

C9930, 7. lekce, 21. 4. 2020

Hartreeho metoda selfkonzistentního pole

Literatura: John P. Löwe, Quantum Chemistry

Kapitola 11: 11-1, 11-2 a 11-3

Kapitola 5: 5-1

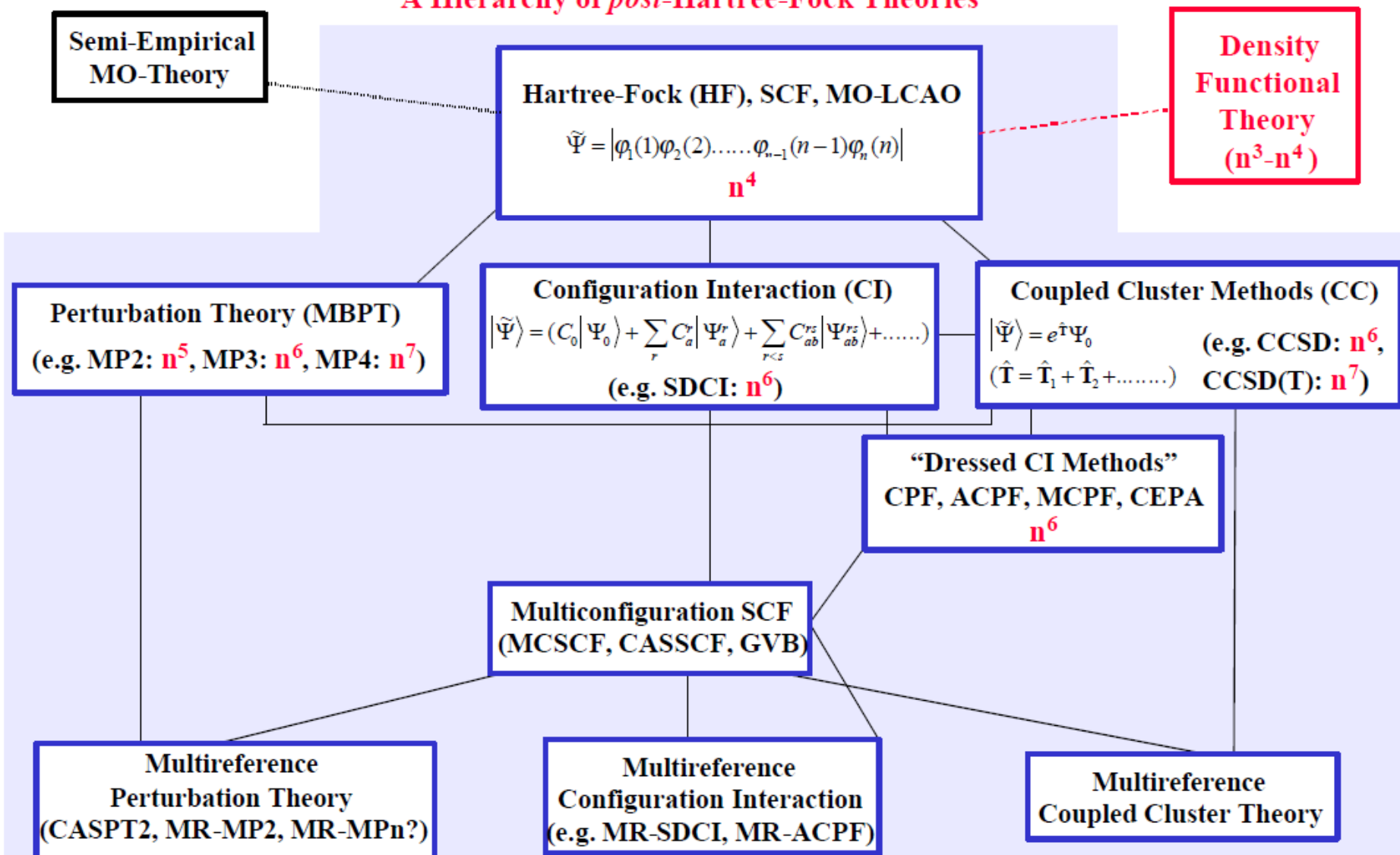
Ad dotaz PR ohledně integrálu při úpravě časově závislé SR na její stacionární tvar

