



Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Υπολογιστικής Φυσικής

## **Υπολογιστική Κβαντική Φυσική και Εφαρμογές**

**Κυματοσυναρτήσεις βασικής κατάστασης των ατόμων He-Ne**

**Κουφετίδης Γιώργος**

**AEM:4432**

Για τον υπολογισμό των κυματοσυναρτήσεων χρησιμοποιήθηκε η Roothaan-Hantree-Fock Method. Κατά την οποία έχουμε μοντέλο ανεξάρτητων σωματιδίων σε μη σχετικιστική προσέγγιση. Για τον υπολογισμό της ακτινικής κυματοσυνάρτησης χρησιμοποιήθηκε η παρακάτω σχέση:

$$R_{nl}(r) = \sum_j S_{jl} C_{jln} \quad (1)$$

Όπου  $S_{jl}$  έχουμε:

$$S_{jl} = N_{jl} r^{n_{jl}-1} e^{-Z_{jl} r} \quad (2)$$

Με κανονικοποιημένο όρο  $N_{jl}$  ο οποίος δίνεται από την σχέση:

$$N_{jl} = \frac{(2Z_{jl})^{n_{jl}+\frac{1}{2}}}{[(2n_{jl})!]^{\frac{1}{2}}} \quad (3)$$

Ο όρος  $Z_{jl}$  είναι ο τροχιακός εκθέτης, ο όρος  $n_{jl}$  είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός και  $l$  ο αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός.

Για να υπολογίσουμε τις αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις στον χώρο των ορμών γίνονται οι παρακάτω υπολογισμοί με βάση την μέθοδο του RHF.

$$\tilde{R}_{nl}(k) = \sum_j \tilde{S}_{jl}(k) C_{jln} \quad (4)$$

Οι συναρτήσεις  $\tilde{S}_{jl}(k)$  στον χώρο των ορμών υπολογίζονται από την παρακάτω σχέση:

$$\tilde{S}_{jl}(k) = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 S_{jl}(r) j_l(kr) \quad (5)$$

Στην συνέχεια υπολογίζουμε την εντροπία πληροφορίας για τον χώρο των θέσεων και ορμών αντίστοιχα:

$$S_r = - \int_0^\infty \rho(\mathbf{r}) \ln \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (6)$$

$$S_k = - \int_0^{\infty} n(\mathbf{k}) \ln n(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (7)$$

Όπου  $\rho(\mathbf{r})$  και  $n(\mathbf{k})$  είναι η κατανομή πυκνότητας ηλεκτρονίων στον χώρο των θέσεων και ορμών αντίστοιχα.

## Μεθοδολογία

Θα αναφερθεί συνοπτικά η διαδικασία υπολογισμού του  $S_r$  και  $S_k$  για το He.

Το He διαθέτει 2 ηλεκτρόνια άρα η κατανομή των ηλεκτρονίων σε στοιβάδες θα είναι η εξής:

$[\text{He}] = 1s^2$ . Με βάση την [3] αναφορά θα χρησιμοποιήσω τις ακόλουθες εξισώσεις οι οποίες προκύπτουν από τις παραπάνω σχέσεις:

Για τον χώρο των θέσεων:

$$Sr1s(z, r) = 2\sqrt[3]{z^2} \cdot e^{-z \cdot r} \quad (8)$$

$$Sr2s(z, r) = \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \sqrt[5]{z^2} \cdot r \cdot e^{-z \cdot r} \quad (9)$$

$$Sr3s(z, r) = \frac{\sqrt[3]{2^2}}{3 \cdot \sqrt{5}} \cdot \sqrt[7]{z^2} \cdot r^2 \cdot e^{-z \cdot r} \quad (10)$$

Για τον χώρο των ορμών:

$$Sk1s(z, k) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot 16 \cdot \pi \cdot \frac{z^{\frac{5}{2}}}{(z^2+k^2)^2} \quad (11)$$

$$Sk2s(z, k) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot 16 \cdot \pi \cdot \frac{z^{\frac{5}{2}} \cdot (3 \cdot z^2 - k^2)}{\sqrt{3} \cdot (z^2+k^2)^3} \quad (12)$$

$$Sk3s(z, k) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot 64 \cdot \sqrt{10} \cdot \pi \cdot \frac{z^{\frac{9}{2}} \cdot (z^2 - k^2)}{5 \cdot (z^2+k^2)^4} \quad (13)$$

