www.salampnu.com

مباني شيمي كوانتومي

رشته شيمي

تعداد واحد: ۳

منبع: شيمي كوانتومي

تاليف: دكتر قاسم خدادادي

انتشارات : دانشگاه پيام نور

تهيه كننده: محسن افتاده – عضو هيئت علمی مرکز اصفهان

تاريخ: ۱/۶/۱۳۸۵

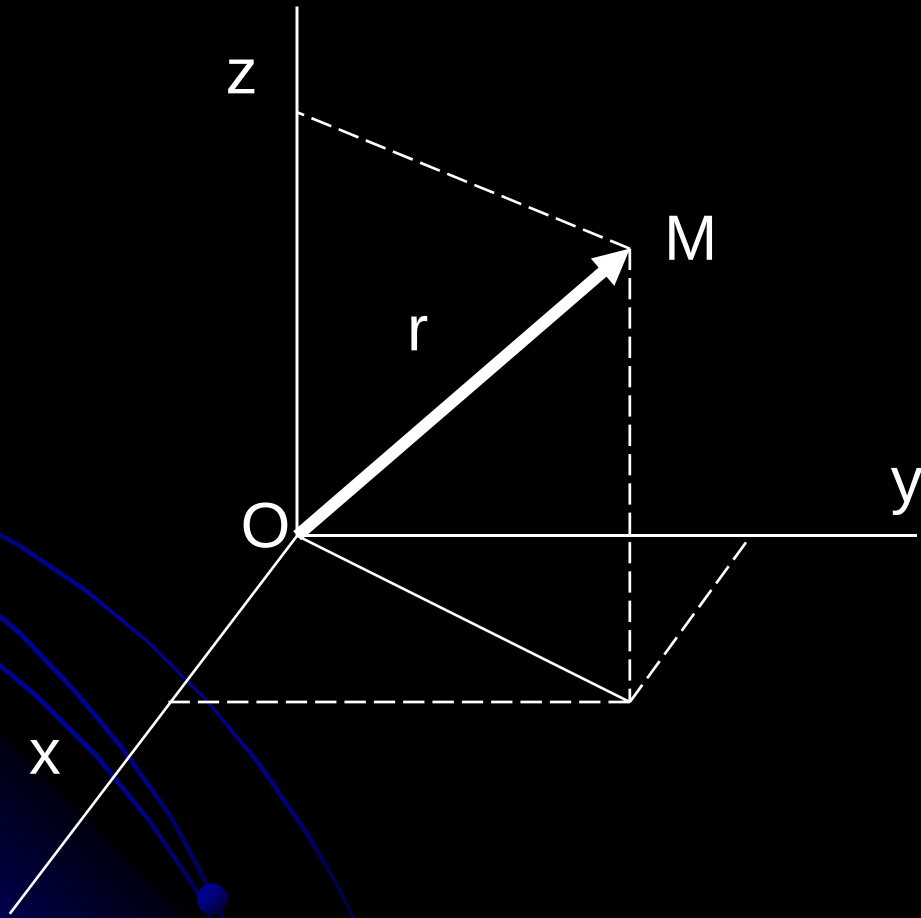
فصل ۱

مکانیک کلاسیک منظومه های ذره ای

مختصات و درجه های آزادی منظومه

حرکت باید نسبت به یک چهارچوب معین که آن را ثابت فرض می کنند مطالعه شود

وضع نقطه مادی **M** در فضا به وسیله بردار **OM** که بردار موضعی **M** نام دارد یا تصاویر آن بر روی سه محور توصیف می شود



بنا به مسئله ای که در پیش است، الکترون، اتم، مولکول، اجسام معمولی و حتی اجرام کیهانی را نقطه مادی فرض می کنند.

پس هر ذره در چهار چوب مکانیک کلاسیک سه درجه آزادی را دارد

اگر منظومه از Nذره تشکیل شده باشد مانند مولکول که در نگاه اول از چند مولکول تشکیل شده است وضع آن در فضا با $3N$ مختصات دکارتی x_i و y_i و z_i مشخص و توصیف می شود

سرعت و تکانه ذره

$$\overrightarrow{V} = \frac{\overrightarrow{dr}}{dt}$$

بردار سرعت بنا به تعریف : مشتق نسبت به زمان بردار موضعی ذره

تکانه خطی یا به صورت خلاصه تکانه ذره : کمیتی است برداری همراستا با بردار سرعت و برابر **mv** که در آن **m** جرم ذره است

معادله دیفرانسیل حرکت(معادله نیوتن)

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}) = \vec{F}$$

$$\frac{d}{dt}P_x = F_x$$

$$\frac{d}{dt}P_y = F_y$$

$$\frac{d}{dt}P_z = P_z$$

تکانه زاویه ای

$$\vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F}$$

$$\frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{P}) = \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{P}$$

$$\frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{P}) = \vec{r} \times \vec{F}$$

تکانه زاویه ای : کمیت داخل دو کمان که گشتاور تکانه نسبت به مبدا مختصات ، O ، است

مشتق تکانه زاویه ای نسبت به زمان ، در هر لحظه ، برابر است با گشتاور نیروی وارد بر ذره

مولفه تکانه زاویه ای

$$L_x = yP_z - zp_y$$

$$L_y = zP_x - xP_z$$

$$L_z = xP_y - yP_x$$

کار انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل

کاری که نیرو در این تغیر مکان انجام می دهد مساوی است
با حاصل ضرب نرده ای دو بردار $\vec{F}$ و $\vec{dr}$

$$dW = \vec{F} . \vec{dr} = F.dr.\cos\theta$$

$$W = \int_A^B F.\cos\theta dr$$

$$W = \int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z$$

$$= \int_A^B \sum F_i dx_i$$

انرژی جنبشی

$$W = \int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z$$

$$= \int_A^B (F_x v_x dt + F_y v_y dt + F_z v_z)$$

$$W = \int_A^B (v_x dv_x + v_y d_y + v_z d_x)$$

$$= \left[\frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \right]_A^B$$

$$W = \frac{1}{2} m v^2{}_B - \frac{1}{2} m v^2{}_A$$

$$T = \frac{Px^2 + Py^2 + Pz^2}{2m} = \frac{P^2}{2m}$$

انرژی پتانسیل

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V$$

$$F_X = -\frac{\partial V}{\partial X} \quad , \quad F_Y = -\frac{\partial V}{\partial Y} \quad , \quad F_Z = -\frac{\partial V}{\partial Z}$$

انرژی پتانسیل ذره در آن نقطه است که با گذشت زمان تغیر نمی کند و ثابت می ماند

میدان نیرو پایستار (کنسرواتیو) است

کار نیروی وارد به ذره بین دو نقطه A و B در جریان حرکت ذره مساوی است با مقدار تابع V در نقطه A (آغز حرکت) منهای مقدار تابع V در نقطه B (انتهای حرکت) یعنی عکس تغیرات تابع V

اصل بقای انرژی (پایستگی انرژی)

$$\frac{1}{2}mV_B^2 - \frac{1}{2}mV_A^2 = V_A - V_B$$

$$T_B + V_B = T_A + V_A$$

$$T + V = E$$

که اصل بقای انرژی را بیان می کند

مکانیک لاگرانژ ، هامیلتون و ژاکوبی

شکل معادلات نیوتن با تغیر سیستم مختصات تغیر می کند

چنانکه وقتی از مختصات دکارتی به مختصات کروی میرویم آن معادلات حفظ نمی شود

اما معادلاتی که بدست می آوریم در هر سیستم مختصاتی ارزش خود را حفظ میکند

$$L(\overset{\circ}{x}_i, x_i) = T - V$$
$$= \frac{1}{2} m(\overset{\circ}{x}_1^{\,2} + \overset{\circ}{x}_2^{\,2} + \overset{\circ}{x}_3^{\,2}) - V(x_1, x_2, x_3)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \overset{\circ}{x}_i} = m\overset{\circ}{x}_i = p_i \qquad , \qquad \frac{\partial L}{\partial x_i} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \overset{\circ}{x}_i}\right) - \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0 \qquad , \qquad i = 1,2,3$$

.

