



ZTF-FCT

Zientzia eta Teknologia Fakultatea
Facultad de Ciencia y Tecnología



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

FISIKA KUANTIKA

8 Gaia

Hartree metodoa

1. Ariketa honetan egitura atomikoa aztertzeke askotan erabiltzen den Hartree-ren metodoaren ezaugarriak aztertuko ditugu. Kalkuluen zailtasun matematikoa ahalik eta gehien errazteko, eredu *simplea* kontsideratuko dugu: dimentsio bakarreko Helio atomoa. Nukleoaren masa infinito dela kontsideratuz eta elektroia bakar bat egonik, honi dagokion Hamiltondarra deskribatzeko ondorengo hurbilketa hartuko dugu:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - Ze^2 \delta(x),$$

non elektroia eta nukleoaren arteko elkarrekintza-potentziala Dirac-en delta funtzioaren bidez adierazten den (irispen laburra duen potentzialaren hurbilketa).

- Azter ezazu Dirac-en delta, $\delta(x)$, potentzialari dagozkion emaitza orokorrak: egoera ligatu bakarraren energia (Z , m_e , e eta $\hbar$ konstanteen funtzioan), egoera honi dagokion normalizaturik dagoen uhin-funtzioaren adierazpena (Z eta Bohr-en erradioaren funtzioan). Justifikagarria al da hiru dimentsioko potentzial Coulombiarra dimentsio bakarreko Dirac-en deltaren bidez deskribatzea? Galdera hau erantzuteko, kompara itzazu atal honetan lorturiko emaitzak hiru dimentsioko atomo hidrogenoidean ditugunekin.

Oharra: interakzio-potentziala Dirac-en delta bat denez, Schrödinger-ren ekuazioa ebazterakoan kontutan hartu behar duzue $x = 0$ puntuan uhin-funtzioa jarraia izan arren, bere malda ez dela jarraia izango (!!)

puntu horretan.

- a_0/Z luzera-unitatea eta $Z^2 m_e e^4 / \hbar^2$ energia unitatea dituen aldagai berrietan, goiko Halmintondarrak ondorengo adierazpena du:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \delta(y),$$

non y luzera-unitate berriari dagozkion posizio-koordinatua den. Unitate hauetan, zein da uhin-funtzioari dagokion adierazpena?, eta energiari dagokiona?

Hurbilketa hauek kontutan hartuz, unitate berrietan bi elektroiei dago-kien Hamiltondarra ondorengo adierazpenaren bidez deskribatuko du-gu:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} - \delta(y_1) - \delta(y_2) + \frac{1}{Z} \delta(y_1 - y_2).$$

- Azter eta arrazona ezazu goiko Hamiltondarrean agertzen diren ekar-penen esanahia.
- Azkeneko ekarpena perturbazio bezala hartuz (hiru dimentsioko Helio atomoarekin klasean egin genuen bezala), froga ezazu egoera lotuari dagokion lehenengo ordeneko ekarpena (hau da, perturbaziorik gabeko oinarritzko egoeran bi elektroien arteko elkarrekintza-energia potentzia-laren batezbestekoa) ondorengo dela:

$$E = -1 + \frac{1}{2Z}.$$

Konpara ezazu emaitza hau hiru dimentsioko Helio atomoan lortuta-koarekin.

- Ondoren, *metodo bariatzionalea* aplikatuko dugu, eta horretarako ondo-rengo uhin-funtzioarekin hasiko gara:

$$\Psi(y_1, y_2) = \beta e^{-\beta(|y_1| + |y_2|)},$$

non β parametro bariatzionalea den. Kalkula ezazu energiaren batezbes-tekoa minimizatzen duen β parametroaren balioa. Zein da egoera honi dagokion energia? Konpara itzazu emaitza hauek hiru dimentsioko He-lio atomoan metodo bariatzionalea aplikatzerakoan lortu genituenekin.

- Ondoren *Hartree-ren metodoa* aplikatuko dugu. Egoera geldikorra ondorengo adierazpenaren bidez deskribatuko dugu:

$$\Psi(y_1, y_2) = \Phi(y_1)\Phi(y_2).$$

Egoera ligatu bat bakarra dagoenez bi elektroiak egoera berdin horretan egongo dira. Hartree-ren metodoa aplikatuz, froga ezazu Φ uhin-funtzioak ondorengo ekuazioa bete behar duela:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - \delta(y) \Phi + \frac{1}{Z} \Phi^3 = \epsilon \Phi.$$

- Konproba ezazu ondorengo adierazpena:

$$\Psi(y) = 2\alpha Z^{1/2} C \frac{e^{-\alpha|y|}}{1 - C^2 e^{-2\alpha|y|}},$$

non $\alpha = (-2\epsilon)^{1/2}$ den eta C konstante bat, aurreko ekuazioaren emaitza dela (bai $y < 0$ eta $y > 0$ aldeetan). Muga- (uhin-funtzioaren ez-jarraitasuna $y = 0$ puntuan) eta normalizazio-baldintzak aplikatuz, kalkula itzazu α eta C konstanteen posibleak diren balioak. α -ren adierazpenetik ϵ -i dagokiona lor dezakegu. Egin ezazu $\Phi(y)$ uhin funtzioari dagokion adierazpen grafikoa eta konparatu hasieran lortu dugun elektroi bati dagokion uhin-funtzioarekin.

Oharra: atal honetan eta hurrengokoan egin beharko dituzuen integralak ebazteko erabilgarria izango zaizue ondorengo aldagai-aldaketa: $t = C^2 e^{-2\alpha y}$.

- Aurreko emaitzak aplikatuz, zein da Hartree metodoaren egoera geldikorrari dagokion energia? Zein da zehatzagoa, orain aztertu dugun Hartree-ren metodoa ala aurreko metodo bariatziala?