Quantenmechanik II
Serie 7

Aufgabe 7.1 Hartree-Fock Zustand

Zeige, dass Erwartungswerte des Typs $\langle\psi|O|\psi\rangle$, wo

$$|\psi\rangle = \mathrm{sd}(\phi_1, \ldots, \phi_n) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \ldots & \phi_n(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \ldots & \phi_n(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \phi_2(x_n) & \ldots & \phi_n(x_n) \end{vmatrix} \tag{1}$$

eine Slater-Determinante ist, nur von dem Unterraum, der durch $\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$ aufgespannt wird, abhängen; nämlich, dass $\langle\tilde{\psi}|O|\tilde{\psi}\rangle = \langle\psi|O|\psi\rangle$, wobei

$$|\tilde{\psi}\rangle = \mathrm{sd}(\tilde{\phi}_1, \ldots, \tilde{\phi}_n), \qquad \tilde{\phi}_i = \sum_j U_{ij}\phi_j, \qquad \sum_k U_{ik}U_{ik}^* = \delta_{ij}. \tag{2}$$

Aufgabe 7.2 Hartree-Fock Gleichungen

a) Rekapituliere die Herleitung der Hartree-Fock Gleichungen im Skript.

b) Zeige, dass für abgeschlossene Konfiguarationen die Hartree-Fock Gleichungen sphärisch-symmetrisch sind. Leite ausgehend von Gl. (8.124) im Skript die radialen Hartree-Fock Gleichungen in der Form

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Z}{r} + \Phi(r) - \epsilon_{nl}\right) u_{nl}(r) = F_{nl}(r) \tag{3}$$

her, wobei $\hbar = 2m = e^2/4\pi = 1$. Ist der Grundzustand entartet? Wann kann der Grundzustand entartet sein?

Hinweis: Benutze

$$\int d\Omega' \frac{1}{|x-x'|} = 4\pi \min(r^{-1}, r'^{-1}), \qquad \frac{1}{|x-x'|} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P_k(\cos\theta'), \tag{4}$$

wobei $r_> \equiv \max(r, r')$ und $r_< \equiv \min(r, r')$ und θ' der Winkel zwischen x und x' ist.

Aufgabe 7.3 Virialsatz in der Hartree-Fock Näherung

Beweise, dass auch in der Hartree-Fock Näherung der Virialsatz

$$2\langle T\rangle + \langle V\rangle = 0 \tag{5}$$

gilt, wobei $\langle T\rangle$ und $\langle V\rangle$ die Erwartungswerte der kinetischen und der potentiellen Energie im Zustand ψ sind.