

Elektrónová štruktúra látok

Peter Bokes, Martin Konôpka

1. semester Fyzikálneho inžinierstva

Rozsah: 2/2

Anotácia

Cieľom predmetu je uvedenie študentov do problematiky výpočtu elektrónovej štruktúry atómov, molekúl a tuhých látok a využitia takýchto výpočtov pre získavanie experimentálne merateľných vlastností látok ako sú napr. ich optické spektrá alebo ich mechanická stabilita. Základným metodickým aparátom predmetu je teória funkcionálu hustoty, prípadne metóda Hartreeho-Focka, a ich použitie pomocou konečných báz funkcií. S týmto aparátom sa študenti oboznámia nielen teoreticky na prednáškach a aj prakticky v rámci numerických cvičení. Absolvovaním predmetu študenti navyše získajú konkrétnu predstavu o presnosti a výpočtovej náročnosti týchto metód pre riešenie aktuálnych vedeckých a technologických úloh.

Okruhy

1. Atóm vodíka (Pišút [1], kap. 4.9 - 4.11)

- Hamiltonián elektrónu v atóme vodíka, prechod do sférických súradníc
- Zavedenie atómových jednotiek $\hbar a_0$ a a_B .
- Vlastné stavy elektrónu v atóme vodíka, radiálne funkcie
- Sférické funkcie v kartézskej a sférickej reprezentácii.

2. Približné metódy riešenia Schrödingerovej rovnice (Pišút [1], kap. 6.1 - 6.5)

- Stacionárna poruchová teória
 - 1. a 2. rád, nedegenerovaná verzia.
 - poruchová teória pre degenerované hladiny.
 - štiepenie energetických hladín pre elektrón v homogénnom magnetickom poli v dôsledku spinu.
- Variačná metóda
 - Variačný princíp pre Schrödingerovu rovnicu
 - Metóda Lagrangeových multiplikátorov
 - Rozvoj vlnovej funkcie do konečnej bázy.
 - Odvodenie približného základného stavu molekuly H_2^+ variačnou metódou.

3. Problém mnohých častíc v kvantovej mechanike a výmenná symetria častíc (Pišút [1], kap. 15.1 - 15.4)

- Zavedenie spinovej premennej pre častice
- Vlnová funkcia identických častíc, symetria v dôsledku spinu - fermióny a bozóny

- Tvar vlnovej funkcie pre dva neinteragujúce elektróny, singletný a tripletný stav, výmenná korelácia.

4. Hartree-Fockova metóda [2]

- Stredná hodnota Hamiltoniánu vo vlnovej funkcii pre N nezávislých elektrónov.
- Variačná metóda a Hartree-Fockove rovnice pre spin-orbitály.
- Prechod od spin-orbitálov k priestorovým orbitálom v Hartree-Fockových rovniciach, Hartreeho lokálny a výmenný nelokálny potenciál. Restricted Hartree-Fock metóda.
- Koopmansov teorém
- Definície ionizačnej energie, elektrónovej afinity a disociačnej energie.

5. Homogénny elektrónový plyn [2]

- Hamiltonián homogénneho elektrónového plynu
- Jednočasticové vlastné stavy, hustota a kinetická energia na jednu časticu (odvodenia).
- Výmenná a korelačná energia homogénneho elektrónového plynu na jednu časticu (ich závislosť od r_s , netreba si pamätať koeficienty úmernosti!)

6. Teória funkcionálu hustoty [2]

- Hohenbergov-Kohnov teorém o jedno-jednoznačnosti medzi hustotou a externým potenciálom.
- Variačný princíp pre elektrónovú hustotu a Lieb-Levy-ho konštrukcia funkcionálu hustoty pre kinetickú energiu a repulziu elektrónov.
- Thomas-Fermi model a tinenie
- Kohn-Shamov systém neinteragujúcich elektrónov a jeho využitie pre DFT, výmenno-korelačná energia.

Referencie

- [1] J. Pišút, L. Gomolčák, V. Černý: *Úvod do kvantovej mechaniky*, 2. vydanie, (ALFA, Bratislava, 1983).
- [2] J. Perdew, S. Kurth: *Density Functionals for Non-relativistic Coulombic Systems* in 'A Primer in Density Functional Theory', ed. C. Fiolhais, F. Nogueira, and M. Marques (Springer-Verlag, NY, 2003). [online: <http://www.chem.uci.edu/~kieron/dftold2/pubs/PK98.ps>]