.

.

مختصات تعمیم یافته

اگر منظومه شامل **N** ذره باشد **3N** مختصات دکارتی خواهد داشت

اما ممکن استعداد درجه های آزادی سیستم کمتر از این و مثلاً برابر با **n** باشد به طوری که :

$$\boxed{n \leq 3N}$$

در این صورت مختصات دیگری به نام **n** می توانیم پیدا کنیم که آنها را **q1,q2,q3,…,qn** نوشته و مختصات تعمیم یافته می نامیم

پس از این تغیرات مختصات بدیهی است که عبارت های T و V و L نیزتغیر می کند به طوری که می توان نوشت:

$$\overset{\circ}{q} = \frac{dq_j}{dt} \qquad \text{با} \qquad T = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\alpha_{jk}\,\overset{\circ}{q}_j\,\overset{\circ}{q}_k$$

$$L(q_j, \overset{\circ}{q}_j) = T(q_j, \overset{\circ}{q}_j) - V(q_j)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \overset{\circ}{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \qquad , \qquad j = 1,2,3,\ldots,n$$

.

.

.

تابع هامیلتون

$$p = \frac{\partial L}{\partial \overset{\circ}{q}_j} = \frac{\partial T}{\partial q_j}$$

$$H(q_j, p_j) = \sum_j p_j q_j - L$$

$$\sum_j p_j \overset{\circ}{q}_j = \sum_j \frac{\partial T}{\partial \overset{\circ}{q}_j} \overset{\circ}{q}_j = 2T$$

$$H(p_j, q_j) = 2T - L$$
$$= T + V = E$$

$$H(p_j, q_j) = E$$

$$\vec{F} = -\frac{k}{r^2}\vec{u}$$

$$V(r) = -\frac{k}{r}$$

روابط تبدیل $y = r\sin\varphi$ $x = r\cos\varphi$ که می دهد

$$\dot{y} = \dot{r}\sin\varphi + r\cos\varphi.\dot{\varphi} \quad \text{و} \quad \dot{x} = \dot{r}\cos\varphi - r\sin\varphi.\dot{\varphi}$$

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + \frac{K}{r}$$

$$P_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi} \qquad P_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$$

و چون $\frac{\partial L}{\partial r} = \frac{K}{r^2} + mr\,\overset{\circ}{\varphi}^2$ و $\frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\,\overset{\circ}{\varphi}) = 0$$

$$m\frac{d^2r}{dt^2} - mr\,\overset{\circ}{\varphi}^2 + \frac{k}{r^2} = 0$$

$$mr^2 \overset{\circ}{\varphi} = C$$

$$H = \frac{m}{2}(\overset{\circ}{r}^2 + r^2 \overset{\circ}{\varphi}^2) - \frac{k}{r}$$

$$\frac{m}{2}(\overset{\circ}{r}^2 + r^2 \overset{\circ}{\varphi}^2) - \frac{k}{r} = E$$

فصل دوم

پايه هاي مكانيك كوانتومي

مكانيک کوانتومي به کشف و بررسي:

- ماهيت دوگانه نور
- سيماي موجي و سيماي ذره اي فوتوني
- تعميم نظريه موج
- ذرات مادي به ويژه الکترون

مي پردازد.

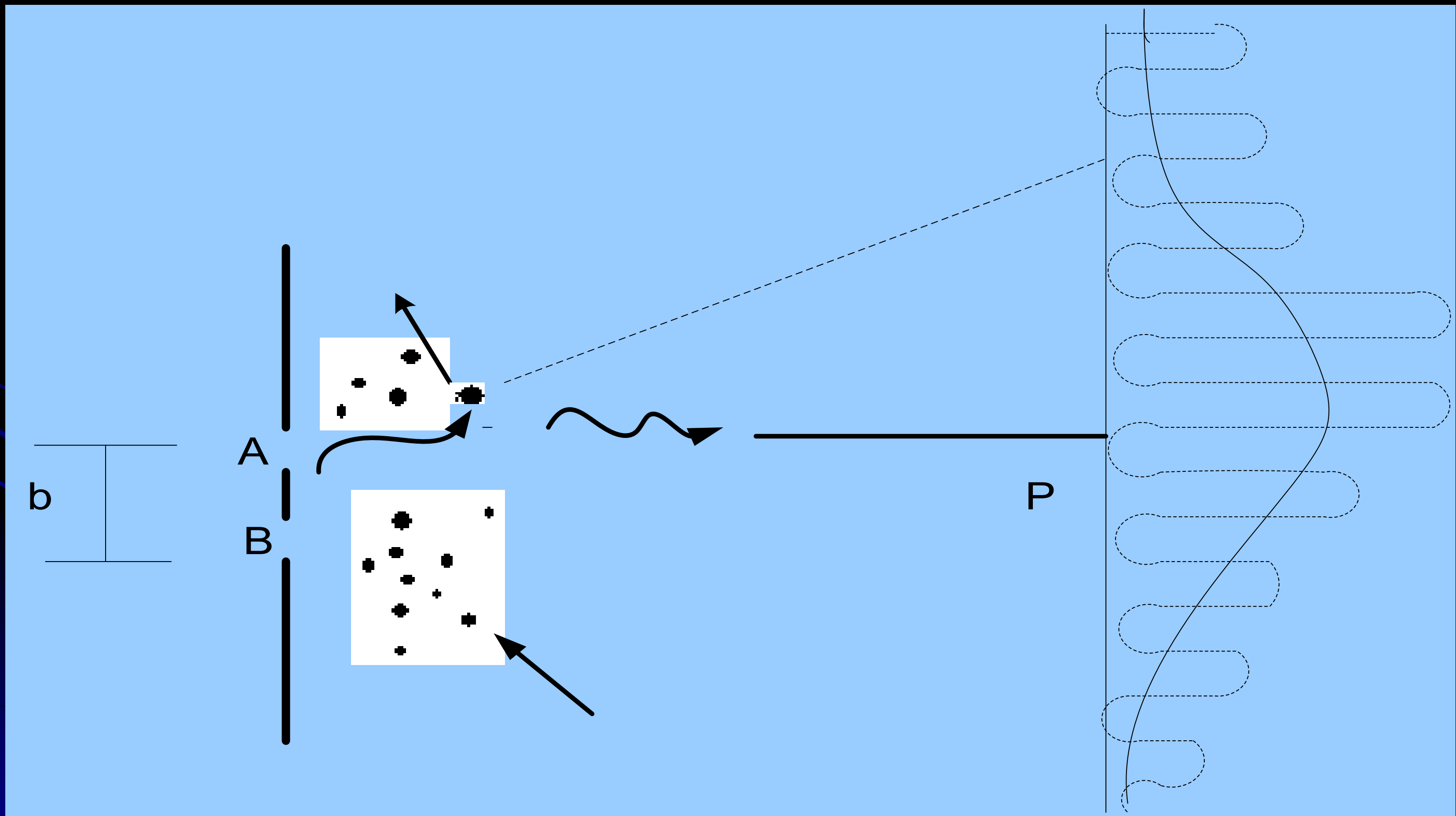
۱۹۰۵=ارائه نظريه نسبيت خاص و كشف اثر فوتوالكتريک ، اثر كامپتون و نظريه فوتوني نور

