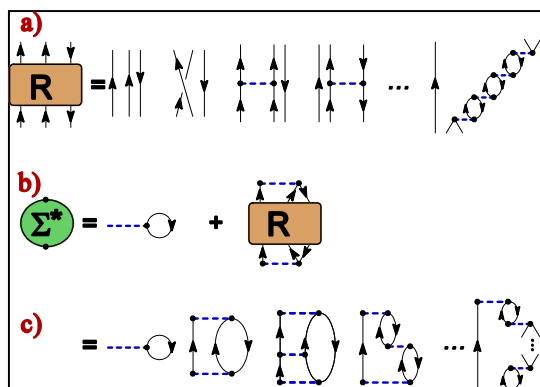


GREENSE FUNCTIE BEREKENINGEN OP ADC(3)-NIVEAU

Keywords: Veeldeeltjesfysica, Greense functie theorie, ADC(3)



Ab-initio berekeningen met behulp van het Greense functie formalisme worden verricht met een bepaalde benadering voor de elektronische zelf-energie. Tot hiertoe werden in de groep een zelf-consistente tweede-orde zelf-energie, en een zelf-energie van het GW-type bestudeerd. Hoewel de bekomen bindingsenergie en quasideeltjeseigenschappen de Hartree-Fock waarden reeds aanzienlijk corrigeren, ontbreken toch bepaalde correlaties in het model. Voor eindige systemen is het bijvoorbeeld onontbeerlijk uitwisselingsdiagrammen in

het deeltje-gat kanaal mee te nemen. Deze ontbreken echter in de GW zelf-energie, vermits enkel directe (ring) diagrammen worden gesommeerd. Meer gesofisticeerde modellen, zoals hogere orde “algebraic diagrammatic construction” (ADC) zelf-energieën van de Heidelberg groep, voldoen hier wel aan, en leveren in derde orde (ADC(3)) uiterst accurate ionisatie-energieën voor atomen en kleine molecules. De ADC zelf-energie is echter problematisch in de elektrongas limiet, vermits enkel “forward propagating” diagrammen van het Tamm-Dancoff type tot op alle ordes worden gesommeerd.

Er zijn verschillende invalshoeken mogelijk voor deze thesis.

- De 2p1h-toestanden worden gekoppeld met de ééndeeltjesruimte via een vertex die bepaald wordt uit storingsrekening. Tot op heden wordt er gebruik gemaakt van een 2de orde benadering. Deze kan uitgebreid worden tot hogere orde.
- Wanneer de Hartree-Fock grondtoestand geen goede benadering vormt, faalt ook storingsrekening die erop gebaseerd is. Om dit te vermijden kan fragmentatie van de ongestoorde propagator ingevoerd worden.

Het voorgestelde onderzoek omvat ab-initio Greense functie berekeningen met de ADC(3) zelf-energie op een reeks eenvoudige moleculen, via standaard moleculaire basisset expansies. Enige voorkennis omtrent veeldeeltjesfysica is aangewezen, maar niet noodzakelijk.

Promotoren: Prof. Dr. D. Van Neck – dimitri.vanneck@ugent.be (09/264.65.57),
Prof. Dr. M. Waroquier - michel.waroquier@ugent.be (09/264.65.59) / **Begeleiding:** ir. M. Degroote –
matthias.degroote@ugent.be (09/264.65.76) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>