבים האנטי-סימטריים הבאים:

$$f(1) = 15(1)\alpha(1) ; g(2) = 15(2)\beta(2) ; h(3) = 25(3)\alpha(3)$$

וכפי הנ"ל המקורבת תהיה כזו:

$$\Psi^{(10)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 15(1)\alpha(1) & 15(1)\beta(1) & 25(1)\alpha(1) \\ 15(2)\alpha(2) & 15(2)\beta(2) & 25(2)\alpha(2) \\ 15(3)\alpha(3) & 15(3)\beta(3) & 25(3)\alpha(3) \end{vmatrix}$$

כפי הנ"ל היו אנו המצבון המצוי, עבור משולש שריון-לר הסטציונרית של אנטי-סימטריה.
 ה-15 אנטי-סימטריה היא כוונת צורה מקורבת שמקיימת את דקרון האנטי-סימטריה, אולם
 מתאפסת ותתאם אולימה לתחבולה ורואציה והפרדות.

במקרה זה ישנם שני מצבים אנטי-סימטריים וזהו כיוון נכונה לתפוס את
 התצורה $\Psi^{(10)}$ ו- $\Psi^{(00)}$ לתת - 36 אנטי-סימטריה אנטי-סימטריה דוגמת יתאפסו

עם אנטי-סימטריה התחבולה $(15|25) < 1 - (\beta|\alpha)$ מתאפסים.

באופן זה עשויים לפתור את הבעיה האנטי-סימטריה:

$$\begin{aligned} \Psi^{(10)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}} & \left[15(1)15(2)25(3)\alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \textcircled{1} \right. \\ & - 15(1)25(2)15(3)\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) - \textcircled{2} \\ & - 15(1)15(2)25(3)\beta(1)\alpha(2)\alpha(3) + \textcircled{3} \\ & + 15(1)25(2)15(3)\beta(1)\alpha(2)\alpha(3) + \textcircled{4} \\ & + 25(1)15(2)15(3)\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) - \textcircled{5} \\ & \left. - 25(1)15(2)15(3)\alpha(1)\beta(2)\alpha(3) \right] \textcircled{6} \end{aligned}$$

כדור צלילם וצבצור את האוטוגרף של סביבה הפוטנציאל:

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle ; \hat{V} = \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{13}} + \frac{e^2}{r_{23}} = \hat{V}_{12} + \hat{V}_{13} + \hat{V}_{23}$$

כדור, גם כפול המקומות שבנו, התאקס חנוע, אולם נעשה להבחנה ולקבץ את משתנים האובדנים $\hat{V}_{12}, \hat{V}_{13}, \hat{V}_{23}$ יתנה את איתם התפלגה בציוק האוטוגרף

ולכן מסתובק לתפסה עבור איתם נעבם להיפסל ה-3:

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle = 3 \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_{12} | \psi^{(0)} \rangle$$

עם כן צלילם לתפסה את האוטוגרף הכנא:

$$\langle \psi^{(0)} | \hat{V}_{12} | \psi^{(0)} \rangle = \langle 1+2+3+4+5+6 | \hat{V}_{12} | 1+2+3+4+5+6 \rangle$$

$$\langle 1 | \hat{V}_{12} | 1+2+3+4+5+6 \rangle$$

נשתמש מן האובד ה: ונשתר האובדנים האוטוגרף כמ אוקר מתאפסער. כיוון ש \hat{V}_{12} הוא פוטנציאל מרתבי אזי כאוקר נעשה אית $\langle 1 | \hat{V}_{12} | 2 \rangle$ התאקס הספוי של האוטוגרף כיוון ויתן $\langle \beta(2) | \beta(2) \rangle \langle \alpha(1) | \alpha(1) \rangle = 0$ כלומר אוקר כמ ויתאפס.

באלפן צומת האובד $\langle 1 | \hat{V}_{12} | 3 \rangle$ ויתאפס עקב האוטוגרף $\langle \alpha(1) | \beta(1) \rangle$.