Μετέπειτα υπολογίζεται το  $R1s$  όπου θα έχουμε:

$$R1s = 1.3479 \cdot Sr1s(1.4595, r) - 0.001613 \cdot Sr3s(5.3244, r) - 0.100506 \cdot Sr2s(2.6298, r) - 0.270779 Sr2s(1.7504, r) \quad (14)$$

Οι συντελεστές προκύπτουν από την [3].

Έλεγχος κανονικοποίησης όπου υπολογίζεται το ακόλουθο ολοκλήρωμα:

$$\int_0^{\infty} R1s^2 \cdot r^2 dr = 1 \quad (15)$$

Υπολογισμός της κατανομής πυκνότητας ηλεκτρονίων στον χώρο των ορμών:

$$p(r) = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot 2} \cdot 2 \cdot R1s^2 \quad (16)$$

Έλεγχος κανονικοποίησης του  $p(r)$ :

$$\int_0^{\infty} 4\pi \cdot p(r) \cdot r^2 dr = 1 \quad (15)$$

Υπολογισμός της εντροπίας:

$$S_r = - \int_0^{\infty} 4\pi \cdot p(r) \cdot \ln p(r) \cdot r^2 dr \quad (16)$$

Αντίστοιχα στον χώρο των ορμών θα έχουμε:

$$Nk1s = 1.3479 \cdot Sk1s(1.4595, r) - 0.001613 \cdot Sk3s(5.3244, r) - 0.100506 \cdot Sk2s(2.6298, r) - 0.270779Sk2s(1.7504, r) \quad (17)$$

Οι συντελεστές προκύπτουν από την [3].

Έλεγχος κανονικοποίησης όπου υπολογίζεται το ακόλουθο ολοκλήρωμα:

$$\int_0^{\infty} Nk1s^2 \cdot k^2 dk = 1 \quad (18)$$

Υπολογισμός της κατανομής πυκνότητας ηλεκτρονίων στον χώρο των ορμών:

$$n(k) = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot 2} \cdot 2 \cdot Nk1s^2 \quad (19)$$

Έλεγχος κανονικοποίησης του  $n(k)$ :

$$\int_0^{\infty} 4\pi \cdot n(k) \cdot k^2 dk = 1 \quad (20)$$

Υπολογισμός της εντροπίας:

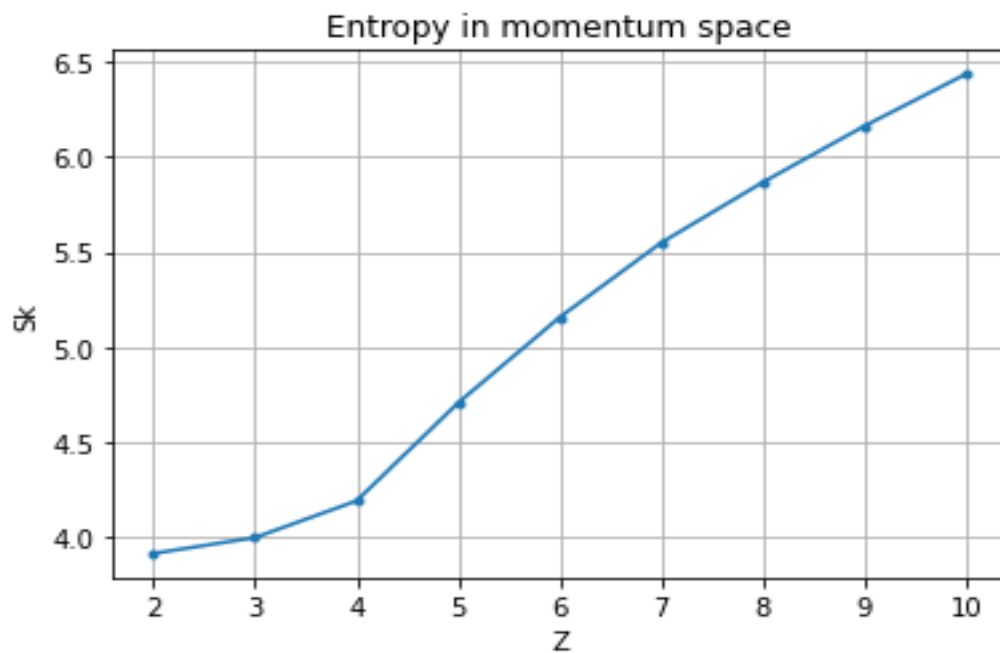
$$S_k = - \int_0^{\infty} 4\pi \cdot n(k) \cdot \ln n(k) \cdot k^2 dk \quad (21)$$