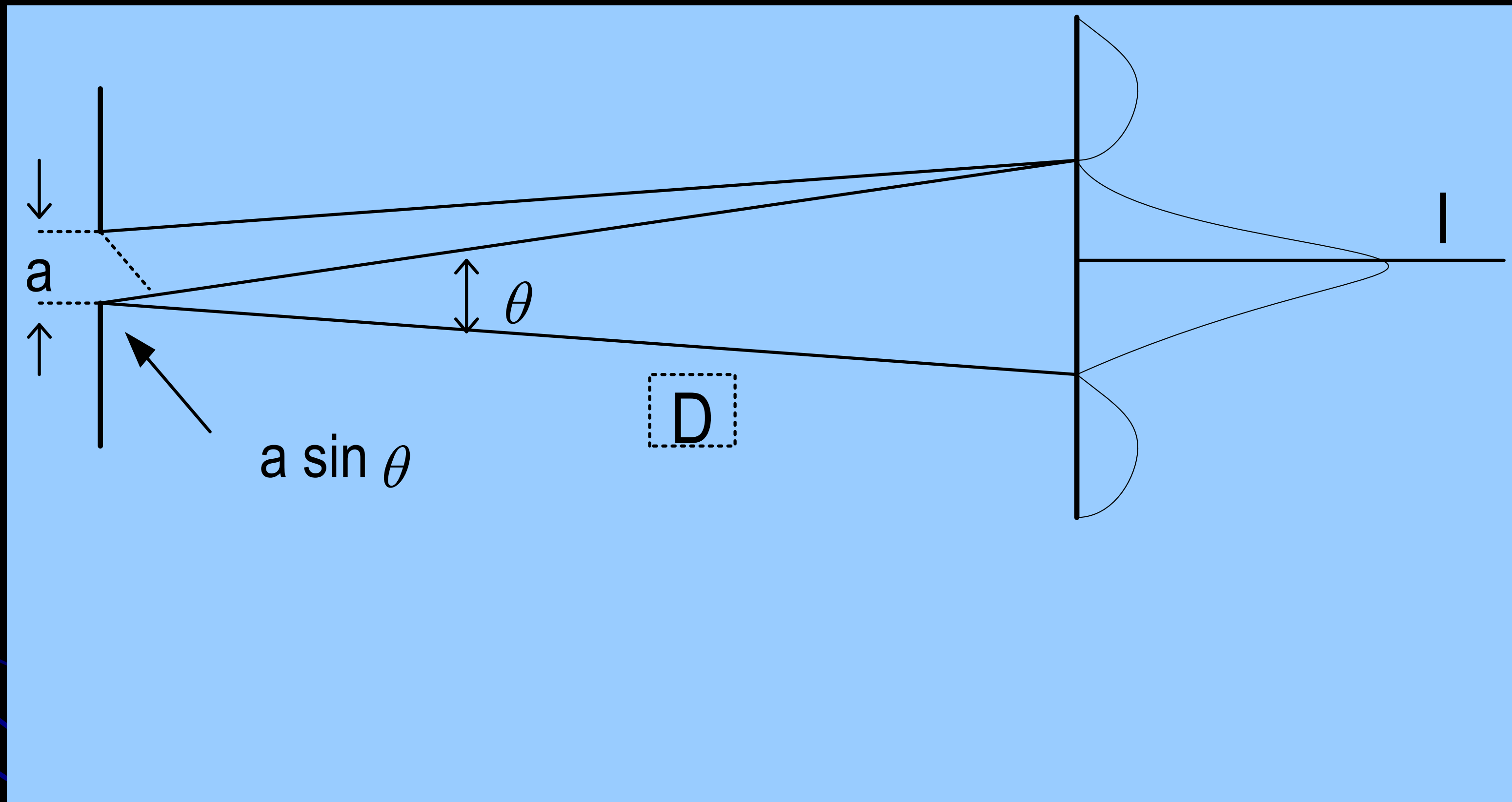
۱۹۲۳=پيدايش مكانيک موجي – كوانتومي

کارساز نبودن مکانیک کلاسیک در قلمرو ذره هاي بنيادي يا بطور کلي در قلمرو ريز

به جز حرکت   در فضايي بزرگ و بي مانع رفتار ذره وجود هر مسيرمعيني را رد مي کند.

آزمایش دو شکاف




a
a sin θ
θ
D
I

آزمايشهاي دقيق در دهه هاي اخير بيان كننده اين است كه الكترون و هر ذره بنيادي ديگر ، نه یک ذره به معناي متداول آن است و نه یک موج به معنايي كه در فيزیک كلاسیک براي آن قائل هستيم .

رابطه دوبروي

بر اساس نظريه فوتوني اينشتاين :

ذره اي به نام فوتون ، با جرم ساکن $m=0$ به یک پرتو

تکفام به فرکانس ν، که انرژي وتکانه آن به ν وسرعت

انتشار نور c وابسته است:

$$E = h\nu$$

$$P = \frac{h\nu}{c}$$

تعميم رابطه برقرار شده در مورد فوتون برای ساير ذرات

لويي دوبروي که الکترون را يک ذره با يک موج وابسته مي دانست با تکيه بر روابط نسبيتي رابطه بين طول موج اين موج وابسته و تکانه الکترون را به شکل زير اثبات کرد :

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{يا} \quad \lambda = \frac{h}{P}$$

کوچک بودن سرعت ذره نسبت به سرعت نور :

داشتن عبارت غير نسبيتي براي تکانه **P**

تکانه ذره در صورت نزديک بودن سرعت ذره به سرعت نور :

$$E^2 = m_o^{\,2} c^4 + c^2 p^2$$

$$P = \frac{\sqrt{E^2 - m_o^{\,2} c^4}}{c}$$

$$\lambda = \frac{ch}{\left(E^2 - m_o^{\,2} c^4\right)^{1/2}}$$

اصل عدم قطعیت یا اصل نامعيني

اصل عدم قطعیت : بیان کننده ارتباط مستقیم با جنبه احتمالاتي حرکت ذره ها و ارائه شده توسط ورنر هایزنبرگ

مشخص نبودن مسير براي هر ذره به معناي كلاسيك در قلمرو ريز به دليل اينكه ممكن نيست در هر لحظه t ، مكان و تكانه ذره را به دقت دلخواه تعيين كرد .

آزمايش پراش الكترون ها راهي براي اثبات عدم قطعيت

$$\Delta z = a = \frac{\lambda}{\sin\theta}$$

$$P = \frac{h}{\lambda}$$

و از اینجا

$$\Delta p_z = \frac{h\sin\theta}{\lambda}$$

بطوري كه

$$\Delta z.\Delta p_z = \frac{h\sin\theta}{\lambda} \times \frac{\lambda}{\sin\theta}$$

يا

$$\Delta z.\Delta p_z = h$$

$$\Delta z.\Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta z.\Delta p_z \geq \frac{\eta}{2} \text{ و } \Delta y.\Delta p_y \geq \frac{\eta}{2}; \Delta x.\Delta p_x \geq \frac{\eta}{2}$$

افزايش به دلخواه دقت يكي از مختصات ذره باعث كاهش شناخت مؤلفه مربوط به تكانه مي شود.