האובד $\langle 1 | \hat{V}_{12} | 4 \rangle$ מתאפס עקב $\langle \alpha(1) | \beta(1) \rangle$.

האובד $\langle 1 | \hat{V}_{12} | 5 \rangle$ מתאפס עקב $\langle \beta(2) | \alpha(2) \rangle$.

כלומר נותר עם שט אובדנים $\langle 1 | \hat{V}_{12} | 1 \rangle - \langle 1 | \hat{V}_{12} | 6 \rangle$

נבדוק תפוסה של $\langle 1 | \hat{V}_{12} | 6 \rangle$, כיוון ש \hat{V}_{12} תלוי רק בקואורדינטות של

איתם חנוע 1-2 האוטוגרף של הקואורדינטות של האלקטרון השלישי נפרדת

מן האוטוגרף של 1-2 כק שפכל ~~אוקר~~

$$\langle 1 | \hat{V}_{12} | 6 \rangle = \langle \alpha(1) | \alpha(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta(2) \rangle \langle \alpha(3) | \alpha(3) \rangle \langle \beta(2) | \alpha(2) \rangle \langle \alpha(1) | \beta(1) \rangle \langle \alpha(3) | \beta(3) \rangle$$

אוקר אוקר כמ מתאפס כק שיתפוסה היתוצת הים:

$$\langle 1 | \hat{V}_{12} | 1+2+3+4+5+6 \rangle = \langle 1 | \hat{V}_{12} | 1 \rangle =$$

$$= \langle \alpha(1) | \alpha(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta(2) \rangle \langle \alpha(3) | \alpha(3) \rangle \langle \beta(2) | \alpha(2) \rangle \langle \alpha(1) | \beta(1) \rangle \langle \alpha(3) | \beta(3) \rangle =$$

$$= \int d^3r_1 \int d^3r_2 |\alpha(1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\alpha(2)|^2 = \mathcal{J}_{\alpha, \alpha}$$

כמו האוטוגרף התקולומה, הוא מכונה כק הוא מתאר אולטרהתק צנה

התלפס 2
פול תפס משום
סוקן אוק הויל
משום סוקוק גפני
ציוק האוטוגרף
ולכן
 $\langle \psi^{(0)} | \hat{V}_{12} | \psi^{(0)} \rangle$
 $= \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_{13} | \psi^{(0)} \rangle$
 $= \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_{23} | \psi^{(0)} \rangle$

קולומבה קולוסות בין שתי צבניות מלפני המלכות ע"י $\|S\|^2$
 $1 - \|S(2)\|^2$. אולי כזה אולי לצימור הקולומבה הקולוסות בין האקסטרנס.

כתיב עתים זתפגת: $\langle 2 | \hat{V}_{12} | 1+2+\dots+6 \rangle$

$\langle 2 | \hat{V}_{12} | 1 \rangle$ כמו מקורפ ממשפס דקב האוטמלר הספיו.

$\langle 2 | \hat{V}_{12} | 3 \rangle$ ממשפס גפ הוא דקב האוהר הספיו.

כק גפ $\langle 2 | \hat{V}_{12} | 4 \rangle - 1 - \langle 2 | \hat{V}_{12} | 6 \rangle$ ולפן אמ גתפגדפ:

$$\langle 2 | \hat{V}_{12} | 1+2+\dots+6 \rangle = \langle 2 | \hat{V}_{12} | 2 \rangle + \langle 2 | \hat{V}_{12} | 5 \rangle$$

האוהר הווסון הוט:

$$\langle 2 | \hat{V}_{12} | 2 \rangle = \langle 1S(1) 2S(2) | \hat{V}_{12} | 1S(1) 2S(2) \rangle \langle 1S(3) | 1S(3) \rangle \langle 1'' | 1'' \rangle$$

$$= \langle 2(2) | 2(2) \rangle \langle \beta(3) | \beta(3) \rangle = 1''$$

$$= \int d^3r_1 \int d^3r_2 |1S(1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |2S(2)|^2 = \underline{\underline{J_{1S,2S}}}$$

צנתי הצמיה הקולומבה הממוצעת בין אקסטרנס אחר שושה ברמה 1S

לפולקסרן שט שושה ברמה 2S. גפ אוהר כפ אולוהר אוהר הקולוסו.

