

C9930, 7. lekce, 14. 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

11-1 *Ab initio* výpočty

A. Princip : Zápis na SMART NB

B. Hierarchie metod : Následující snímek

A Hierarchy of *post*-Hartree-Fock Theories

Semi-Empirical
MO-Theory

Hartree-Fock (HF), SCF, MO-LCAO

$$\tilde{\Psi} = |\varphi_1(1)\varphi_2(2)\dots\varphi_{n-1}(n-1)\varphi_n(n)|$$

n^4

Density
Functional
Theory
(n^3 - n^4)

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

5-5 Singletní a tripletní stavy pro konfiguraci
 $1s^1 2s^1$ atomu He