

Kvantová fyzika, předmět KFY/7KVAF

ZS 2020/2021

Seminář 8: Přibližné metody v kvantové teorii a Hartreeho-Fockova metoda

1. Částice se nachází v základním stavu lineárního harmonického oscilátoru, jehož potenciální energie je $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. V čase $t = 0$ dojde k “okamžitému” zdvojnásobení vazebné konstanty k . Jaká je pravděpodobnost, že nalezneme systém v základním stavu modifikovaného lineárního harmonického oscilátoru? [Nápověda: Uvažujte vlnové funkce základního stavu lineárního harmonického oscilátoru $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$ s vazebnou konstantou k a frekvencí ω a vlnovou funkci $\psi'_0(x)$ s vazebnou konstantou $k' = 2k$ a frekvencí $\omega' = \sqrt{2}\omega$. Pravděpodobnost přechodu při náhlé změně je potom $w_0 = |\langle \psi'_0(x) | \psi_0(x) \rangle|^2$.]
2. Odvoďte výraz pro hustotu elektronů v místě \vec{r} pro systém N elektronů. Ukažte, že v Hartreeho-Fockově aproximaci je $\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r})|^2$, kde $\psi_i(\vec{r})$ jsou jednoelektronové funkce Hartreeho-Fockovy aproximace. [Nápověda: Použijte vlnovou funkci ve tvaru Slaterova determinantu.]
3. Napište explicitně vlnovou funkci základního stavu atomu lithia v přiblížení, kdy zanedbáváme vzájemnou interakci elektronů. [Nápověda: Použijte vlnovou funkci ve tvaru Slaterova determinantu.]
4. Napište Hartreeho a Hartreeho-Fockovy rovnice pro a) atom helia, b) atom lithia (předpokládejte, že dva ze tří elektronů mají stejnou prostorovou část a opačné spiny (tj. “restricted” Hartreeho-Fockovu aproximaci) i různé prostorové části elektronů s opačným spinem (tj. “unrestricted” Hartreeho-Fockovu aproximaci)).
5. Ukažte, že v rámci Hartreeho-Fockovy teorie pro uzavřené slupky je ionizační potenciál molekuly roven záporně vzaté orbitální energii nejvyššího obsazeného molekulárního orbitalu (HOMO), tj. tzv. Koopmansův teorém. [Nápověda: Zapište energii pro N -elektronový systém (stačí bez detailů pomocí jednoelektronových hamiltoniánů, coulombovských a výměnných integrálů), totéž proveďte pro $(N - 1)$ -elektronový systém a odečtěte.]