

Diplomová práce

Studium systémů mnoha elektronů metodou konfigurační interakce

Ač kvantová mechanika poskytuje hned několik rovnic, které na různé úrovni aproximace dobře popisují chování jednoho elektronu ve vakuu i ve vnějším poli, chování vzájemně interagujících elektronů se často řeší pouze pomocí různých typů jednoelektronových efektivních polí.

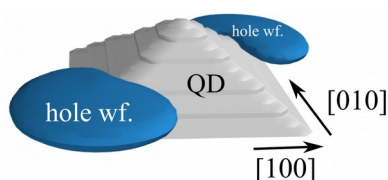
Detailní a efektivní fyzikální popis chování mnoha elektronů stále zůstává nevyřešeným problémem. Přitom je zřejmé, že vícečásticové chování hraje významnou roli v řadě pozorovaných fyzikálních jevů.

V současné době je jednou z nejpřesnějších metod studia víceelektronových systémů metoda konfigurační interakce (CI), která navazuje na Hartreeho–Fockovu metodu konstrukcí vlnové funkce z lineární kombinace Slaterových determinantů (SD); bohužel na úrok značné výpočetní zátěže.

jednoelektronové stavy

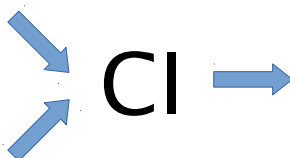
$$\left[-\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}\right]|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\left[\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - q\mathbf{A}))^2 + q\phi\right]|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

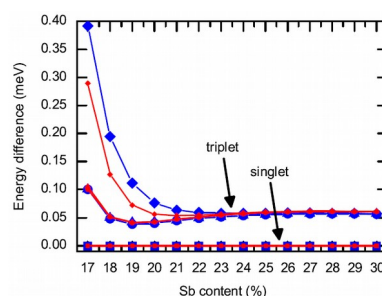


víceelektronové stavy

$$\langle\Psi|H^X|\Psi\rangle = E\langle\Psi|\Psi\rangle$$



$$H_{ij,kl}^X = (E_{ei} - E_{hj})\delta_{ik}\delta_{jl} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \mathcal{A}\psi_{ei}\psi_{hj} \left| \frac{1}{\epsilon(\vec{r}_e, \vec{r}_h)|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \mathcal{A}\psi_{ek}\psi_{hl} \right\rangle$$



Student bude mít za úkol podílet se na implementaci výpočtů vícečásticových stavů pomocí metody konfigurační interakce s využitím bazových jednoelektronových vlnových funkcí získaných pomocí vybraných jednoelektronových rovnic.