

Název práce: Nová metoda řešení Schrödingerovy rovnice

Autor: Jakub Kocák

Katedra: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Filip Uhlík, Ph.D.

Abstrakt: Tato práce se věnuje metodě řešení časově nezávislé Schrödingerovy rovnice pro základní stav. Vlnová funkce interpretována jako hustota pravděpodobnosti je reprezentovaná vzorky. V každé iteraci je aplikován aproximant propagátoru podél imaginárního času. Působení operátora je implementováno Monte Carlo simulací. Nemalá část práce se věnuje metodám výpočtu energie vlnové funkce reprezentované vzorky. Je rozebrána metoda na základě odhadu hodnoty vlnové funkce, metoda konvoluce s tepelným jádrem, metoda průměrné energie vážené vlnovou funkcí a metoda exponenciálního poklesu. Metoda řešení byla použita k nalezení základního stavu a energie 6-dimenzionálního harmonického oscilátoru, anharmonického 3-dimenzionálního optického oscilátoru a atomu vodíku.

Klíčová slova: propagace v imaginárním čase, Monte Carlo metoda, variační princip, základní stav