فصل سوم

اصول موضوعه مكانيک كوانتومي

تابع موجي يا تابع حالت

مبناي بحث:

- رابطه امواج الكترومغناطيسي (نور) با شدت نور و دامنه امواج

- دامنه ميدان متناوب الكتريكي يا مغناطيسي

شدت نور متناسب است با توان دوم دامنه موج

نکته: در نمودار تداخل چون شدت در هر نقطه با احتمال رسیدن ذرات به آن نقطه متناسب است ، دامنه هاي دو باریکه باهم جمع مي شوند نه شدت ها.

موج احتمال: موج وابسته به ذره - تابع $\phi(x,t)$

تابع (ϕ) : دامنه احتمال

تفسیر موج از دیدگاه ماکس بورن :

احتمال رسیدن ذره به نقطه را توان دوم ϕ نشان مي دهد نه خود ϕ .

اصل موضوع اول

تابع حالت وابسته : هر حالت فيزيكي قابل حصول سيستم تابعي به اين نام دارد كه شامل همه معلومات فيزيكي قابل دسترسي در آن حالت مي باشد.

تابع موجي (تابع حالت) : تابعي از مختصات مكاني ذره و زمان

$$\psi = \psi(x_i , t)$$

x_i نمايشگر تمامي مختصات مكاني

توان دوم تابع موجي در هر لحظه معين **t** ، تعيين كننده احتمال بودن ذره در موضع فضايي x_i

$$dP = |\psi|^2 dv$$

در حالت كلي : تابع حالت ممكن است حقيقي باشد يا موهومي .

توان دوم تابع حالت در واقع به صورت $\psi * \psi$ نوشته مي‌شود كه در آن

مزدوج مختلط است. ψ^* ψ

۱ . يک بعدي بودن حرکت ذره :

ψ فقط تابع دو متغير X و t است .

$$dP = |\psi|^2 dv$$

۲ . سه بعدي بودن حرکت ذره :

ψ تابعي از سه متغير فضايي و زمان خواهد بود که نماد آن

$\psi(x, y, z, t)$ است $\psi(\vec{r}, t)$

سه مختصه **x , y , z** بيان کننده مکان ذره

$$dP = \psi^2(x, y, z, t)\,dxdydz$$

$$dP = \psi^2(\vec{r}, t)\,d\vec{r}$$

۳ . منظومه اي مركب از دو يا چند ذره متحرك :

تابع ψ تابعي از مختصات تمامی ذره ها و زمان

$$dP = \psi^2\left(\vec{r_1}, \vec{r_2}, t\right)\overrightarrow{dr_1}\,\overrightarrow{dr_2}$$

شرايط مرزي و نرماليزه بودن تابع موجي

۱- تـــابع حالـــت از آنجـــا كـــه تـــابعي از متغيـــر هـــاي پيوســـته مكـــاني X يا X_i ت و توان دوم آن در هر نقطه فضاچگالي احتمال در آن نقطه را نشان مي دهد, لذا تابعي است پيوسته .

۲- اين تابع در هيچ نقطه اي به بي نهايت ميل نمي كند .

زيرا

احتمال بودن ذره در هر نقطه مقداري معين و كوچكتر از يک است.

بنابراين :

۳- تابع حالت بايد حتي در $\boxed{X=\infty}$ محدود و معين باشد .

۴- در يک لحظه معين در هر نقطه فضا بيش از يک مقدار نمي تواند داشته باشد .

نکته: از آنجا که دامنه احتمال همان تابع موجي است لذا داراي يک مقدار است . (تابع تک مقداري)

شرايط مرزي : محدوديت هاي قائل شده در حرکت ذره (يا سيستم)

$$dP = \left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx$$

شرط نرمالیزه

انتگرال زیر را شرط نرمالیزه تابع موج گویند .

$$P=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi(x,t)\right|^{2}dx=1$$

در حل مسائل كوانتومي

- بدست آمدن ردیفي نامتناهي از توابع همنوع
- انتخاب مجموعه اي كه حائز شرايط مرزي است .
- بدست آوردن C يعني محاسبه انتگرال و قرار دادن آن برابر ۱

نرمال كردن توابع موجي :

انتخاب مجموعه اي از بردارهاي همسو و هم جهت با طول واحد از بين مجموعه اي از بردارها .

اصل موضوع دوم (اپراتور ها)

اپراتور : يک نماد رياضي (نه يک کميت فيزيکي نه يک تابع) و بيان کننده يک عمل معين رياضي.

- موجوديت مستقل را نشان داده و خواص بسيار کلي را نمايان مي سازد

نوشتن تابعي به صورت ضرب معرف تاثير اپراتور بر روي تابع است.

خواص اپراتور ها

۱. نوشتن مجموع دو اپراتور $\hat{A}$ و $\hat{B}$ به صورت

$\hat{A}+\hat{B}$: تاثير جداي $\hat{A}$ و $\hat{B}$ بر روي توابع و

جمع كردن نتايج اين دو تاثير.

۲. نوشتن $\hat{A}\hat{B}$ به معناي حاصلضرب دو اپراتور :

تاثيرمتوالي آن دو عامل و نتيجه دو عمل رياضي پي در پي اين تاثير از راست به چپ است.

نكته : تعويض پذيري در ضرب دو عامل وجود ندارد.

نکته: هرگاه يکي از دو عامل یک اسکالر (عدد جبري)
باشد که اپراتور آن خود همان است ، نتیجه ضرب در واقع **a** برابر شدن است.

نماد اپراتور واحد : $\hat{1}$

اپراتور واحد معرف عدم تغییر است .

۳- توان از درجه **n** یک اپراتور : با تاثیر دو بار اپراتور

$\hat{A}$ بر روي تابع **f(x)** داريم ؛

$$\hat{A}.\hat{A}f(x) = \hat{A}^2 f(x)$$

$$\underbrace{\hat{A}\cdot\hat{A}\cdots\hat{A}}_{n} = \hat{A}^n$$

۴- وارون (معکوس) یک اپراتور :　　　　　　　　　　　وارون اپراتور $\hat{A}$

که $\hat{A}^{-1}$ نوشته مي شود ، نشانه عمل معکوس $\hat{A}$

است و از این رو با رابطه $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{1}$ تعریف مي شود .

اپراتور خطي

۱- هرگاه یک تابع **f(x)** و یک اسکالر **C** در نظر باشد :

$$\hat{A}\big(f(x)+g(x)\big)=\hat{A}f(x)+\hat{A}g(x)$$

۲- هر گاه دو تابع **f** و **g** در نظر باشد :

$$\int\left(\hat{A}^{*}f^{*}\right)g.dx=\int f^{*}.\left(\hat{A}g\right)dx$$

اپراتور هرميتيک

توابع موجود   در مکانيک کوانتومي اغلب توابع مختلط هستند و نه حقيقي .

اپراتورهـاي وارد در محاسـبات کوا ... ب موهـومي دارنـد و عـدد

$$i = \sqrt{-1}$$

نيز در عبارت   ديده مي شود.