Αποτελέσματα:

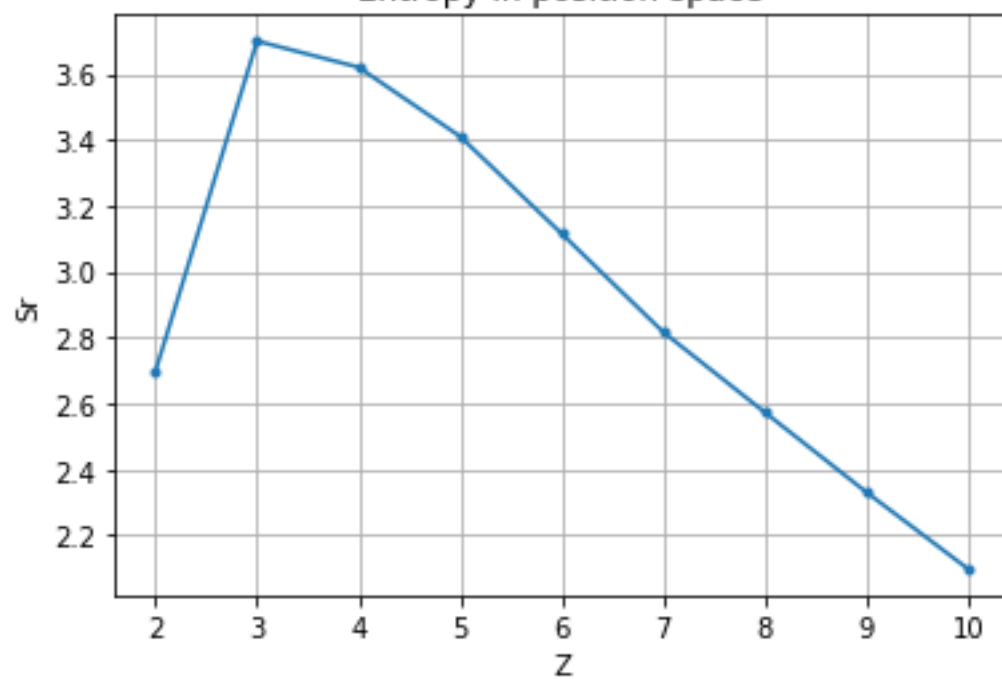
Η παραπάνω μεθοδολογία επαναλαμβάνεται για όλα τα άτομα μέχρι το Ne.

