

1) Born - Oppenheimer - tilnærmelsen

$$M_A \gg m, \quad U_{\text{kjerne}} \ll U_{\text{elektron}}$$

$\Rightarrow$ vi antar at kjernene ligger i ro

$\Rightarrow$ får Schrödingerligning for ^{kun} elektronene:

$$H_{\text{el}} \Psi_{\text{el}} = E_{\text{el}} \Psi_{\text{el}}$$

$$H_{\text{el}} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) + \sum_i \sum_A \frac{(-Z_A e^2)}{4\pi\epsilon_0 r_{iA}} + \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

$$\text{Total energi: } E = E_{\text{el}} + \sum_A \sum_{B \neq A} \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

2) Hartree-Fock - tilnærmelsen

Vi tar hensyn til ~~et~~ Pauliprinsippet, dvs ikke mer en ett elektron i en bestemt enpartikkeltilstand, og at elektronene er fermioner, dvs at mangepartikkeltilstanden Ψ er antisymmetrisk m.h.p. ombytte av koordinater for to elektroner.

Men vi antar at et gitt elektron ~~kan~~ "ser" et effektivt potensial fra alle de andre elektronene (i tillegg til atomkjernene, selvsagt).

[Se Tillegg 6 og senere kurs i QM for detaljer!!]