كميت هاي فيزيكي كه مقاديري براي آنها به دست مي آيد لزوماً حقيقي اند .

دو تابع f(x) و g(x) در حالت عمومي مختلط است و اپراتور

$\hat{A}$ هرميتيک است اگر رابطه زير برقرار باشد :

$$\int \left(\hat{A}^* f^*\right) g \, dx = \int f^* \left(\hat{A} g\right) dx$$

اصل موضوع دوم

اصل دوم : به هر کميت فيزيکي مشاهده پذير يک اپراتور خطي و هرميتيک وابسته است به شرح زير :

(الف) به متغير هاي x ، y ، z يعني مختصات دکارتي

ذره, اپراتور هاي $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ يعني خود متغيرها نسبت داده مي شود.

(ب) به مؤلفه هاي دكارتي تكانه خطي ذره P_x , P_y و P_z

اپراتور هاي $\frac{\eta}{i}\hat{D}_x$ ، $\frac{\eta}{i}\hat{D}_y$ انه م $\frac{\eta}{i}\hat{D}_z$ سبت

به $\mathbf{x}$ ، $\mathbf{y}$ و $\mathbf{z}$ ضرب در $\frac{\eta}{i}$ هس , نسبت داده مى شود .

نماد آنها $\hat{P}_x$ و $\hat{P}_y$ اً خواه $\hat{P}_z$ د .

(ج) براي بدست آوردن اپراتور هاي وابسته به هر كميت

فيزيكي ديگر مانند تكانه زاويه اي ، انرژي جنبشي و غيره ،

در عبارت كلاسيک آن كميت بر حسب مختصات دكارتي ،

اپراتورهاي وابسته راطبق دستور (الف) و (ب) قرار مي دهيم

اپراتور انرژي پتانسيل

هر تابع يا كميتي كه در عبارت آن فقط خود مختصات باشد ، اپراتور وابسته به آن نشانه ضرب در خود آن تابع خواهد بود .

تابع پتانسيل(V): تابعي از ذرات مختصات ذره ، اپراتور

وابسته به آن $V(\vec{r})$ نوشته مي شود .

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

اپراتور انرژي جنبشي

$$T = \frac{1}{2m}\left(p^2{}_x + p^2{}_y + p^2{}_z\right)$$

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}^2{}_x + \hat{p}^2{}_y + \hat{p}^2{}_z\right)$$

$$\hat{p}^2{}_x = \hat{p}_x . \hat{p}_x = \frac{\eta}{i} D_x \left(\frac{\eta}{i} D_x\right) = -\frac{\eta^2}{i^2} \hat{D}^2{}_x$$

با توجه به اینکه $i^2 = -1$

$$\hat{p}^2{}_y = -\frac{\eta^2}{i^2}\hat{D}^2{}_y$$

$$\hat{p}^2{}_z = -\frac{\eta^2}{i^2}\hat{D}^2{}_z$$

$$\hat{T} = -\frac{\eta^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)$$

$$T = -\frac{\eta^2}{2m}\nabla^2$$

اپراتور هاميلتوني

$$\hat{H}\left(\hat{x}_i, \hat{p}_{x_i}\right) = -\frac{\eta^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) + \hat{V}(X,Y,Z)$$

تابع ویژه و مقدار ویژه یک اپراتور

تابع f تابع ویژه (یا ویژه تابع) اپراتور $\hat{A}$ است با مقدار ویژه (یا ویژه مقدار) a , اگر :

اپراتور $\hat{A}$ بر روي تابعي مانند f تاثير و نتيجه اين تاثير تابعي مانند af باشد که در آن a ضريب عددي (مثبت يا منفي) است .

مثال :

اپراتور $\hat{D}_X \equiv \frac{d}{dx}$ را در نظر گرفته ، وقتي روي تابع

$e^{\alpha x}$ اثر كند خواهيم داشت : $\hat{D}_X\left(e^{\alpha x}\right) = \alpha e^{\alpha x}$

بنابر اين داريم :

$e^{\alpha x}$ تابع ويژه $\hat{D}_X$ با مقدار ويژه α

α ممكن است مثبت ، حقيقي يا موهومي باشد .

خلاصه مطالب مهم درباره اپراتور ها

- اپراتور نماد يک عمل رياضي ، مانند ضرب ، مشتق گيري ،

انتگرال گيري است که به صورت ضرب در جلوي تابعي

که بر روي آن مي خواهد اثر کند نوشته مي شود.

- اپراتور ها را بين خود مي توان جمع ، تفريق ، ضرب كرد

اما قواعد مربوط به اعداد و توابع در اين عمليات ، درمورد

اپراتورها هميشه صدق نمي كند ؛ از جمله حاصلضرب دو

اپراتور درحالت كلي جابه جايي پذير نيست .

• گاه ضرب دو اپراتور جابه جا پذیر باشد, آن دواپراتور

را جا به جا شدني مي نامند . دراين صورت با ناميدن دو

اپراتور $\hat{B}$ و $\hat{A}$ مي توان نوشت :

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

- جا به جاي پذير نبودن $\hat{x}$ و $\hat{P}_x$ به دليل جا به جايي

پذير نبودن دو اپراتور $\hat{D}_X , \hat{x}$

- استفاده از تاثير اپراتورها بر يک تابع دلخواه براي يافتن

روابط بين اپراتور ها

- هر گاه از تاثیر یک اپراتور $\hat{A}$ (ساده یا مرکب)

بر یک تابع ، خود آن تابع ضرب در یک اسکالر **a** به

دست مي آید ، تابع مورد نظر تابع ویژه $\hat{A}$ و اسکالر

a مقدار ویژه مربوطه است .

مقدار قابل انتظار

در مكانيک كوانتومي اندازه گيري يک كميت مشاهده پذير ، مثلاً مختصه مكاني ، مقدار به خصوصي را براي آن كميت به دست دهد كه جنبه احتمالاتي پيدا مي كند .

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} xP\left(x,t\right)dx$$

دانستن خطاي اندازه گيري يا نامعيني در كنار مقدار ميانگين هر كميت

$$\left(\Delta x\right)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

اصل موضوع سوم

$\psi(r,t)$

مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر **a** در حالت

برابر است با :

$$\langle a \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi dv}{\int \psi^* \psi dv}$$

$$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dv$$

مثال :

محاسبه مقدار قابل انتظار X و P_x براي ذره در جعبه

يک بعدي

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x.e^{-iEt/\eta}$$

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2}{L}\sin\frac{n\pi}{L}x.e^{+iEt/\eta}.x\sin\frac{n\pi}{L}xe^{-iEt/\eta}dx$$

$$\langle x\rangle = \int_{0}^{L} \frac{2}{L}\sin^2\left[\frac{n\pi}{L}x\right].x.dx$$

$$\langle x\rangle = \int_{0}^{L} \frac{2}{L}x\sin^2\left[\frac{\pi}{L}x\right]dx$$

نتیجه

$$\langle x\rangle = \frac{L}{2}$$

مقدار قابل انتظار P_x

$$\langle p_x \rangle = \int_{\text{o}}^{L} \frac{2}{L}\sin\left[\frac{\pi}{L}x\right].\frac{\eta}{i}.\frac{d}{dx}\sin\left[\frac{\pi}{L}x\right]dx$$

$$= \frac{2\eta}{iL}\int \sin\left[\frac{\pi}{L}x\right].\frac{\pi}{L}\cos\left[\frac{\pi}{L}x\right]dx$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{2\eta}{2iL}\left[\sin^2\left[\frac{\pi}{L}x\right]\right]_{\text{o}}^{L} = 0$$

اصل موضوع چهارم
معادله شرودینگر

از ديدگاه مكانيک كوانتومي ؛

معادله حركت : معادله تعيين كننده تحول سيستم به وسيله تغيير و تحول تابع حالت كه از معادله شرودينگر الهام گرفته از تابع هاميلتون و اصل بقاي انرژي در سيستم منزوي ($T+V=E$) است.

$$\hat{H}\psi(x,t) = i\eta\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial X^2} + V(X,t).\psi = i\eta\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] + V(x,y,z,t).\psi = i\eta\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

اصل چهارم :

جوابهاي واجد شرايط تحميل شده بر تابع حالت ،   جواب هاي مورد قبول در معادله شرودينگر هستند.

