

# Algebraické metody v atomové fyzice

Vedoucí projektu: Mgr. Vojtěch Patkóš, Ph.D.  
Katedra chemické fyziky a optiky

vojtech.patkos@mff.cuni.cz

Započtení elektrostatické interakce mezi elektrony je nutné k dosažení kvantitativní shody mezi teorií a experimentem ve fyzice atomů, molekul, pevných látek, atd. Protože přesné započtení této interakce není možné, jsou výpočty atomových a molekulárních spekter založeny na přibližné, tzv. variační metodě. V rámci této metody pak započtení elektronové interakce standardně vede na výpočet tzv. atomových, popř. molekulárních integrálů.

S narůstajícím požadavkem na přesnost výpočtu však vzrůstá výpočetní náročnost těchto integrálů a to jak z hlediska numerické stability výpočtu, tak z hlediska časové náročnosti výpočtu. V nedávné době [1] se podařilo dosáhnout značného pokroku v tomto směru pro atomové integrály. Tento pokrok spočívá v kombinaci analytického a algebraického přístupu: atomové funkce zde nejsou definovány primárně svým analytickým předpisem, ale algebraickými vztahy které splňují.

Je však možnost jít ještě dál a atomové, popř. molekulární, integrály počítat čistě algebraicky, to jest jako odmocninu z matice. Matematici vyvinuli řadu metod pro efektivní výpočet odmocniny z matice, viz [2]. Cílem projektu by bylo tuto možnost systematicky prozkoumat.

## Literatura:

[1] T. Uhlířová, J. Zamastil and J. Benda, Calculation of Atomic Integrals between Relativistic Functions by means of Algebraic Methods, submitted to Computer Physics Communication. Viz též J. Zamastil, F. Vinette and M. Šimánek, The use of commutation relations for the calculation of the atomic integrals, Phys. Rev. A 75, 022506 (2007).

[2] N. J. Higham, Math. Comp. 46, 537 (1986). Viz též N. J. Higham, Numerical Algorithms 15, 227 (1997); E.D. Denman and A. N. Beavers, Jr., Appl. Math. Comput. 2, 63 (1976).