

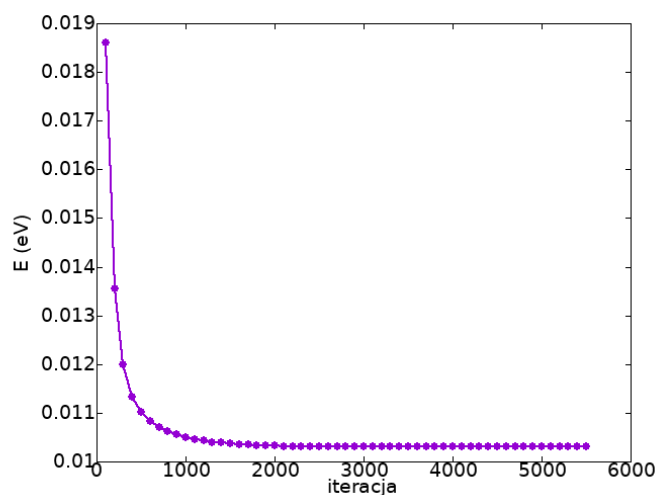
Wyznaczanie stanów wieloelektronowych metodą czasu urojonego i Hartree-Focka

Wyniki

A. Mreńca-Kolasińska

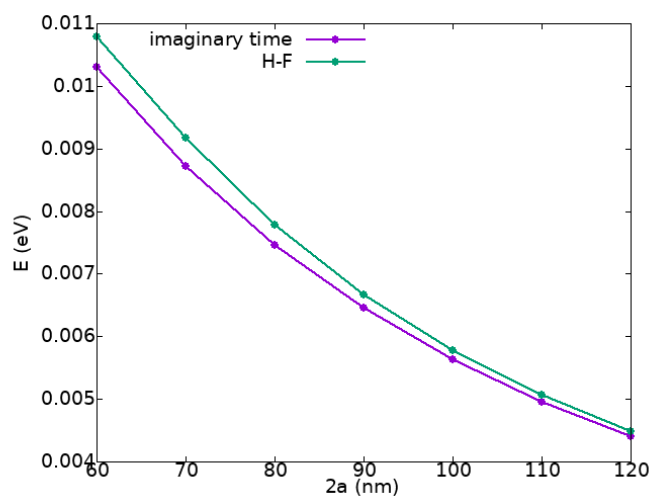
30 czerwca 2021; ostatnia aktualizacja 8 kwietnia 2024

1. Przykładowy wykres energii $E^{(k+1)}$ w funkcji liczby iteracji (zapis do pliku co 100 iteracji). Wynik może się różnić od podanego ze względu na losowość początkowej funkcji falowej.

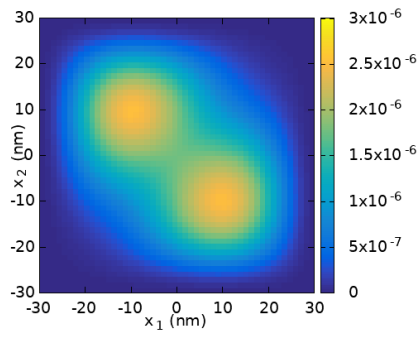


Rysunek 1: Energie w funkcji liczby iteracji dla metody czasu urojonego.

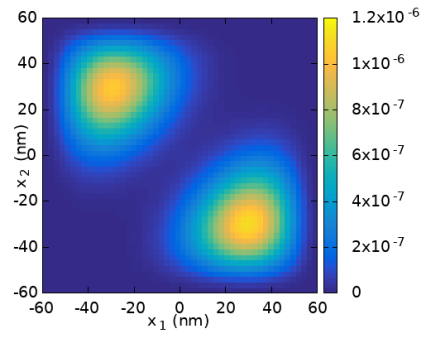
2. - 4. Wykres energii w funkcji a uzyskany metodą czasu urojonego i metodą Hartree-Focka.



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



(a)



(b)

Rysunek 2: Kwadrat modułu funkcji falowej w zależności od położenia 2 elektronów dla (a) $a = 30$ nm i (b) $a = 60$ nm.