

Forelesningsnotater, J.A. Størmer

Løse Schrödinger ligningen for molekyler??

$$H\Psi = E\Psi$$

$$H = \underbrace{\sum_{\substack{\text{elektroner} \\ i=1,2,\dots}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) + \sum_{\substack{\text{atom-} \\ \text{kjerner} \\ A=1,2,\dots}} \left( -\frac{\hbar^2}{2M_A} \nabla_A^2 \right)}_{\text{Kinetisk del}} + \underbrace{\sum_i \sum_A \frac{(-e) \cdot (Z_A e)}{4\pi\epsilon_0 r_{iA}} + \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_A \sum_{B \neq A} \frac{Z_A e \cdot Z_B e}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}}_{\text{Potensiell del}}$$

M = elektronmassen

 $M_A$  = massen til kjerne ~~A~~ A $r_{ij}$  = avstand mellom elektroner i og j $R_{AB}$  = ——— " ——— kjerner A og B $r_{iA}$  = ——— " ——— elektron i og kjerne A $Z_A$  = antall protoner i kjerne A

Grunntilstanden er den  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_A, \dots)$  som gir lavest mulig energi E.

Ekstakt løsning ikke mulig, selv for enkle systemer, (f.eks. He-atomet med 2 elektroner)

Nødvendig med approversjoner!