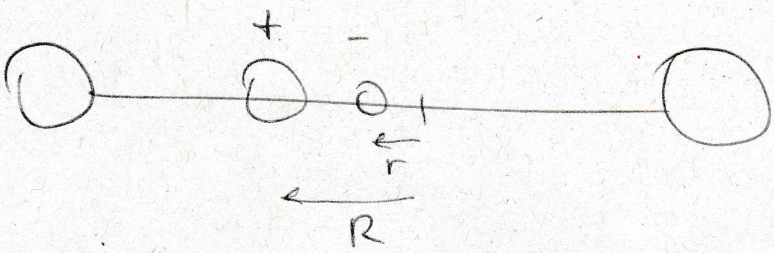
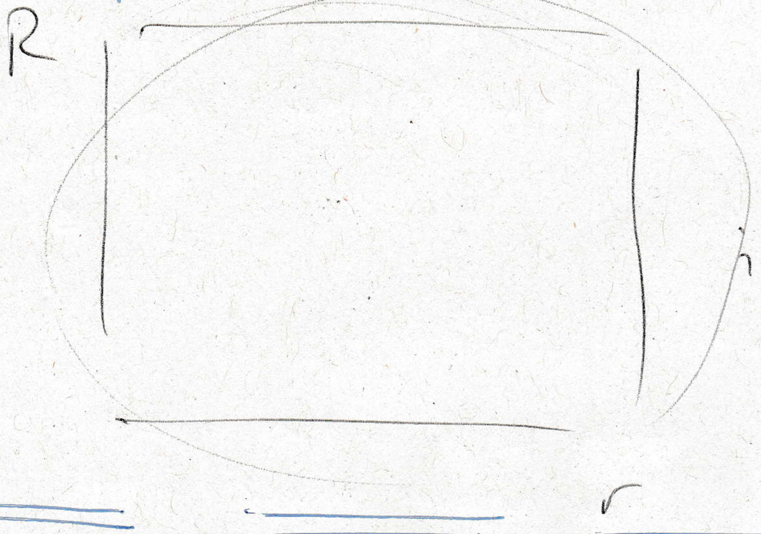
27-05-2021



Hamiltonià total

$$\left[H(r,R) = T_r + T_R + \underline{W(r,R)} \right]$$

Espai total (bidimensional)



$$i\partial_t \Psi(r,R,t) = H(r,R)\,\Psi(r,R,t)$$

$$\Psi_0(r,R)$$

↳ Podem fer evolució amb funció d'ona total i amb Hamiltonià total.

Alternativa a fer-ho total és fer expansió separant e^- i nucli

$$\Psi(r,R,t) = \sum_{j=1}^{\infty} \phi_R^j(r)\, \chi^j(R,t)$$

TISE per trobar ~~estats~~ eigenstates electrònics a cada R fixat

El moviment dels nuclis és descrit pel potencial $\mathcal{E}^j(R)$

$$\boxed{H_e\, \phi_R^j(r) = \mathcal{E}^j(R)\, \phi_R^j(r)}$$

Termes no lineals (?) que compliquen la vida

$j = 1, 2, \ldots$ → tants com BOPES considerem

$$\left[i\dot{\chi}^j(R,t) = \left(T_R + \mathcal{E}^j(R) \right) \chi^j(R,t) + \sum_k^{\infty} NAC\,\partial^k \right]$$

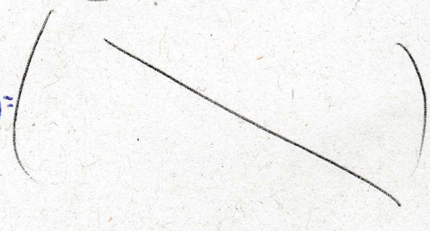
$$\hat{H}(r) = \underbrace{\hat{T}_r}_{\text{cinètica}} + \underbrace{\hat{W}(r)}_{\text{potencial}}$$

Exemple de representació matricial d'un operador en representació espacial i en 1 dimensió

$\hat{T}_r =$

No local pq no és diagonal

$\hat{W}(r) =$



Local pq és diagonal

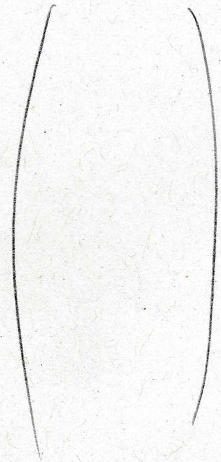
El nostre cas és més complicat (2D)

$$\hat{H}(r,R) = \underbrace{\hat{T}_r}_{\text{cinètica } e^-} + \underbrace{\hat{T}_R}_{\text{cinètica nucli}} + \underbrace{\hat{W}(r,R)}_{\text{potencial}}$$

$$\hat{T} = \overset{\mathrm{Dim\_r \times Dim\_r}}{\underbrace{T_r}_{\text{cinètica } e^-}} \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_r \otimes \overset{\mathrm{DimR \times DimR}}{\underbrace{T_R}_{\text{cinètica nucli}}}$$

