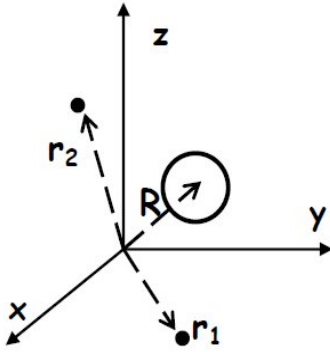


BÖLÜM 25

HELYUM ATOMU

Şimdi, Hidrojene benzer atomları daha detaylı inceleyelim. Bir sonraki en basit sistemi tartışmaya başlayalım: Helyum atomu. Bu durumda, R noktasında konumlanmış $Z = 2$ yükü bulunan bir çekirdek etrafında r_1 ve r_2 koordinatlarına sahip



iki elektronumuz var. Hidrojen atomunda, kütle merkezine ötelenmeyle oluşan çekirdek hareketini görmezden gelmiştik. Sonra, merkezde dönmekte olan, indirgenmiş kütlesi bir elektron kütlesine oldukça yakın bir etkin parçacık için Schrödinger denklemini elde etmiştik. Helyum daki gibi üç parçacıkla ilgilendiğimizde kütle merkezine öteleme oldukça zordur. Ancak çekirdek, herhangi

iki elektronun birinden daha büyük olduğundan

($M_{\text{çek}} \approx 7000 m_e$), çekirdeğin atomun kütle merkezinde bulunduğunu düşünmek oldukça iyi bir yaklaşımdır.

Bu kütle merkezi koordinatlarını bulma yaklaşımında,

$R = 0$ ve elektron koordinatları (r_1 ve r_2) ile her elektron ü ile çekirdek arasındaki mesafe ölçülür. Ayrıca, kütle merkezi çevresinde elektronların çekirdek etrafında döndüğü bağıl d mesafesinden çekirdek

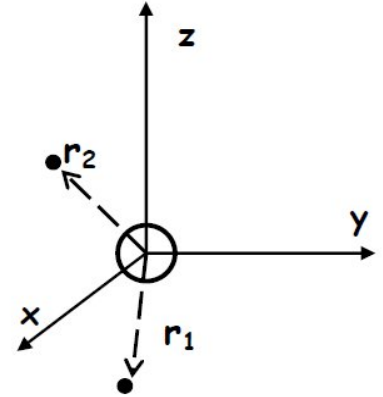
hareketini (kabaca atomun kütle merkezinden,

bükülmeksizin ötelenmeye karşılık gelir) ayrı tutmakla iyi yapıyoruz. Böylece:

Biz **sadece elektron hareketine odaklanıyoruz** ve çekirdek hareketini ihmal ediyoruz.

Çok boyutlu sistemlerde tanımlananla aynı şekilde, daha çok sayıda parçacığın (1,2,3,...) kuantum mekaniğini ele alacağız. $\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3, \dots$ operatörlerini ve bunlarla ilgili $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3, \dots$ momentum operatörlerini türeteceğiz. Bir (i) parçacığına ait operatörlerin, herhangi bir diğer (j) parçacığına ait bütün operatörlerle komute olduğu kabul edilir:

$$[\hat{r}_1, \hat{p}_2] = [\hat{p}_2, \hat{r}_3] = [\hat{r}_2, \hat{r}_3] = [\hat{p}_1, \hat{p}_3] = \dots \equiv 0$$



Bu arada, aynı parçacığa ait operatörler, normal komutasyon bağıntılarına uyar. Verilen bir eksen de konum ve momentum, komute olmaz;

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_{x_1}] = i\hbar \quad [\hat{y}_1, \hat{p}_{y_1}] = i\hbar \quad [\hat{z}_1, \hat{p}_{z_1}] = i\hbar$$

ancak farklı eksenlere ait bütün bileşenler komute olur:

Görüldüğü gibi, çoklu elektronlarla uğraşmanın en büyük sorunlarından biri, gerekli olan değişken sayısındaki patlamadır!

