



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



Εβδομαδιαίο Σεμινάριο

## Αναλυτική δικαιολόγηση της κλασσικής ως όριο της κβαντικής μοριακής δυναμικής

Ιωάννης Γιαννούλης

*Τμήμα Μαθηματικών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων*

Στα πλαίσια της κβαντικής μοριακής δυναμικής, η χρονική εξέλιξη της θέσης και της ορμής ενός συνόλου  $M$  μορίων περιγράφεται μέσω των κυματοσυναρτήσεων που επιλύουν την χρονικά εξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger με το δυναμικό των Born-Oppenheimer, το οποίο αποτελείται από το ιδιάζων δυναμικό της αλληλεπίδρασης των πυρήνων και ένα τραχύ (μη λείο) δυναμικό που προκύπτει από την προσέγγιση της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων και του δυναμικού αλληλεπίδρασής τους με άλλα ηλεκτρόνια και με τους πυρήνες. Στην κβαντική αυτή περιγραφή, εμφανίζεται ως μικρή παράμετρος ο λόγος μάζας ηλεκτρονίου προς πυρήνα  $0 < \epsilon^2 \ll 1$ . Από την άλλη, στα πλαίσια της κλασσικής μοριακής δυναμικής, φανταζόμαστε την κίνηση των μορίων σαν να δίνεται από την κίνηση των πυρήνων τους ως κλασσικά σωματίδια των οποίων η θέση και ορμή περιγράφεται μέσω ενός Χαμιλτονιανού δυναμικού συστήματος, τρόπον τινά αγνοώντας τα ηλεκτρόνια, δηλαδή στο όριο  $\epsilon \rightarrow 0$ . Από καθαρά υπολογιστική άποψη το όριο αυτό λαμβάνεται σχετικά εύκολα. Η δυσκολία έγκειται κυρίως στην αναλυτική απόδειξη της κατάλληλης έννοιας σύγκλισης η οποία θα είναι και το κύριο περιεχόμενο της διάλεξης.

Τετάρτη 21 Νοεμβρίου 2012, 5:30μμ

Αίθουσα 201α Τμήματος Μαθηματικών

Μετά την ομιλία ακολουθεί καφές και συζήτηση στο εντευκτήριο του Τμήματος