Els operadors han de tenir dimensió: (dim r x dim R) x (dim r x dim R) ⊛

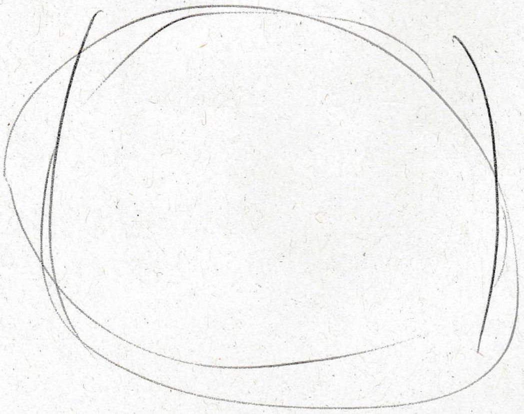
$\Psi(r,R) =$



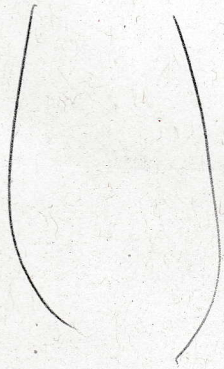
Dim_R x Dim_r

⊛ pq la funció d'ona é vector columna de dimensió dim r x dim R

Dim_R x Dim_r

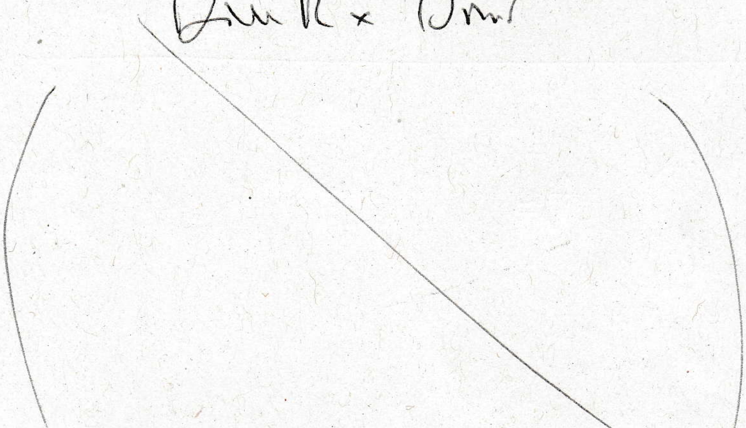


DimR x Dimr



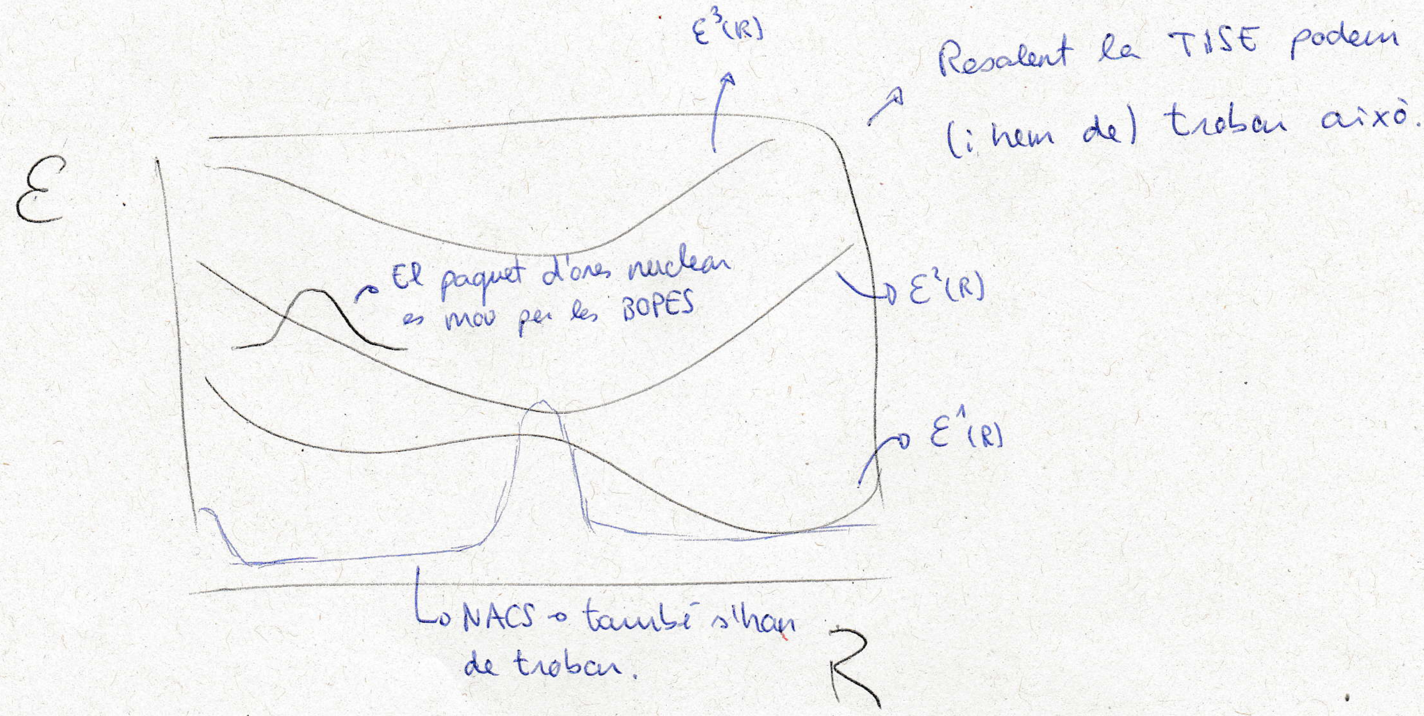
DimR x Dimr

DimR x Dimr



DimR x Dimr

Tornem a la picture de BO (separació e⁻ i nuclis)



Tota la resta ja no és rellevant pel projecte

$$\Psi = \sum_j c^j(t)\, \phi^j$$

$$i\dot{\Psi} = H\Psi$$

$$\Psi = \sum_j c^j(R,t)\, \phi^j_R(r) \rightarrow \boxed{H_{el}}$$

$$i\dot{\Psi} = H\Psi$$