Bu operatörler cinsinden, Helyum atomu için Hamiltonyen operatörlerini çabucak yazabiliriz:

$$\hat{x}_1 \hat{y}_1 = \hat{y}_1 \hat{x}_1 \quad \hat{p}_{z_1} \hat{y}_1 = \hat{y}_1 \hat{p}_{z_1} \quad \hat{p}_{z_1} \hat{p}_{x_1} = \hat{p}_{x_1} \hat{p}_{z_1} \quad \text{v.b.}$$

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|}$$

1.elektronun kinetik enerjisi

1.elektron-çekirdek arasındaki çekim

elektron-elektron arasındaki itme

2.elektronun kinetik enerjisi

2.elektron-çekirdek arasındaki çekim

Bu Hamiltonyenler, esasen, bütün sabitler (e , m_e , ϵ_0 , vb.) denklemde yer aldığı için göz korkutur. Bu sabitler, uzunluk, kütle ve enerjiyi ifade etmek için SI birim sistemini (metre, gram, saniye) kullanmaya karar vermemizin bir sonucudur. İlgilendiğimiz kütleler tipik olarak 10^{-28} g, mesafeler 10^{-10} m ve enerjiler 10^{-18} J mertebesinde olduğundan bu yaklaşım kullanışsızdır. Bu sebeple bunları, **atomik birim** cinsinden ifade etmek daha kolaydır. Bu birim sisteminde birim kütleyi, elektronun kütlesine (m_e), birim yükü, elektronun yüküne (e) ve açısal momentum birimini, $\hbar$ 'ye eşit seçiyoruz. Ayrıca, serbest uzayın dielektrik sabiti ($4\pi\epsilon_0$), 1 olacak şekilde elektrostatik birimlerle çalışıyoruz. Bu dört seçimin sonucu, iki açıdan değerlendirilir. İlk olarak, Helyum atomunun (ve gerçekten herhangi bir atom veya molekülün) Hamiltonyeni, bütün sabitler birimli olduğundan ve denklemi yazarken ihmal edilebildiğinden büyük ölçüde işlemleri kolaylaştırır:

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_1} - \frac{Z}{\hat{r}_2} + \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|}$$

$$= -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_1} - \frac{Z}{\hat{r}_2} + \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|}$$

Bu, bizim ileride karşılaşacağımız matematiği büyük ölçüde basitleştirir. Bu noktadan itibaren atomik birimleri kullanacağız. Bu birimleri seçmemizin ikinci bir yararı, enerji, kütle, mesafe, açısal momentum, v.b. birimler artık ilgilenilen atom ve moleküllerin boyutlarıyla uyumludur.

Atomik birim ve eşdeğer SI birimleri		
Büyükölük	Doğal birim	Eşdeğer SI birimi
Elektron kütlesi	$m = 1$	$9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Yük	$ e = 1$	$1.06 \times 10^{-19} \text{ C}$
Açısal momentum	$\hbar = 1$	$1.05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Dielektrik sabiti	$\kappa_0 = 4\pi\epsilon_0 = 1$	$1.11 \times 10^{-10} \text{ C}^2.\text{J}^{-1}.\text{m}^{-1}$
Uzunluk	$\kappa_0 \hbar^2 / m e^2 = a_0 = 1 \text{ (bohr)}$ (Bohr yarıçapı)	$5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$
Enerji	$\frac{m e^4}{\kappa_0 a_0} = 1$ (Hartree)	$4.36 \times 10^{-18} \text{ J} = 27.2 \text{ eV}$
Süre	$\frac{\kappa_0^2 \hbar^3}{m e^4} = 1$ 1.Bohr yörüngesinde elektronun periyodu	$2.42 \times 10^{-17} \text{ s}$
Hız	$\frac{e^2}{\kappa_0 \hbar} = 1$ 1.Bohr yörüngesinde elektronun hızı	$2.19 \times 10^6 \text{ kg}$
Elektrik potansiyeli	$\frac{m e^3}{\kappa_0^2 \hbar^2} = \frac{e^2}{\kappa_0 a_0} = 1$ 1.Bohr yörüngesinde elektronun potansiyeli	27.21 V
Manyetik dipol moment	$\frac{e \hbar}{m} = 1 \text{ (Bohr manyetonunun 2 katı)}$	$1.85 \times 10^{-23} \text{ J.T}^{-1}$

Böylece, tutarlı atomik birimlerle çalıştığımız müddetçe, bu kadar çok bilimsel gösterimi takip etmeksizin aynı mertebeden enerji, mesafe, açısal momentum,...değerlerini bulmamız mümkün olacaktır.

Schrödinger denklemi, H atomu için çözümlendikten sonra, uzun süre geçmeden Helyum atomunun da çözümleneceğine inanıldı. Ancak, bilim adamları başarılı olmaksızın onlarca yıldır bu üç cisim problemini çözmeye çalıştılar. Çok çok doğru yaklaşımlar geliştirildi fakat tam, kesin çözüm bulunamadı. Sonuçlarına bakılınca, yukarıda bahsedilen basitleştirmelerle dahi Helyum atomunun öz durumlarını belirlemek imkânsızdır. İlgilenilen problemlerin çoğunda kesin çözüm bulunamadığından bu duruma kimyada sıkça rastlanır. Dolayısıyla bu ders boyunca yaklaşımlara başvuracağız.

