Übungen zur Quantenmechanik II – WS 2008/09

H 3

Abgabetermin: Donnerstag, 13.11.08

(6) Hartree–Fock-Näherung für gekoppelte Oszillatoren **11 P.**

Betrachten Sie zwei identische Spin 1/2-Teilchen in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential, die durch ein weiteres harmonisches Potential miteinander wechselwirken:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2} \left(p_i^2 + x_i^2\right) + \frac{\lambda}{2} \left(x_1 - x_2\right)^2$$

mit $\lambda \geq 0$, wobei wir der Einfachheit halber $\hbar = m = \omega = 1$ setzen.

a) Das Problem kann exakt gelöst werden. Schreiben Sie dazu H in den Koordinaten $R = (x_1 + x_2)/\sqrt{2}$ und $r = (x_1 - x_2)/\sqrt{2}$, was die zwei Oszillatoren entkoppelt. Geben Sie die Grundzustandsenergie E_0 und zugehörige Wellenfunktion $\psi_0(x_1, x_2)$ (inklusive Spinanteil) an. (2)

b) Jetzt soll das Problem mit der Hartree–Fock-Methode behandelt werden. Setzen Sie für die Wellenfunktion $\psi_{\text{SD}}(x_1, x_2) = \varphi(x_1)\varphi(x_2)\,\chi_{\text{spin}}$ mit normiertem $\varphi(x)$ an (wie muß dann χ_{spin} lauten?) und zeigen durch Variation des Erwartungswerts $E_{\text{HF}}[\varphi] = \langle\psi_{\text{SD}}|H|\psi_{\text{SD}}\rangle$, daß sich die Hartree–Fock-Gleichungen auf

$$\left(-\,\partial_x^2 + x^2 + \lambda \int dy\,(x-y)^2 |\varphi(y)|^2\right) \varphi(x) = \varepsilon\varphi(x)$$

reduzieren. (2)

c) Diese Gleichung lösen Sie durch sukzessive Approximation: Starten Sie in erster Näherung mit der normierten Grundzustandseigenfunktion $\varphi^{(1)}(x)$ für $\lambda = 0$. Berechnen Sie damit obiges Integral und lösen die entstehende lineare Gleichung

$$\left(-\,\partial_x^2 + x^2 + \lambda \int dy\,(x-y)^2 |\varphi^{(n-1)}(y)|^2\right) \varphi^{(n)}(x) = \varepsilon^{(n)}\varphi^{(n)}(x)$$

für die zweite Näherung $\varphi^{(2)}(x)$. Setzen Sie diese Iteration fort, bis das Verfahren konvergiert. Wie lauten das resultierende $\varphi(x)$ und ε? (3)

d) Bestimmen Sie mit der so gefundenen Wellenfunktion

$$\psi_{\text{SD}}(x_1, x_2) = \pi^{-1/2}\,(1+\lambda)^{1/4}\,\mathrm{e}^{-\sqrt{1+\lambda}\,(x_1^2+x_2^2)/2}\,\chi_{\text{spin}}$$

die Hartree–Fock-Energie E_{HF}, und skizzieren Sie zum Vergleich mit dem exakten Ergebnis die Größe $(E_{\text{HF}} - E_0)/E_0$ als Funktion der Kopplungskonstante λ. Wie lauten die numerischen Werte dieses Verhältnisses speziell für $\lambda = 1$ und $\lambda \to \infty$? (2,5)

e) Berechnen Sie den Überlapp $|\langle\psi_{\text{SD}}|\psi_0\rangle|^2$ von exakter und Hartree–Fock-Wellenfunktion. Dabei können Sie von dem Integral

$$\int d^n x\ \mathrm{e}^{-x_i A_{ij} x_j} = \frac{\pi^{n/2}}{\sqrt{\det A}}$$

mit positiv-definiter symmetrischer Matrix A Gebrauch machen. Wie lautet der Limes $\lambda \to \infty$? (1,5)