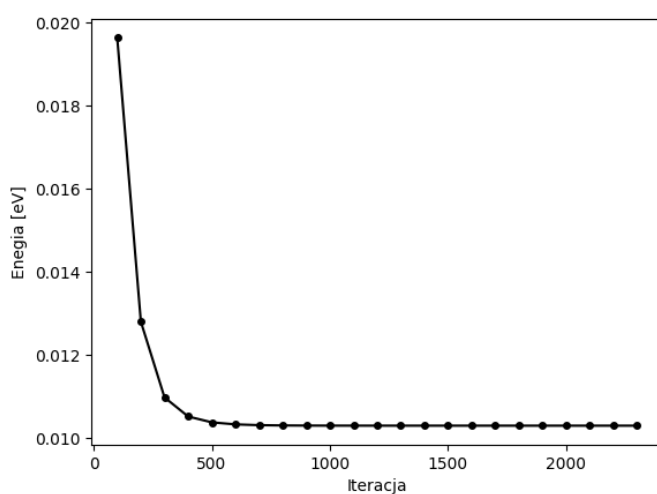


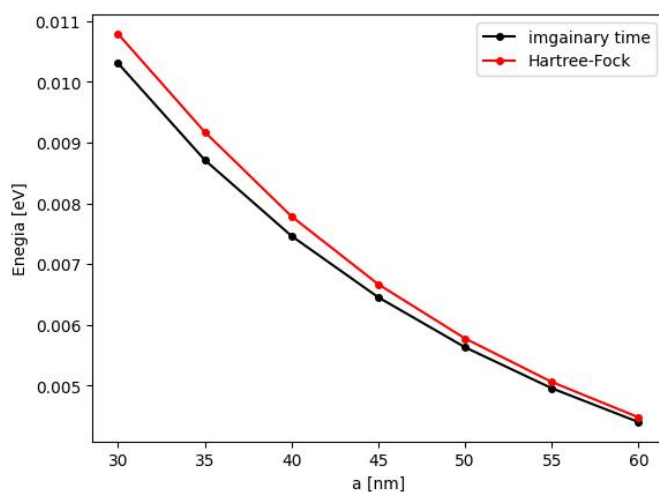
# Projekt 2: Wyznaczanie stanów dwuelektronowych metodą czasu urojonego i Hartree-Focka

Kacper Połuszejko, 412183

1. Zależność energii od liczby iteracji w metodzie czasu urojonego (zad 1).



2. Wykres energii w funkcji  $a$  uzyskany metodą czasu urojonego i metodą Hartree-Focka (zad 2 i 4).



Jak widać na powyższym rysunku, energie uzyskiwane metodą H-F są wyższe. Jest to spowodowane faktem, że metoda H-F nie bierze pod uwagę korelacji elektronowych (elektrony "widzą" jedynie średnie pole). Minimum energii nie jest więc tak dobrze znalezione, jak w przypadku metody czasu urojonego, gdzie dwa elektrony opisuje dwuwymiarowa funkcja falowa (elektrony są zależne od siebie).

3. Mapy kwadratu modułu funkcji falowej dla  $a = 30nm$  i  $a = 60nm$  uzyskanej metodą czasu urojonego (zad 3).