האוהר הספיו הוט:

$$\langle 2 | \hat{V}_{12} | 5 \rangle = \langle 1S(1) 2S(2) | \hat{V}_{12} | 2S(1) 1S(2) \rangle \langle 1S(3) | 1S(3) \rangle \langle 1'' | 1'' \rangle$$

$$= \langle 2(1) | 2(1) \rangle \langle 2(2) | 2(2) \rangle \langle \beta(3) | \beta(3) \rangle = 1''$$

$$= \langle 1S(1) 2S(2) | \hat{V}_{12} | 2S(1) 1S(2) \rangle =$$

$$= \int d^3r_1 \int d^3r_2 1S^*(1) 2S^*(1) \frac{e^2}{r_{12}} 1S(2) 2S(2) = \underline{\underline{K_{1S,2S}}}$$

האוטמלר הכפ צומה לאוטמלר הקולומבה י פולקסרן שמהקפסל אקסטרנס

1-2 בצביות האוטמלר השפלו. אוטמלר כפ הקולומבה

השיתוף ואין לו אשאלה קולוסו. אוטמלר כפ מפיז מהאט-סוטמוצפ

שכביט ע"ל פו' תל כפפ צ'אמטלר סלילר.

ולפן: $\langle 2 | \hat{V}_{12} | 1+2+\dots+6 \rangle = J_{1S,2S} - K_{1S,2S}$

כאלפן צומה נפל זתפגת גפ האוטמלר וסכפגת התפגת

הספיו:

$$\left\{ \begin{aligned} \langle 1 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle &= J_{15,15} \\ \langle 2 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle &= J_{15,25} - K_{15,25} = \langle 2 | \hat{V}_{12} | 2 \rangle - \langle 2 | \hat{V}_{12} | 5 \rangle \\ \langle 3 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle &= \langle 3 | \hat{V}_{12} | 3 \rangle = J_{15,15} \\ \langle 4 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle &= \langle 4 | \hat{V}_{12} | 4 \rangle = J_{15,25} \\ \langle 5 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle &= \langle 5 | \hat{V}_{12} | 5 \rangle - \langle 5 | \hat{V}_{12} | 2 \rangle = J_{15,25} - K_{15,25} \\ \langle 6 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle &= \langle 6 | \hat{V}_{12} | 6 \rangle = J_{15,25} \end{aligned} \right.$$

ועתה נבססנו את כל האינטראקציות הללו:

$$\begin{aligned} \langle \Psi^{(0)} | \hat{V}_{12} | \Psi^{(0)} \rangle &= \frac{1}{6} \langle 1+...+6 | \hat{V}_{12} | 1+...+6 \rangle = \\ &= \frac{1}{6} (2 J_{15,15} + 4 J_{15,25} - 2 K_{15,25}) \end{aligned}$$

ועתה נאסוף נכפול ב-3, נקבל את $E^{(1)}$:

$$E^{(1)} = 3 J_{15,15} + 2 J_{15,25} - K_{15,25} = 3 \langle \Psi^{(0)} | \hat{V}_{12} | \Psi^{(0)} \rangle$$

את האינטראקציות הקולומביאיות ומונטג'רי השותף, ניתן לתפס אנליטית באמצעות
 ויתרנות עבור התקון מסדר ראשון לאנרגיה:

$$\rightarrow E^{(1)} = 83.5 \text{ eV} \quad ; \quad E^{(0)} = - \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} \right) = -275.5 \text{ eV}$$

$$E^{(0)} + E^{(1)} = -192.0 \text{ eV}$$

אזנה אם התוצאה שתקבל צפוי עדיין תקינה, אפילו שאת $\Psi^{(0)}$
 ולא נבצר ומוצעת הטען העיוני, ואת כמות הסטטיסטיקה
 שלב היוסוף האנרגיה המדויק שהיא -203.5 eV .

