



## Theoretische Chemie – Quantenmechanik II

### Übungsblatt Nr. 4, 23.06.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in der Übung am 10.07.2014

#### Aufgabe 6: 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  $\omega_0 = 3$ .