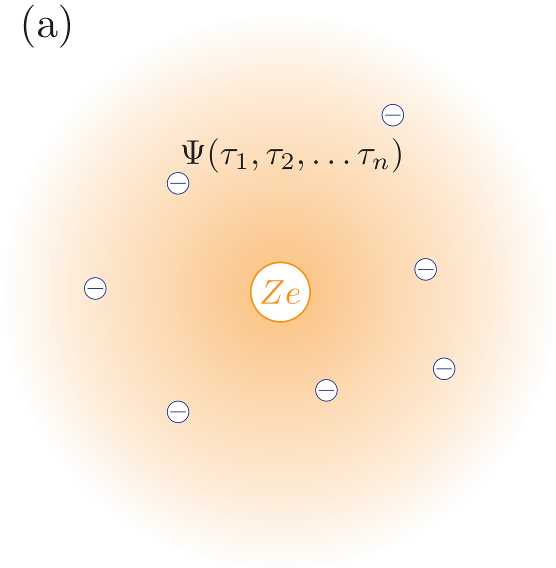
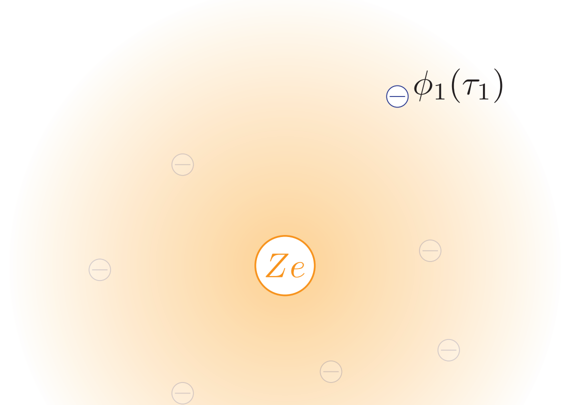
$\boxed{1}$ Hartreeの方法

(a)



(b)



$$\Psi(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n) = \phi_1(\tau_1)\phi_2(\tau_2)\ldots\phi_n(\tau_n)$$

$$\left[\sum_{i=1}^{n} \hat{H}_c(i) + \sum_{i>j}^{n} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \boldsymbol{r}_{ij}}\right]\Psi(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n) = E\,\Psi(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n)$$

$$\hat{H}_c(i) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \boldsymbol{r}_i}$$

変分法を適用
（導出略）

Hartreeの方程式

$$\left[\hat{H}_c(i) + \sum_{j(\neq i)}^{n} \int \frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 \boldsymbol{r}_{ij}} dv_j\right]\phi_i(\boldsymbol{r}_i) = E_i\phi_i(\boldsymbol{r}_i)$$

$$i = 1, 2, \ldots, n$$

他の電子はポテンシャルを作る
背景としてハミルトニアンに含める

答（　　　　　　　　）が分からないと
問題（　　　　　　　　）
が決まらない。

適当な試行関数の組 $\phi_1^{(0)}, \phi_2^{(0)}, \ldots \phi_n^{(0)}$ を仮定

↓

$\hat{H}$ を計算 ← $\phi_1^{(1)}, \phi_2^{(1)}, \ldots \phi_n^{(1)}$ を試行関数とする

↓

方程式を解いて $\phi_1^{(1)}, \phi_2^{(1)}, \ldots \phi_n^{(1)}$ を得る

↓

$\phi_1^{(1)}, \phi_2^{(1)}, \ldots \phi_n^{(1)}$ を $\phi_1^{(0)}, \phi_2^{(0)}, \ldots \phi_n^{(0)}$ と比較

一致しなければ

$\phi_1^{(i-1)}, \phi_2^{(i-1)}, \ldots \phi_n^{(i-1)}$ と $\phi_1^{(i)}, \phi_2^{(i)}, \ldots \phi_n^{(i)}$ が一致したら終了

$\boxed{\qquad\qquad\qquad\qquad}$ の方法（SCF 法）