



**Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας  
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών  
Βασ. Κωνσταντίνου 48, Αθήνα**

## **ΔΙΑΛΕΞΗ**

**“Αρχή ελαχιστοποίησης για σαγματοειδή σημεία /  
διηγεμένες κβαντικές καταστάσεις και εφαρμογές”**

**Δρ. Ναούμ Μπακάλης  
Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας,  
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών**

**Πέμπτη 15 Νοεμβρίου 2018, ώρα 12:00  
Αίθουσα σεμιναρίων στο ισόγειο του ΕΙΕ**

## Αρχή ελαχιστοποίησης για σαγματοειδή σημεία / διηγευμένες κβαντικές καταστάσεις και εφαρμογές

Ναούμ Μπακάλης

*ΙΘΦΧ/ΕΙΕ*

Πολλές χημικές αντιδράσεις γίνονται σε διηγευμένες καταστάσεις, άρα πρέπει, εκτός από την ενέργεια διεγέρσεως, να γνωρίζουμε και την κυματοσυναρτήση για να παρέχουμε στους πειραματικούς σωστές ερμηνείες είτε προβλέψεις. Οι διηγευμένες καταστάσεις στον χώρο των κυματοσυναρτήσεων είναι σαγματοειδή σημεία της ενέργειας, και δεν μπορούν να υπολογισθούν με ελαχιστοποίηση της ενέργειας, όπως γίνεται για την βασική κατάσταση. Οι συνήθεις μέθοδοι υπολογισμού αναπτύσσουν την κυματοσυναρτήση σε μιά σειρά (ζητουμένων συντελεστών) και ελαχιστοποιούν την επιθυμητή ανώτερη ιδιοτιμή της ενέργειας. Αλλά έτσι βρίσκουν ένα ελάχιστο, (δηλαδή όχι το σαγματοειδές σημείο της διηγευμένης καταστάσεως) και γι αυτό καταφεύγουν σε τεράστιες σειρές (όσο μεγαλύτερες τόσο ακριβέστερες) που, ως εκ τούτου, είναι φυσικώς δυσνόητες. Στο ΙΘΦΧ αναπτύξαμε, και θα δείξουμε, ένα συναρτησοειδές της κυματοσυναρτήσεως που έχει ελάχιστο επί του σαγματοειδούς σημείου της επιθυμητής διηγευμένης καταστάσεως, ανεξαρτήτως του μεγέθους της σειράς. Άρα μπορούμε να δίνουμε σωστές πληροφορίες με μικρές και κατανοητές κυματοσυναρτήσεις. Στην ομιλία θα παρουσιάσουμε το συναρτησοειδές με διάφορα αποτελέσματα εν συγκρίσει προς συνήθεις μεθόδους, και μερικές εφαρμογές, όπως η άμεση βελτίωση της βασικής καταστάσεως μέσω της διηγευμένης καταστάσεως.