

Streszczenie

Niniejsza praca doktorska ma na celu zbadanie dwuatomowych układów molekularny przy pomocy metody (EDABI) opracowanej i stosowanej w naszym zespole, a następnie zastosowanie jej do układów silnie skorelowanych elektronów. W ten sposób przyczyniamy się do trwającej dyskusji na temat podstaw chemii kwantowej, w szczególności wiązań chemicznych i podstawowych aspektów mechaniki kwantowej, zwłaszcza splątania dwóch fermionów. Wprowadzamy pojęcia kowalencyjności właściwej i atomowości oraz omawiamy ich rolę w komplementarnej charakterystyce wiązań chemicznych. Badane dwuatomowe układy molekularne to H_2 , HeH^+ , LiH , H_2^+ oraz H_2^- . Praca rozpoczyna się od dokładnego rozwiązania rozszerzonego modelu Heitlera-Londona dla H_2 a następnie skupia się dynamiczną interakcją między kowalencyjnością właściwą, atomowością i jonowością. Ponadto, analizujemy dynamiczne wkłady do energii stanu podstawowego, pochodzące ze wszystkich jednocząstkowych i dwucząstkowych składników. Podkreślono związek między zachowaniem się układów molekularnych a układów nano na progu lokalizacji Mott-Hubbarda. Praca obejmuje również porównawczą analizę wyników uzyskanych metodą EDABI z wynikami innych nowoczesnych metod chemii kwantowej, takich jak metoda konfiguracji oddziaływań (CI), czy metoda Hartree-Focka (HF). W końcu odnosimy wprowadzone przez nas charakterystyki do korelacji splątania wyrażając je poprzez entropię von Neumanna.

Słowa Kluczowe: molekula wodoru, dwuatomowe układy molekularne, silne korelacje w molekułach, kowalencyjność właściwa, atomowość, zjawisko Motta-Hubbarda w wiązaniu