Εντροπίες  $S_r$  και  $S_k$  και  $S = S_r + S_k$

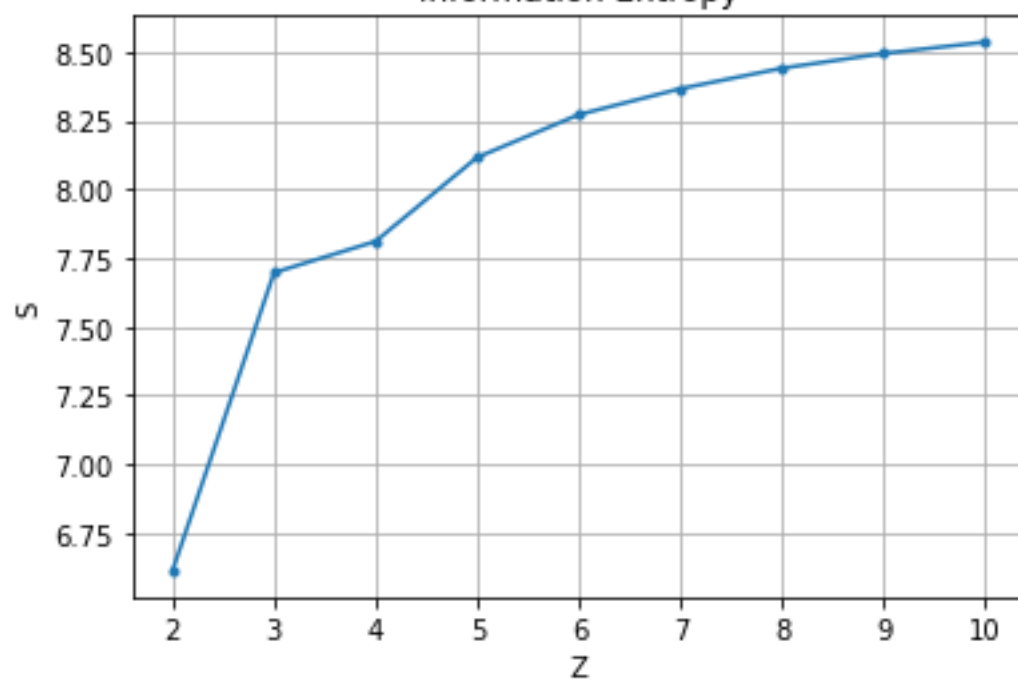
Z	Atom	$S_r$	$S_k$	S
2	He	2.6985	3.9134	6.6119
3	Li	3.6996	3.9968	7.6965
4	Be	3.6202	4.1902	7.8104
5	B	3.4103	4.7059	8.1162
6	C	3.1152	5.1566	8.2717
7	N	2.8168	5.5493	8.3661
8	O	2.5734	5.8674	8.4407
9	F	2.3312	6.1633	8.4945
10	Ne	2.0986	6.4371	8.5357