Viz (dobrovolné):

https://is.muni.cz/auth/el/sci/jaro2020/C9930/um/zapisy_k_prednaskam/TDSR.pdf

11-1 *Ab initio* výpočty

A Hierarchy of *post-Hartree-Fock* Theories

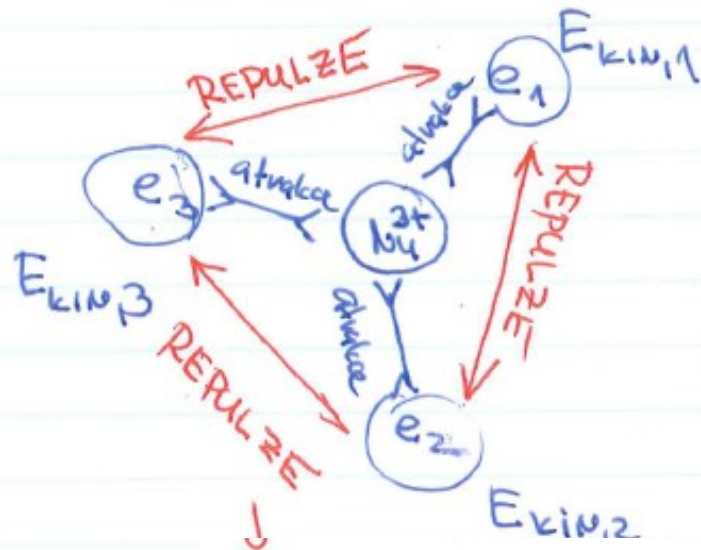


n^m : formal scaling factors relative to system size n . Note that linear pre-factors are also important

11-2 Molekulový (atomový) Hamiltonián

Problém popisování atomů s více elektrony

Pr. ${}^3\text{Li}$



↓
záleží na okamžitých polohách všech elektronů
↳ mnohavýměrný problém

- analyticky neřešitelný
- těžko pochopitelný

11-3 Tvar vlnové funkce

Jak vypadají orbitály v atomech s více e- ?

