

Roman Čurík - Ústav fyzikální chemie JH AV ČR

Dva návrhy pro diplomové práce z oblasti kvantových srážek:

1. Hartree-Fockova teorie kontinuálních stavů.

Student odvodí a implementuje Hartree-Fockovy rovnice pro kontinuální stavy ve formě eigenkanálové R-matice. Po úspěšné implementaci bude metoda vylepšena druhým řádem poruchové teorie.

2. Simulace disociativní rekombinace pomocí 2D modelu.

Student bude pracovat s již zavedeným 2D modelem pro popis nukleární dynamiky molekul při srážce s elektronem. Cílem bude rozšíření modelu pro několik parciálních vln, které povede na popis tzv. přímých procesů.