

Seria zadań 1.

Krzysztof Kość, Michał Lesiuk, Tatiana Korona

Zadania proszę wykonać w Mathematicie. Jako pełnoprawne rozwiązanie liczy się **JEDEN, DZIAŁAJĄCY** notatnik programu Mathematica opatrzony komentarzami. Ewentualnie, komentarze mogą być umieszczone w dodatkowym pliku pdf, jednak sam plik pdf wyeksportowany z Mathematici, bez oryginalnego notatnika, **NIE BĘDZIE** sprawdzany. Nazwy plików **MAJĄ** zawierać nazwisko i imię autora oraz numer serii zadaniowej. Nazwy plików proszę tworzyć **BEZ** polskich znaków i **BEZ** spacji (można spokojnie użyć twardej spacji typu '_'). Powyższe dane oraz numer indeksu powinny również znaleźć się w samym notatniku. Notatniki zatytułowane '(bez nazwy)', 'serial.nb' itp, od teraz **NIE BĘDĄ** sprawdzane. Nieprzekraczalny deadline na wysłanie rozwiązań zostanie podany na stronie internetowej. Rozwiązania proszę przysyłać do tego terminu do prowadzącego **SWOJEJ** grupy ćwiczeniowej. Zadania należy wykonywać samodzielnie.

Zadanie domowe

W ćwiczeniu pierwszym optymalizowaliśmy jednoparametrową wariacyjną funkcję próbną dla molekularnego jonu wodoru H_2^+ . Jednak do tego zagadnienia można również podejść w sposób podobny, w jaki podeszliśmy do Zadania 3. na zajęciach ze wstępu do obsługi Mathematici. Zamiast postulować pojedynczą funkcję i optymalizować jej wykładnik, możemy użyć więcej niż jednej funkcji o różnych, ale stałych, wykładnikach oraz zaczepionych na obydwu centrach. Nasz problem sprowadza się wtedy do rozwiązania równania sekularnego na nieznane współczynniki rozkładu molekularnej funkcji falowej w bazie funkcji atomowych.

Aby to zrobić, potrzebujemy skonstruować bazę atomową. Zakładamy, że baza zawiera jedynie funkcje typu $1s$, scentrowane na różnych centrach:

$$1s_A(r_A, R, \alpha) = \frac{e^{-\alpha r_A}}{\sqrt{\pi}}, \quad (1)$$

$$1s_B(r_B, R, \alpha) = \frac{e^{-\alpha r_B}}{\sqrt{\pi}}, \quad (2)$$

gdzie wszystkie użyte symbole są zdefiniowane analogicznie jak w poleceniu do Ćwiczenia 1. Z każdej z tych funkcji proszę skonstruować zbiór 9 funkcji bazy o wykładnikach danych wzorem:

$$\alpha_i = AB^{i-3}, i = 1, \dots, 9, \quad (3)$$

$$A = 1.1327XXXX, B = 1.6192XXXX, \quad (4)$$

gdzie XXXX oznacza 4 (cztery) ostatnie cyfry numeru indeksu osoby przesyłającej rozwiązanie. Jak łatwo zauważyć, baza dla całego układu będzie zawierać łącznie 18 orbitali $1s$, po 9 na atom. Zbiór orbitali skonstruowany w ten sposób nazywa się zbiorem temperowanym (*Even Tempered*). Następnie proszę przeprowadzić obliczenia analogiczne do obliczeń w Zadaniu 3. z Ćwiczenia 0 – to znaczy – skonstruować macierze \mathbf{H} i \mathbf{S} i rozwiązać równanie sekularne na energie elektronowe c dla $R \in [0.5, 30.5]$ z krokiem co 0.05 bohra (łącznie 600 kroków), wpisując wyniki sześć najniższych energii do sześciu osobnych dwukolumnowych tablic $\{R, E_k\}$, $k = 1, \dots, 6$. Następnie proszę wykonać rysunek $E_k(R)$ dla tych stanów i omówić zachowanie się krzywych w granicach $R \rightarrow 0$ oraz $R \rightarrow \infty$. Proszę sprawdzić, czy otrzymane krzywe są wiążące i czy posiadają minima (jeśli tak, to dla jakich R) oraz porównać je z krzywymi otrzymanymi przez nas w Ćwiczeniu 1.

Podpowiedzi:

- Wszystkie całki należy policzyć we współrzędnych eliptycznych (por. Ćwiczenie 1)
- Jednym z możliwych sposobów rozwiązania tego zadania jest na przykład skonstruowanie pełnych macierzy \mathbf{S} i \mathbf{H} z czterech bloków typu AA,AB,BA,BB, w których liczymy odpowiednie całki między funkcjami scentrowanymi na odpowiednich jądrach (AA,BB będą blokami diagonalnymi, AB i BA pozadiagonalnymi) Polecenie `ArrayFlatten` może pomóc w konstrukcji pełnej macierzy z macierzy blokowych. Nie jest to obowiązkowe, można to zrobić na dowolny sposób, byle byłby skuteczny.
- Macierz \mathbf{S} nie jest diagonalna
- Macierze \mathbf{H} i \mathbf{S} można skonstruować dla dowolnego R , a następnie w każdym kroku podstawiać symbolicznie daną wartość, na przykład za pomocą komendy: `S /. R -> ri`, gdzie `ri` jest konkretną wartością liczbową R .
- Komenda `Eigenvalues[{A,B}] // Sort` rozwiązuje uogólniony problem własny macierzy A względem B i sortuje wartości własne rosnąco. Można to połączyć z podpowiedzią podaną w poprzednim punkcie.

Powodzenia!