تجزيه معادله شرودينگر تابع زمان

اولين مرحله در حل معادلات ديفرانسيل با مشتقات جزيـي ؛ جداسازي متغير ها از يكديگر

كنسرواتيو (پايستار): پتانسيل ها ي V مستقل از تغييرات زمان (و نيروي مشتق از اين پتانسيل ها)

شرط جداسازي متغیر ها :

۱. تابع پتانسیل به طور صریح تابع زمان نباشد (دیده نشدن متغیر t در عبارت آن)

۲. پتانسیل V تابع زمان نباشد (مستقل بودن مقدار آن در هر نقطه ي فضا از گذشت زمان)

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x).\psi=i\eta\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}.\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)=i\eta\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E.\psi(x)$$

$$i\eta\,\frac{d\,\phi(t)}{\phi(t).dt}=E$$

$$\frac{d\phi(t)}{\phi(t)}=\frac{E}{i\eta}dt$$

معادله شرودینگر مستقل از زمان

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \quad \text{و} \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H}\,\psi(r,t) = i\hbar\,\frac{\partial\,\psi(r,t)}{\partial t}$$

$$\hat{H}\left[\psi(r)\phi(t)\right] = i\eta.\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi(r)\phi(t)\right]$$

$$\hat{H}\,\psi(r) = E\,\psi(r)$$

$$\frac{d\,\phi(t)}{\phi(t)} = -\frac{iE}{\eta}\,dt$$

شرايط آغازي چيست ؟

وارد كردن ثابت ها يي در حل هر معادله ديفرانسيل

مشخص نبودن جوابها مگر دادن ثابت هاي داده اي

مشخص کردن ثابت ها از روي شرايط آغازي حرکت يا وضع کوانتومي آغازي سيستم در معادلات ديفرانسيل حرکت(در مکانيک کلاسيکي و مکانيک کوانتومي)

شرایط مرزي و آغازي :

انتخاب جواب هاي كامل و واجد الشرايط فيزيكي با بدست آوردن سه ثابت انتگرال گيري معين با دانستن مقدار تابع در دو مكان x (يا r) و مقدار تابع در لحظه اي معين مثلاً (t=0)

فصل ۴

مطالعه چند الگوي كوانتومي ساده

ذره آزاد

ذره اي است كه تحت تاثير هيچ نيرويي نباشد

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^{\,2}}{2m}, \psi = \psi\left(x\right), V(x) = 0$$

$$\hat{P}_x = \frac{\eta}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+0=E\psi(x)$$

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\eta^2}}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0$$

$$\psi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}$$

حالت هاي مخصوص :

۱. حالت $C_2 = 0$

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx}$$

$$\psi(x,t) = C_1 e^{ikx} . e^{-Et/\eta}$$

$$= C_1 e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$$

۲. حالت $C_1 = 0$ و $\psi(x) = C_2 e^{-ikx}$

$$C_2 = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

$$\langle P_x \rangle = -\sqrt{2mE}$$

بسته موج : مجموعه اي از رديف هاي پيوسته اي از   k (یا p)

نوشتن تابع موجي كه به صورت بسته ي موج است به شكل انتگرال فوريه

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}C(k)e^{ikx}\,dk$$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}C(k)e^{i(kx-wt)}\,dk$$

نمودار تغییرات چگالي احتمال موضعي براي يک بسته موج

مشخصه بيان كننده ي جايگزين پذير بودن ذرات:

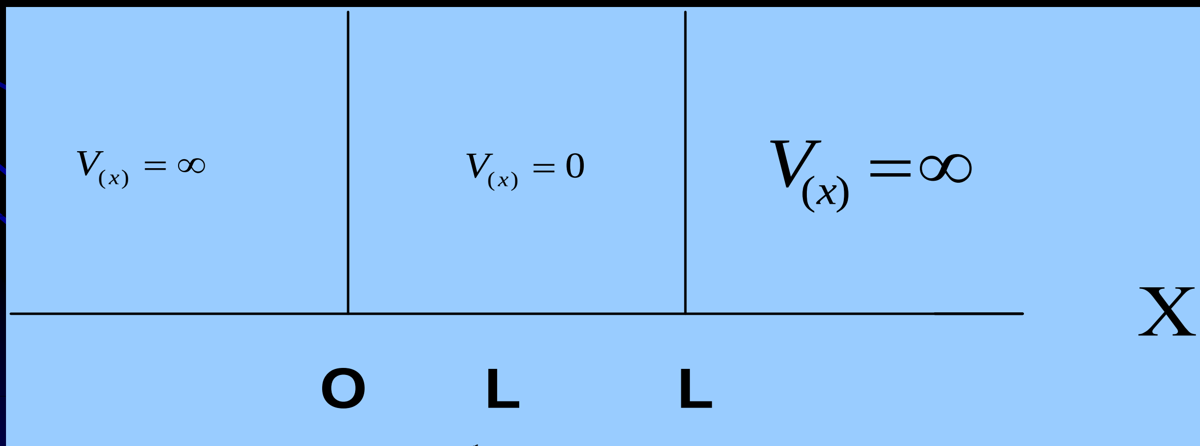
دانسيته ي احتمال موضعي در یک لحظه ي معين مثلاً $t=0$ نقطه ي بيشينه نشان مي دهد و در نقاط ديگر مقدار اندكي خواهد بود.

ذره در جعبه يک بعدي

$$-\infty \langle x \langle 0 \qquad V=\infty$$

$$0 \langle x \langle L \qquad V=0$$

$$L \langle x \langle +\infty \qquad V=\infty$$



ذره پتانسیل ثابت یک بعدی

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\eta}\psi = 0$$

اگر $\frac{2mE}{\eta^2}$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0$$

$$\psi(x) = A\sin\alpha x + B\cos\alpha x$$

به دليل پيوسته بودن تابع موجي ، شرايط مرزي

ايجاب مي كند كه در **X=0** و **X=L** تابع $\psi(x)$

صفر بشود .

در **x=0** $0 = A\times 0 + B$ پس **B=0** و فقط جمله

سينوس مي ماند.

در **x=L** $0 = A\sin\alpha L$ و اين شرط مي گويد كه

زاويه αL بايد مضرب صحيحي از π باشد .