Etkileşmeyen Elektron Yaklaşımı

Helyumda dikkat edeceğimiz birinci husus, elektron-elektron itme terimini ihmal edersek Hamiltonyenlerin ayrılabilir olduğudur:

$$\hat{H}_{ind} = \frac{\nabla_1^2}{2} + \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_1} - \frac{Z}{\hat{r}_2} = \underbrace{\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_1}}_{1.\text{elektron}} + \underbrace{\frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_2}}_{2.\text{elektron}} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

Böylece elektronlar arasındaki etkileşimi ihmal edersek Hamiltonyenler, **H gibi iki atomun Hamiltonyenlerinin (Z = 2) toplamına** indirgenir. Geçmişte, ayrılabilir Hamiltonyenlerle olan deneyimlere dayanarak (Hamiltonyenleri ekle → Dalga fonksiyonlarını çarp → Enerjileri ekle), bu Hamiltonyenlerin özfonksiyon ve özdeğerleri için doğru olan ifadeyi hemen yazabiliriz:

$$\Psi_{n_1 l_1 m_1 s_1; n_2 l_2 m_2 s_2}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \psi_{n_1 l_1 m_1 s_1}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{n_2 l_2 m_2 s_2}(\mathbf{r}_2, \sigma_2)$$

$$E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = -\frac{Z^2}{2n_1^2} - \frac{Z^2}{2n_2^2}$$

Burada ikinci satırda, enerji ifadesini basitleştirmek için atomik birimleri ($\hbar = m e = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$) kullandık. Böylece elektron itişmesini ihmal ederek, çözülmesi imkânsız olan bir problemi, kolayca çözebileceğimiz bir problem haline getirdik.

Ancak göze çarpan soru şu: Bu yaklaşım ne kadar iyidir? Bunu denemenin en kolay yolu, temel düzeye bakmaktır. Pauli Dışlama İlkesine göre, aynı durumda iki elektronu yanyana koyamıyoruz. Ancak lise kimyasından öğrendiğimiz kadarıyla, 1s orbitaline bir elektronu spini yukarı gelecek şekilde diğerini ise spini aşağı gelecek şekilde yerleştirebiliriz.

$$\Psi_{1s\alpha;1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \psi_{100\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{100\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2)$$

Bu dalga fonksiyonu

$$E_{11} = -\frac{Z^2}{2} - \frac{Z^2}{2} = -Z^2 = -4 \text{ a. b.} = -108.8 \text{ eV}$$

luk bir enerjiye sahiptir.

Bu sonuç ne kadar iyidir? Biz, Helyum atomunun temel enerji düzeyini, bir elektron uzaklaştırıp He⁺'i ve ikinci elektronu uzaklaştırıp He²⁺'yi oluşturmak suretiyle tayin edebiliriz. Sonuçlara göre, birinci elektronun uzaklaştırılması için 24.2 eV ve ikinci elektronun uzaklaştırılması için 54.4 eV enerji gerekir. Bunun anlamı, toplam temel enerji düzeyi, 78.8 eV' luk enerji gerektirir. Etkileşmeyen elektron durumunda azımsanmayacak kadar çok, 30 eV'luk daha az enerji gerekir. Bunun ne kadarlık bir enerji olduğu hakkında fikir sahibi olabilmemiz için tipik bir kovalent bağın 5 eV'luk enerji değerinde olduğu düşünülmelidir. Yani elektron etkileşimini tamamen ihmal etmek çok ta iyi bir yaklaşım değildir.

Bağımsız Elektron Yaklaşımı

Bu yaklaşımı geliştirmek üzere nasıl bir yol izleyebiliriz? Önce, yukarıda bahsedilen sonuç dalga fonksiyonunun, **antisimetrik olmadığını** not edelim. Antisimetrikliği denemek için bütün yapmamız gereken "1" ve "2" ile keyfi olarak işaretlediğimiz elektronların özdeş olduğunu hatırlamaktır. Bu işaretleri birbiriyle değiştirerek, biz asla hiçbir ölçümün sonucunu değiştirmiyoruz. "1" ve "2" işaretlerinin kendi içinde değiştirilmelerine bağlı olarak antisimetrik bir dalga fonksiyonu, aynı dalga fonksiyonunun negatif işaretlisini verecektir. Ancak, bizim önerdiğimiz dalga fonksiyonu, bunu yapmamaktadır:

$$\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \xrightarrow[\text{birbirleriyle de\u0131i\u015ftir}]{1 \text{ ve } 2 \text{ yi}} \psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \neq -\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2)$$

