

Kvantová fyzika, předmět KFY/7KVAF

ZS 2021/2022

Téma 9: Hartreeho-Fockova metoda

1. Napište explicitně vlnovou funkci základního stavu atomu lithia v přiblížení, kdy zanedbáváme vzájemnou interakci elektronů. [Nápověda: Použijte vlnovou funkci ve tvaru Slaterova determinantu.]
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 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)).
4. 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. platí 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.]