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 n^2 \eta^2}{2mL^2}$$

شکل

نرمال كردن توابع موجي

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{*}(x,t)\,\psi(x,t)\,dx = 1$$

$$\int_{0}^{L} \psi^{2}(x)\,dx = \int_{0}^{L} A^{2}\sin^{2}\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x.e^{-iEnt/\eta}$$

به دليل بسيار بزرگ بودن مقادير انرژي پتانسيل در طبيعت الگوي ذره در جعبه، يک الگوي ايده آل است.

با وجود بزرگي زياد مقادير انرژِي پتانسيل در طبيعت هرگز بي نهايت نمي شود.

اهميت الگوي ذره و نتايج آن :

- مناسب براي تخمين انرژي
- مناسب براي درک رفتار ذره
- مناسب حالت ذره

ذره در جعبه سه بعدي

$$0 \langle x \langle L_1$$

$$V(x, y, z) = 0$$

$$0 \langle y \langle L_2$$

$$0 \langle z \langle L_3$$

$$\nabla^2 \psi(x, y, z) + \frac{2m}{\eta^2} E \psi(x, y, z) = 0$$

$$\psi(x, y, z) = X(x).Y(y).Z(z)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 X}{dx^2}.Y.Z; \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = X.Z.\frac{d^2 Y}{dy^2}; \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = X.Y.\frac{d^2 Z}{dz^2}$$

$$\frac{d^2 X}{dx^2} YZ + XZ \frac{d^2 Y}{dy^2} + XY \frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{2mE}{\eta^2} XYZ = 0$$

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy}+\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z}{dz^2}=-\frac{2m}{\eta^2}E$$

$$E=E_x+E_y+E_z$$

$$\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{2m}{\eta^2}E_xX(x)=0$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{2m}{\eta^2}E_yY(y)=0$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2}+\frac{2m}{\eta^2}E_zZ(z)=0$$

$$E_x=\frac{n_x^2\pi^2\eta^2}{2mL_1^2}\text{‘}X(x)=A\sin\left(\frac{n_x\pi}{L_1}x\right)$$

$$E_y = \frac{n_y^{\,2}\pi^2\eta^2}{2mL_2^{\,2}} \;;\; Y(y) = B\sin\left(\frac{n_y\pi}{L_2}y\right)$$

$$E_z = \frac{n_z^{\,2}\pi^2\eta^2}{2mL_3^{\,2}} \;;\; Z(z) = C\sin(\frac{n_z\pi}{L_3}z)$$

$$\psi(x,y,z) = ABC\sin(\frac{n_x\pi}{L_1}x)\sin(\frac{n_y\pi}{L_2}y)\sin(\frac{n_z\pi}{L_3}z)$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left[\frac{n_x^{\ 2}}{L_1^{\ 2}} + \frac{n_y^{\ 2}}{L_2^{\ 2}} + \frac{n_z^{\ 2}}{L_3^{\ 2}}\right]$$

حالت مخصوص

جعبه ي مکعبي :

$$L_1 = L_2 = L_3$$

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}(n_x^{\ 2} + n_y^{\ 2} + n_z^{\ 2})$$

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left[\frac{n_x \pi}{a}x\right]\sin\left[\frac{n_y \pi}{a}y\right]\sin\left[\frac{n_z \pi}{a}z\right]$$

جدول

نتايج مهم حاصل از الگوي ذره در جعبه ي سه بعدي

۱- مناسب بودن الگوي سه بعدي براي مطالعه تقريبي منظومه هاي سه بعدي به دليل فاكتور اصلي بودن بعد جعبه L يا a و سپس جرم ذره ي m در عبارت انرژي

۲- برابر بودن نتايج حاصل در مورد حد پيوستگي و نا پيوستگي و بزرگ و كوچک بودن فاصله ي بين تراز هاي انرژِي در الگوي يک بعدي و سه بعدي

۳- يکسان نبودن نمودار ترازهاي انرژي در الگوي سه بعدي و يک بعدي و ناتواني براي بيان فرمول ساده اي براي اين ترتيب ؛ وفشرده تر بودن ترازهاي انرژي .

۴- چند حالتي بودن تراز ها در صورت برابري دو يا هر سه بعد با هم .

۵- بیشتر بودن تعداد حالات از تعداد ترازها در یک گستره معین انرژي .

بازگشت به خواص اپراتورها

$$\psi_2(x) = A\frac{\sin 2\pi}{L}x, \psi_1(x) = A\sin\frac{\pi}{L}x$$

$$I = \int_o^L \psi_1^*(x).\psi_2(x)dx$$

$$I = \int_o^L A^2 \sin\left[\frac{\pi}{L}x\right] \times \sin\left[\frac{2\pi}{L}x\right]dx$$

$$= A^2\int_o^L \sin\left[\frac{\pi}{L}x\right] \times 2\sin\left[\frac{\pi}{L}x\right]\cos\left[\frac{\pi}{L}x\right]dx$$

$$\frac{\pi}{L}\cos\left[\frac{\pi}{L}x\right]dx = \frac{d}{dx}\left[\sin\frac{\pi}{L}x\right]$$

$$I = A^2\int_0^L 2\frac{L}{\pi}\sin^2\left[\frac{\pi}{L}x\right]d\left[\sin\frac{\pi}{L}x\right]$$

$$= \frac{2A^2L}{\pi}\left[\frac{1}{3}\sin^3\left[\frac{\pi}{L}x\right]\right]_0^L = 0$$

$$\int_0^L \psi_i^*(x).\psi_j(x)dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_i^*.\psi_j dV=0$$ وقتي $i \neq j$ باشد .

$=1$ وقتي $i = j$ باشد .

نتیجه :

تشكيل مجموعه اي نرمال شده و متعامد (ارتونرمال) از توابع ويژه قابل قبول اپراتور $\hat{H}$

نوسانگر هارمونیک

اهمیت الگوي ساده هارمونیک در فیزیک و شیمي کوانتومي که رهگشاي مطالعه حرکت اتمها در مولکول نسبت به یکدیگر و بررسي طیف ارتعاشي مولکولها ست.

$$f = -kx$$

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$L(x,\dot{x}) = T - V$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$$

$$x = x_{o}\cos(2\pi\nu t)$$

$$E = \frac{1}{2}m\omega^{2}x_{o}^{2}\sin^{2}\omega t + \frac{1}{2}kx_{o}^{2}\cos^{2}\omega t$$

$$\omega^{2} = \frac{k}{m}$$

ديدگاه كوانتومي

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$v = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\hat{H}[\hat{x}, \hat{p}_x] = -\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

$$-\frac{\eta^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2.\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{d\xi}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \sqrt{\alpha} \cdot \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \alpha\,\frac{d^2\psi}{d\xi^2}$$

شکل

$$-\alpha \frac{h^2}{2m}\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}+\frac{1}{2}k\frac{\xi^2}{\alpha}\psi(\xi)=E\psi(\xi)$$

$$-\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}+\xi^2\psi(\xi)=\frac{2m}{\alpha\eta^2}E.\psi(\xi)$$

$$\frac{2m}{\alpha\eta^2}=\frac{2}{\eta}\sqrt{\frac{m}{k}}E$$

$$a=\frac{2}{\eta}\left(\frac{m}{k}\right)^{1/2}E$$

$$-\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}+\xi^2\psi(\xi)=a\psi$$

$$\psi(x)=H(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

معادله دیفرانسیل هرمیت :

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi}+(a-1)H(\xi)=0$$

حل معادله ديفرانسيل هرميت

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$$

براي **n=0**

$$H_o(\xi) = 1$$

براي **n=1**

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

براي **n=2**

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

براي **n=3**

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

توابع ویژه نوسانگر هارمونیک

$$\psi_V(x) = N_V H_V\left(\sqrt{\alpha}X\right)e^{-\alpha x^2/2}$$

$$a = 2V + 1 = \frac{2E}{\eta}\sqrt{\frac{m}{k}}$$

$$E_V = \left[V + \frac{1}{2}\right]\eta\omega_{\text{o}}$$

$$\omega_{\text{o}} = \sqrt{\frac{k}{m}}, V = 0,1,2,...$$

نمودار تراز انرژي نوسانگر هارمونيک

۱- انرژي نقطه صفر كه مستقل از دما و قابل حفظ در دماي صفر مطلق و برابر مقدار $\frac{1}{2}h\nu_{\text{o}}$ به ازاي **V=0** است .

