

Kvantová chemie

Cvičení 9

Hartreeho-Fockova metoda

Problém 1 (Hůla)

Napište Hartreeho-Fockovy rovnice pro atom helia, kdy budete předpokládat $\varphi_1(\vec{r}, \xi) = \varphi(\vec{r})\alpha(\xi)$ a $\varphi_2(\vec{r}, \xi) = \varphi(\vec{r})\beta(\xi)$. (Návod: $\alpha(+1/2) = 1, \alpha(-1/2) = 0, \beta(+1/2) = 0$ a $\beta(-1/2) = 1$.)

Problém 2

Ukažte, že Slaterovy determinanty jsou pro funkce φ_k a $\tilde{\varphi}_k$ z přednášky (fyzikálně) ekvivalentní.

Návod:

- využijte vztahů známých z lineární algebry: $|\det \mathbf{U}| = |\det \mathbf{U}^+| = 1$ ($\Rightarrow \det \mathbf{U} = e^{i\alpha}$),
- případně uvažujte reálný případ: $|\det \mathbf{Q}| = |\det \mathbf{Q}^T| = 1$ ($\Rightarrow \det \mathbf{Q} = \pm 1$),
- $\det(\mathbf{AB}) = \det \mathbf{A} \det \mathbf{B}$.