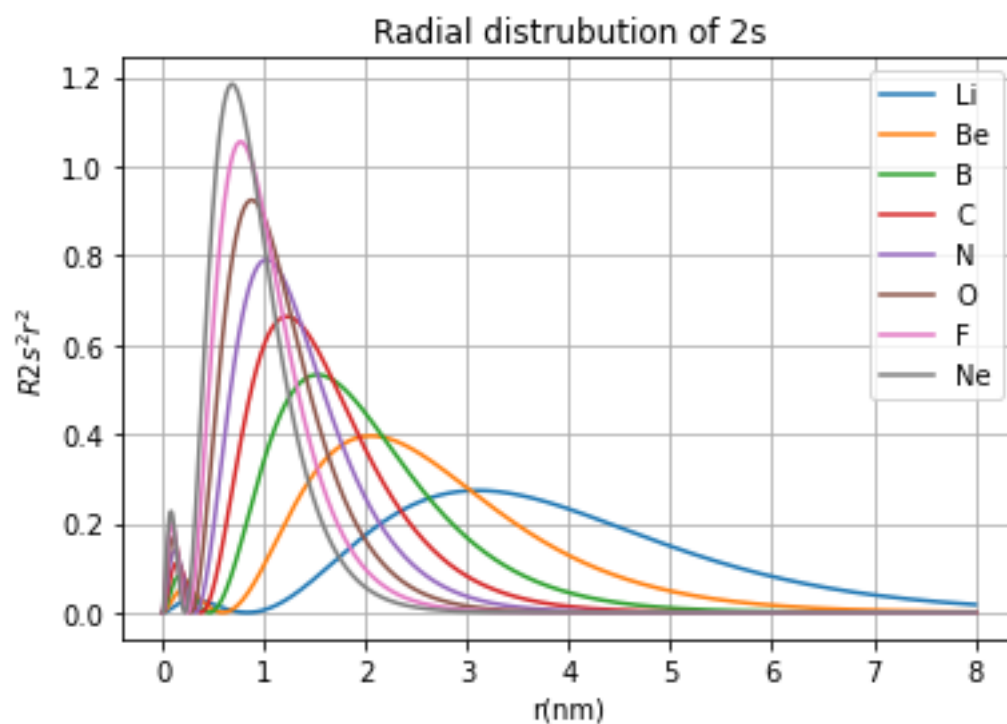
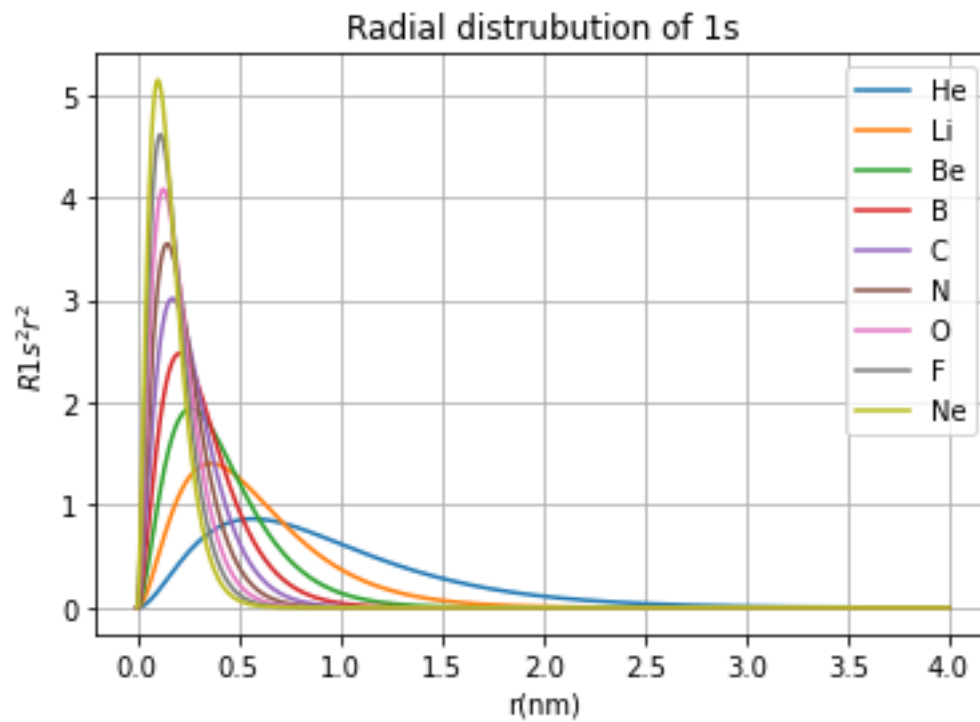
Entropy in position space