Bu bir problemdir, \u00e7\u00fcnk\u00fc elektron dalga fonksiyonlarının t\u00fcm\u00fc, de\u011fi\u015fim kar\u015fısında antisimetrik olmalıdır diye belirtmi\u015ftik. Bu problemi, \u00f6nerdi\u011fimiz dalga fonksiyonu ile de\u011fi\u015fim yapt\u0131\u011f\u0131 orta\u011f\u0131n\u0131n “-”kombinasyonunu dikkate alarak \u00e7\u00f6zebiliriz:

$$\Psi_{1s\alpha;1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1))$$

Burada $1/\sqrt{2}$ fakt\u00f6r\u00fc, yeni dalga fonksiyonunun normalize oldu\u011funun garantisidir. Bu ifadenin, antisimetrikli\u011fini kontrol edelim:

$$\begin{aligned} \Psi_{1s\alpha;1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1)) \\ &\xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) - \psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2)) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1)) \\ &= -\Psi_{1s\alpha;1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) \end{aligned}$$

Bu yeni dalga fonksiyonu, daha iyi bir enerji verir mi? Sonu\u00e7lara bakılırsa tek ba\u015fına bu de\u011fi\u015fiklik, enerji tahmini i\u00e7in hi\u00e7bir \u015eydir. Yeni dalga fonksiyonu, ba\u011f\u0131ms\u0131z elektron Hamiltonyeninin iki dejenere \u00f6zdurumunun do\u011frusal bir kombinasyonudur. Daha \u00f6nce \u00f6\u011frendi\u011fimiz gibi, dejenere \u00f6zdurumların herhangi bir toplam\u0131, aynı \u00f6zde\u011fere sahip bir \u00f6zdurumdur. \u00d6yleyse, kuantum mekani\u011fi, dalga fonksiyonunu antisimetrik yapmamızı s\u00f6ylerken antisimetrikli\u011fin kendisi, Helyum i\u00e7in enerjiyi etkilemez.

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \hat{H} \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2$$

Helyumun temel enerji d\u00fczeyini tahmin etmeyi geli\u015ftirmek \u00fczere bizim i\u00e7in en kolay yol, yakla\u015f\u0131k \u00f6zfonksiyonlara sahip yakla\u015f\u0131k Hamiltonyen \u00f6zde\u011ferlerini d\u00fc\u015fmek yerine ger\u00e7ek Hamiltonyeni olan yakla\u015f\u0131k fonksiyonun **ortalama enerjisini** ele almaktır. Yani, enerji i\u00e7in daha iyi bir yakla\u015f\u0131m a\u015fa\u011f\u0131daki denklemden elde edilebilir:

Burada $d\tau_1 = d\mathbf{r}_1 d\sigma_1$ olup $d\tau_2$ de benzer ifadeyle verilir. Biz bu sonuca, **ba\u011f\u0131ms\u0131z elektron yakla\u015f\u0131m\u0131** diyoruz. Ayr\u0131labilir formunu muhafaza etti\u011fimiz i\u00e7in dalga fonksiyonu

ifadesinde elektronlar, birbiriyle etkileşmiyormuş gibi davranır. Ancak enerjiyi hesaplarken, *etkileşimin hesaba katıldığı* ortalama enerjiyi hesapladığımız yaklaşık yöntemde bu etkileşimleri tekrar ele alıyoruz.

Biz ortalama enerjiyi hemen basite indirgeyebiliriz:

$$\begin{aligned}
 & \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \left(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 \\
 & \Rightarrow \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \left(-2 + -2 + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 \\
 & \Rightarrow -4 \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 + \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 \\
 & \Rightarrow -4 + \int \frac{|\Psi_{1s\alpha;1s\beta}|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\tau_1 d\tau_2
 \end{aligned}$$

Böylece ortalama enerji için aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$\langle \hat{H} \rangle = -4 + \int \frac{|\Psi_{1s\alpha;1s\beta}|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\tau_1 d\tau_2$$