J. Am. Chem. Soc., Vol. 122, No. 48, 2000 11901

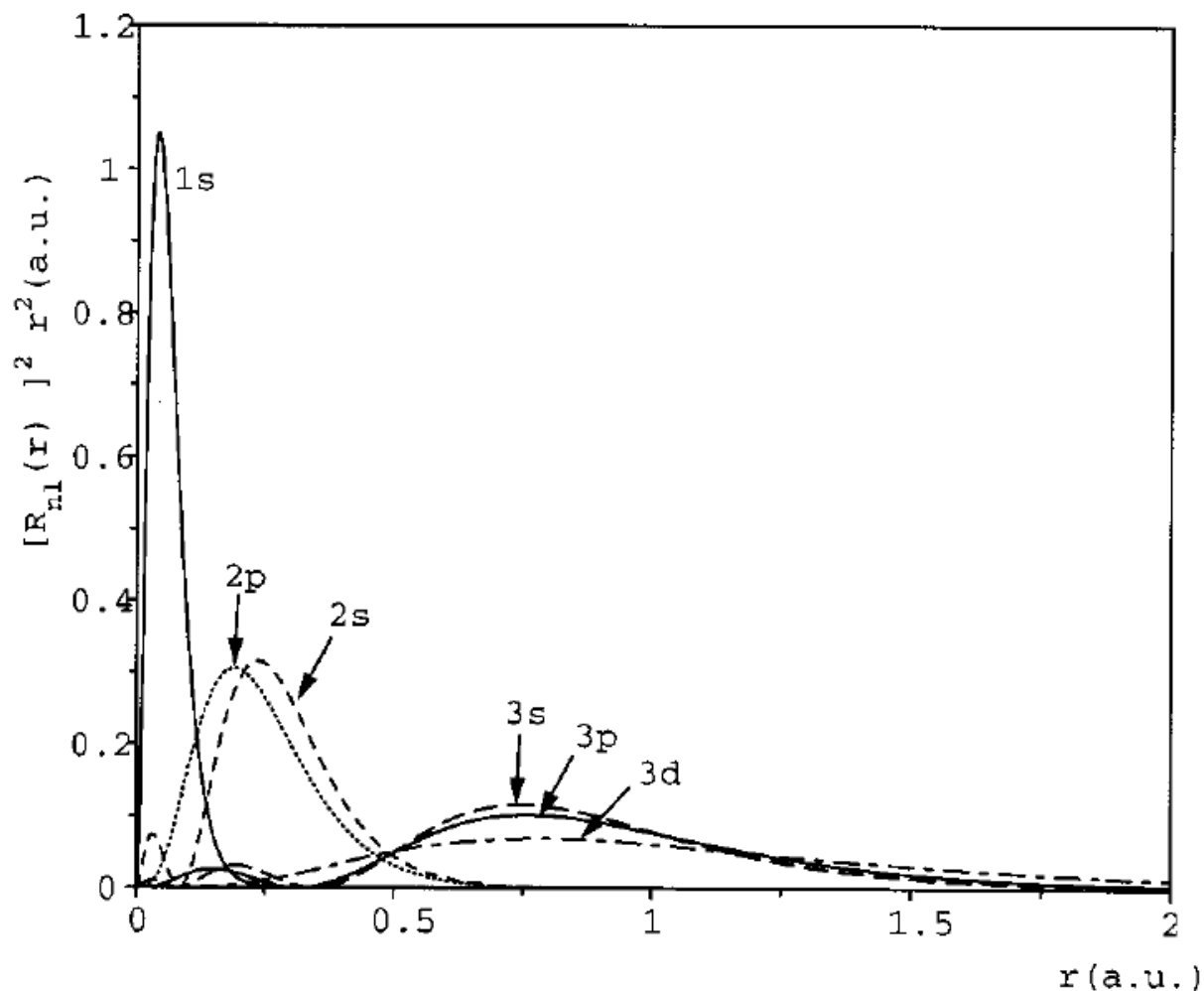


Figure 1. ROHF radial distribution functions $[R_{nl}(r)]^2 r^2$ for Mn^{2+} .

5-1 Aproximace nezávislých elektronů

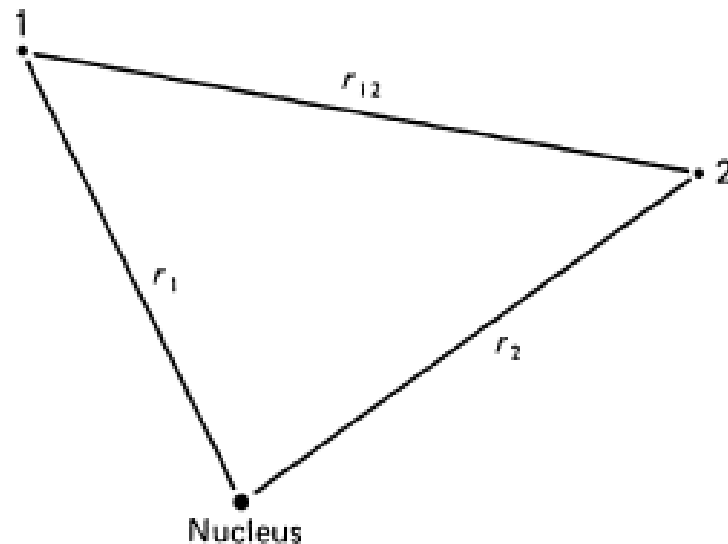


Figure 5-1 ► Interparticle coordinates for a three-particle system consisting of two electrons and a nucleus.