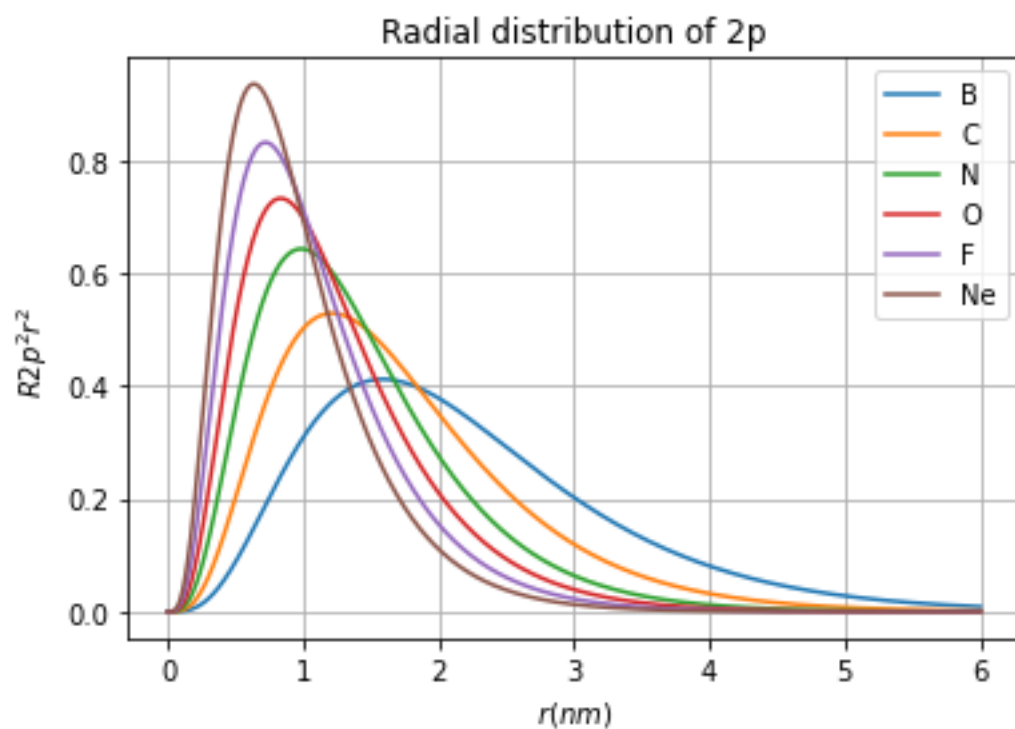


Information Entropy

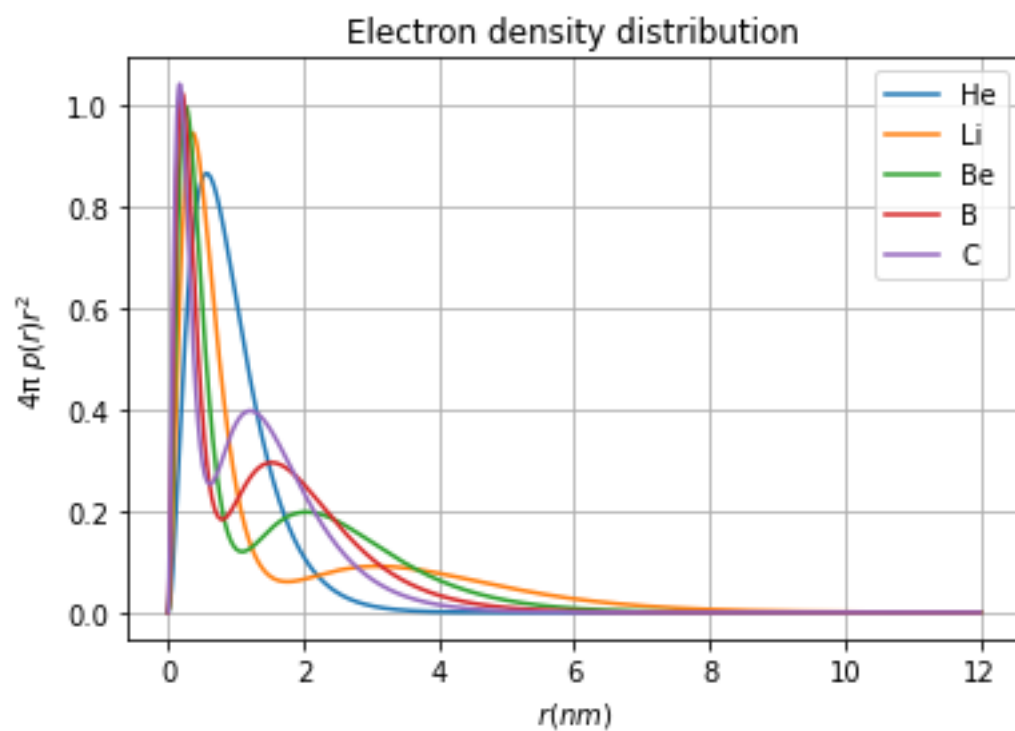


Παρακάτω ακολουθούν τα διαγράμματα ακτινικής κατανομής για το κάθε τροχιακό