Birinci terim, yukarıda bahsedilen, sadece etkileşmeyen elektron enerjisidir. İkinci terim, elektron-elektron itişmesinin **ortalama değeri**dir. İntegrant, kesinlikle pozitif (elektron itişmesinde beklediğimiz gibi) olduğundan bu yeni terim, sadece ortalama enerjiyi artıracaktır. Etkileşmeyen elektron yaklaşımı, 30 eV'luk daha az bir enerji verdiği için ortalama enerjinin artması iyi bir şeydir! Daha sonra, itişme terimini, dalga fonksiyonunun antisimetrik formuna dayanarak genişletebiliriz. Önce, antisimetrik dalga fonksiyonunu, uzay $\times$ spin çarpanlarına ayırmamız gerektiğini not edelim:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(\mathbf{r}_2) \psi_{1s\beta}(\mathbf{r}_1, \sigma_1)) \\
& \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \alpha(\sigma_1) \psi_{1s}(\mathbf{r}_2) \beta(\sigma_2) - \psi_{1s}(\mathbf{r}_2) \alpha(\sigma_2) \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \beta(\sigma_1)) \\
& \Rightarrow \underbrace{\psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)}_{\Psi_{\text{uzay}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(\sigma_1) \beta(\sigma_2) - \beta(\sigma_1) \alpha(\sigma_2))}_{\Psi_{\text{spin}}(\sigma_1, \sigma_2)}
\end{aligned}$$

Bu tanımlamalarla, uzay ve spin dalga fonksiyonlarının ayrı ayrı olarak normalize edildiğini doğrulamak kolaydır. Bir manyetik alan yokken, H , uzay ve spin kısımlarına ayrılabilirdiğinden Hamiltonyen özfonksiyonları daima bu ifadedeki gibi yazılacaktır:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{uzay}} + \hat{H}_{\text{spin}}$$

Spin kısmı, önemsiz ve sıfırdır. Sonuçta, H özfonksiyonları, daima yukarıdaki gibi bir uzay kısmı ve bir spin kısmının çarpımı olacaktır. Bu uzay/spin ayrılmasını kullanarak itme terimini basitleştirebiliriz:

$$\begin{aligned}
\int \frac{|\Psi_{1s\alpha\beta}|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\tau_1 d\tau_2 &= \int \frac{|\Psi_{\text{uzay}} \cdot \Psi_{\text{spin}}|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\sigma_1 d\sigma_2 = \int \frac{|\Psi_{\text{uzay}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 |\Psi_{\text{spin}}(\sigma_1, \sigma_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\sigma_1 d\sigma_2 \\
&= \int |\Psi_{\text{spin}}(\sigma_1, \sigma_2)|^2 d\sigma_1 d\sigma_2 \int \frac{|\Psi_{\text{uzay}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\quad \downarrow \text{1} \\
&= \int \frac{|\Psi_{\text{uzay}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2
\end{aligned}$$

Bu 6 boyutlu integralin değerlendirilmesi çok sıkıcı bir iştir (McWenny, 8-39 ve 8-40 problemlere bakınız) ancak sonuç aşağıda verilmiştir:

$$\int \frac{|\Psi_{\text{uzay}}|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \frac{5Z}{8} = \frac{5}{4} \text{ a.b.} = +34 \text{ eV}$$

Bu ortalama itme teriminin, etkileşmeme durumundaki enerjiye ilâve edilmesi, $-108.8 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -74.8 \text{ eV}$ 'luk tahminî bir temel enerji değerini verir ki bu değer, gerçek enerji değerinden sadece 4 eV daha düşüktür. Enerji henüz gerçek değere çok yakın değildir ancak, en azından ilerleme sağladığımızı gösterir.

Görüldüğü gibi bağımsız elektron yaklaşımı, atomları tanımlamada çok ta doğru değildir. Ancak kimyacılar, çok pragmatiktir ve etkileşmeyen elektron yaklaşımı problemlerini çözmedeki kolaylığın çok değerli olduğunun farkındadırlar. Daha ileride göreceğimiz gibi bu yaklaşım, kimyada geniş bir aralıkta tanımlamalar (moleküler orbital teori) yapmamıza imkân sağlayacaktır. Bu sebeple kimyacılar, bağımsız parçacık modelini bırakmaya dünden razıdırlar. Bu model yerine, yukarıdaki gibi daha karmaşık hesaplamalar yaparak veya daha iyi bağımsız parçacık modelini veren, etkileşmeyen farklı Hamiltonyenlerin ele alındığı, konusu bağımsız parçacık olan çok daha hassas modellerin incelendiği pek çok çalışma yapılmaktadır. İlerideki birkaç dersi elektronik yapının ve bundan kaynaklanan bağlanmanın kalitatif özelliklerini tartışarak geçireceğiz.