

Theoretische Chemie – Quantenmechanik II
Übungsblatt Nr. 3, 23.05.2013

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in der Übung am 03.06.2013

Aufgabe 4: Self-Consistent Field (SCF) Schema

Betrachten Sie zwei Elektronen in einer Dimension mit Koordinaten r_1 und r_2 in der Hartree Näherung. Der effektive Ein-Teilchen-Hamiltonoperator sei gegeben durch

$$H^{(i)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \left(\frac{m}{2}\omega_0^2 + \frac{\hbar\omega_0}{2}n^2(0)\right)r_i^2 \quad (1)$$

mit

$$n(0) = \sum_{i=1}^2 |\psi_i(0)|^2 \quad (2)$$

Die Elektronen seien in ihrem Grundzustand.

- a) Lösen Sie das Problem selbstkonsistent mit Hilfe eines numerischen Programms. Als Anfangswert für die Dichte $n(0)$ am Ursprung soll die Lösung für zwei unabhängige Elektronen im Potential eines harmonischen Oszillators genommen werden:

$$H_0^{(i)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \frac{m}{2}\omega_0^2 r_i^2 \quad (3)$$

Hinweis: Die Wellenfunktion eines harmonischen Oszillators im Grundzustand ist gegeben durch

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-x^2/(2x_0^2)} \quad (4)$$

mit

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (5)$$

Wie viele Iterationen braucht man, bis der Quotient $|(n^{(j+1)}(0) - n^{(j)}(0))/n^{(j)}(0)|$ kleiner als $\epsilon = 10^{-5}$ ist? Hilft eine Mischungsverfahren, um die Konvergenz zu beschleunigen?

- b) Lösen Sie das Problem analytisch.

Hinweis: Zur Vereinfachung, benutzen Sie dimensionslose Variablen mit $\hbar = 1$, $m = 1$ und $\omega_0 = 3$.