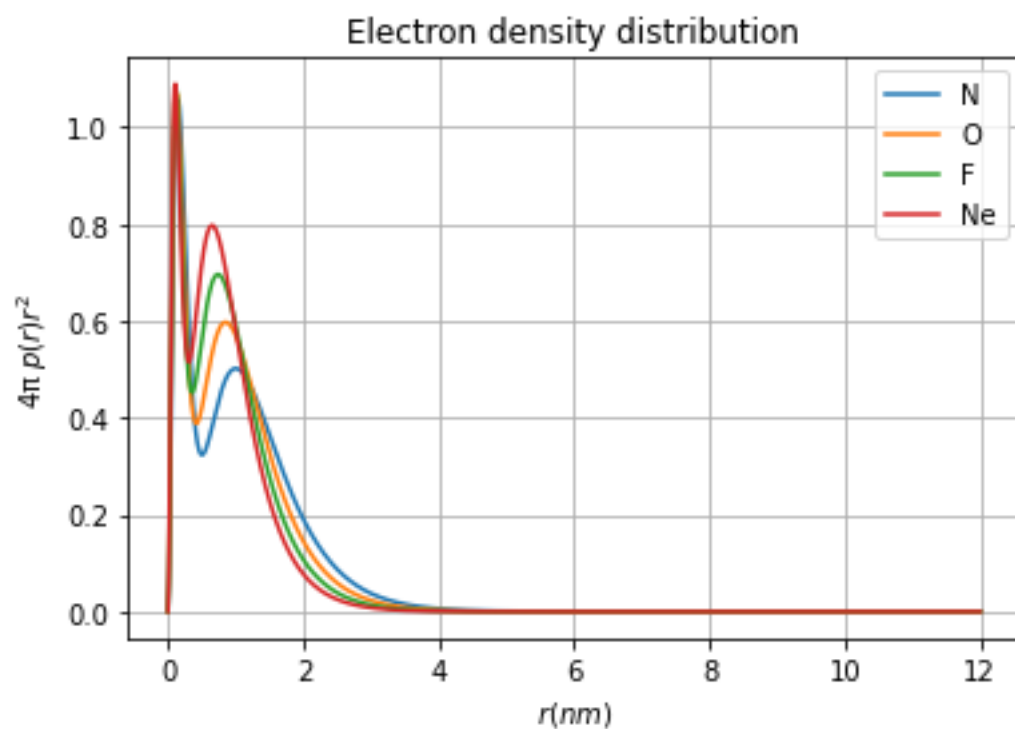




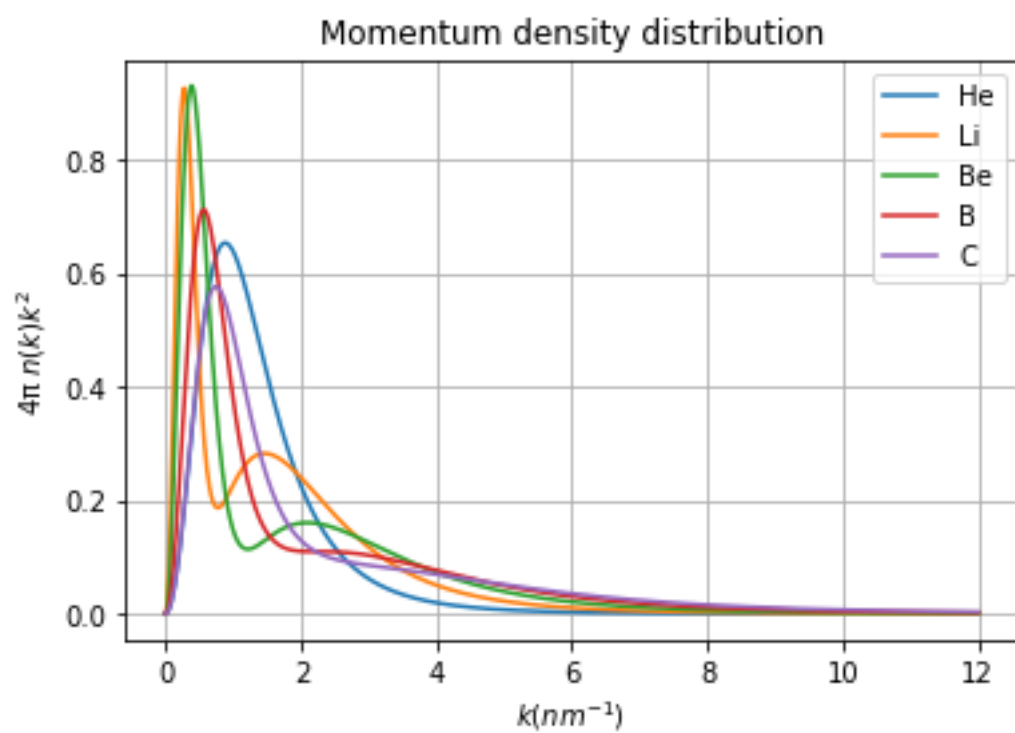
Τα παρακάτω διαγράμματα δείχνουν την κατανομή της πυκνότητας ηλεκτρονίων στον χώρο των θέσεων.