כאובן ניתן לפרש את הקירובים ש"ש אלו כעם התבוננות מסדר
 גבוה יותר או לאפשר נכונותם של הטען העיוני ה $\Psi^{(0)}$ ואם לניסוח

פרמטרים מספרים לספון אורביטאלית המרכיבת את $\Psi^{(0)}$ במצב זה שהיא תואמת
 לספון את האינטראקציות השונות והאנרגיות השונות:

$$\left\{ \begin{aligned} J_{15,15} &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 |1s(r_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |1s(r_2)|^2 = \frac{5}{8} \frac{Z e^2}{a_0} \\ J_{15,25} &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 |1s(r_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |2s(r_2)|^2 = \frac{17}{81} \frac{Z e^2}{a_0} \\ K_{15,25} &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 1s^*(r_1) 2s^*(r_2) \frac{e^2}{r_{12}} 1s(r_2) 2s(r_1) = \frac{16}{729} \frac{Z e^2}{a_0} \end{aligned} \right.$$

הספון המדויק
 התבוננות
 $E^{(1)} - E^{(0)}$
 ספון המדויק
 ספון המדויק
 ספון המדויק
 ספון המדויק
 ספון המדויק
 ספון המדויק

הספון המדויק
 ספון המדויק
 ספון המדויק
 ספון המדויק

כדי תיבון וכו' גם קצתה קושי וכו' מה צורה $1S(1) 2S(2) 3P(3)$
 עם התורה מס' 0 פו' 2S - 1 - 2P צורת האנטי סימטריה. אולם כאשר
 למטה את העקרון מס' 1 האסון הימני 2S - 1 - 2P תתבצב לש 2S תפיה
 למטה יתם האנטי סימטריה מן הימני 2P ולכן בתמונה הקושי וכו' מה צורה 2S
 ולו 2P האנטי סימטריה כדגש יתם אפקט של סימטריה וכו' של סימטריה
 30 הימני.

נתון בספרות זממן:

$$\begin{cases} 1S(1) \alpha(1) \equiv 1S(1) \\ 1S(1) \beta(1) \equiv \overline{1S(1)} \end{cases}$$

ולכן לפי אבן טאטש הי- זה עיסוק צטרמטת סליוסר האנטי סימטריה:

$$\Psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1S(1) & \overline{1S(1)} & 2S(1) \\ 1S(2) & \overline{1S(2)} & 2S(2) \\ 1S(3) & \overline{1S(3)} & 2S(3) \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} 1S & \overline{1S} & 2S \end{vmatrix}$$

כאשר הכתוב המקורב מומן לוקח בתבואן את מקצם הטרמטל ואת אבדו
 הטרמטל של הצטרמטת הי.

במקרה הי- N אלקטרונים צטרמטת סליוסר תפיה מה צורה:

$$\Psi^{(0)}(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \dots & \phi_N(1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(N) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix}$$

כאשר האלקטרונים נבחרים מתוך הכתוב האלקטרונים האנטי סימטריה הנמנים
 בוניה בה צורה מס' 0:

$$\phi_1(1) = 1S(1) \alpha(1) = 1S(1)$$

$$\phi_2(1) = 1S(1) \beta(1) = \overline{1S(1)}$$

כאשר מס' לצורה כי 15 אולם פו' העל הטרמטל

הפותרת את משוואת סיבוב הטרמטל הטרמטל הטרמטל קוונה מס' (0)
 הפותרת את הטרמטל האנטי סימטריה הי- זה עיסוק הטרמטל האנטי סימטריה

הטרמטל האנטי סימטריה $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2S}{1S}$ הימני תמנה מקרה! שמתחבבת

צטרמטת סליוסר כקוונה מס' (0) שמתחבבת הימני קוונה הטרמטל
 ומתחבבת לרעה.