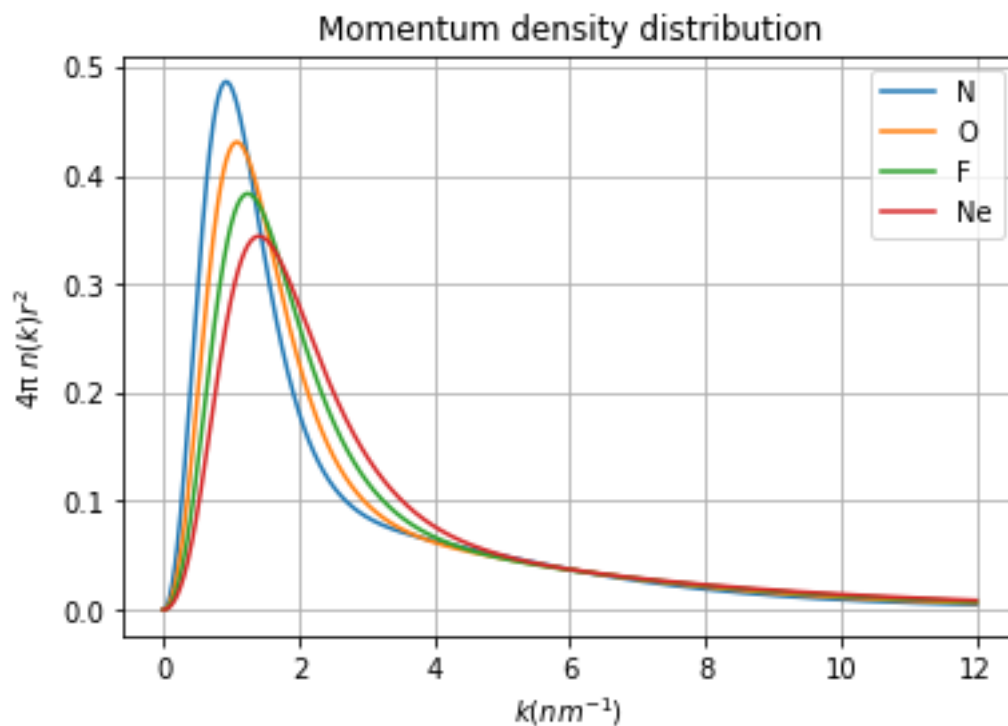






Παρακάτω φαίνονται τα διαγράμματα κατανομή της ορμής





#### Αναφορές:

1. Glashow, S., et al., 2004. Neutrinos as a probe of physics beyond the standard model. *Physical Review D*, 70(11), pp.113008-1 - 113008-20. doi:10.1103/PhysRevD.70.113008.
2. Chatzisavvas, K. Ch., Moustakidis, Ch. C., and Panos, C. P., 2005. Information entropy, information distances, and complexity in atoms. *The Journal of Chemical Physics*, 123(17), 174111. doi:10.1063/1.2121610.
3. Roothaan, C. C. J., 1960. New Developments in Molecular Orbital Theory. *Reviews of Modern Physics*, 32(2), pp.179-185.