۲- مقدار ثابت بودن اختلاف دو به دوي انرژي حالتها

شکل

مقادير قابل انتظار انرژي ، مكان و تكانه

$$\langle X \rangle_V = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_V^*(x).x.\psi_V(x)dx$$

$$\langle P_x \rangle_V = \frac{\eta}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_V^*(x).\frac{d}{dx}\psi_V(x)dx$$

با حقيقي بودن بعضي توابع مي توان علامت مزدوج را برداشت .

پاريته X فرد است .

فرد بودن انتگرال تابع

$$\langle P_x \rangle_V = \frac{\eta}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_V^{*}(x) . \frac{d}{dx} \psi_V (x) dx$$

با متفاوت بودن هر مقدار ازپاریته

$$\psi_v (X)$$

نتیجه : صفر بودن انتگرال در تمامي حالات و

$$\langle X \rangle_V = 0$$

$$\langle P_x \rangle v = 0$$

محاسبه $\Delta p_x , \Delta x$ در حالت $\psi_{\circ}$

$$\sqrt{\langle X^2 \rangle_{\circ}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\circ}^{*}(x).x^2.\psi_{\circ}(x)dx$$

$$\sqrt{\langle P_x^2 \rangle_{\circ}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\circ}^{*}(x) \times -\hbar^2 \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx$$

$$\langle X^2 \rangle_{\circ} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/2} e^{-\alpha x^2}.x^2 dx = \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/2} \times \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

$$\langle X^2 \rangle_o = \frac{1}{2\alpha} = \frac{\eta\omega_o}{2k}$$

$$\langle P_x^2 \rangle_o = +\eta^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/2} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} .\alpha(1-\alpha X^2) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} dx$$

$$= \alpha\eta^2 \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varepsilon x^2} .(1-\alpha X^2) dx$$

$$= \alpha\eta^2 \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/2} \left[\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} - \alpha \times \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}\right]$$

$$= \frac{\alpha}{2}\eta^2 = \frac{m\eta\omega}{2}$$

$$(\Delta x)_o = \left[\langle X^2\rangle_o - \langle X\rangle_o^2\right]^{1/2} = \left[\frac{1}{2\alpha}\right]^{1/2}$$

$$(\Delta P_x)_o = \left[\langle P_x^2\rangle_o - \langle P_x\rangle_o^2\right]^{1/2} = \eta\left[\frac{\alpha}{2}\right]^{1/2}$$

$$(\Delta X)_o(\Delta P_x)_o = \frac{\eta}{2}$$

حركت ارتعاشي مولكولها

ارتعاش مولكولي : حركت ارتعاشي اتمها در مولكول

الگوي فيزيكي اساسي براي اين مطالعه = مولكول دو اتمي

مراحل زير را در نظر داشته باشيد :

۱- تجزيه حركت مولكول به حركت انتقالي ، حركت چرخشي و حركت ارتعاشي (نوساني)

۲- اثبات حركت نوساني دو اتم با حركت نوساني يک جرم.

۳- استفاده   از نتایج حاصل در مورد نوسانگر هارمونیک ، براساس این فرض که حرکت ارتعاشي مولکول در تقریب اول ، نوسان هارمونیک است و تعیین حدود این تقریب .

تجزیه حرکت مولکول

شکل

$$X_2 - X_1 = r$$

$$m_1 x_1 + m_2 x_2 = 0$$

$$x_1 = \frac{-m_2 r}{m_1 + m_2}$$

$$x_2 = \frac{m_1 r}{m_1 + m_2}$$

$$T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)(\dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) + \frac{1}{2} m_1 \left[\dot{X} - \frac{m_2 \dot{r}}{m_1 + m_2} \right]^2 + \frac{1}{2} m_2 \left[\dot{X} + \frac{m_1 \dot{r}}{m_1 + m_2} \right]^2$$

$$T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) + \frac{1}{2}\left[\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right]^2 \dot{r}^2$$

$$m' = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

چرخنده صلب

جسم صلب : جسمي كه اجزاي آن نسبت به يكديگر در مواضع ثابتي قرار داشته باشند .

$$T = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m_o}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]$$

$$x^2 + y^2 = r^2 \quad ; \quad y = r\sin\phi \quad ; \quad x = r\cos\phi$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \phi}\cdot\frac{\partial \phi}{\partial y} \qquad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \phi}\cdot\frac{\partial \phi}{\partial x}$$

پس : $\phi = arctg\dfrac{y}{x}$ و یا $\dfrac{y}{x} = tg\phi$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1/x}{1 + y^2/x^2} = \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{r\cos\phi}{r^2} = \frac{\cos\phi}{r}$$

$\frac{x}{y} = \cot g\phi$ و یا $\phi = arcotg\frac{x}{y}$ پس:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-1/y}{1 + x^2/y^2} = \frac{-y}{x^2 + y^2} = \frac{-r\sin\phi}{r^2} = \frac{-\sin\phi}{r}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial \phi}\left(-\frac{\sin\phi}{r}.\frac{\partial}{\partial \phi}\right).\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-1}{r}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial \phi} + \sin\phi\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right)\frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial \phi}\left(\frac{\cos\phi}{r}.\frac{\partial}{\partial \phi}\right).\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{r}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial \phi} + \cos\phi\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right)\frac{\partial \phi}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{r^2}\left(\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{r^2}\left(-\cos\phi\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m_o r^2}\frac{d^2}{d\phi^2}$$

$$\frac{d^2\psi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\psi(\phi) = 0$$

$$\psi(\phi) = Ne^{im\phi}$$

N = ضریب نرمال شدگي

تابع موجي بايد تک مقدار باشد..

با تغییر ϕ به اندازه 2π داریم :

$$\psi(\phi)=\psi(\phi+2\pi)$$

$$Ne^{im\phi} = Ne^{im(\phi+2\pi)}$$

$$= Ne^{2\pi im} \times e^{im\phi}$$

$$e^{2\pi im} = \cos 2\pi m + i \sin 2\pi m$$

فرمول فوق جز با مقادیر صحیح **m** , برابر با ۱ نمي شود.

بدین ترتیب به **m** به عنوان یک عددکوانتومي مي توان مقادیر

$0,\pm1,\pm2,\pm3 \ldots.$ را نسبت داد .

تراز هاي انرژي چرخنده صلب دو بعدی

$$m^2 = \frac{2m_o r^2 E}{\eta^2}$$

$$E_m = \frac{m^2 \eta^2}{2m_o r^2}$$

$$E_m = \frac{m^2 \eta^2}{2I}$$

شكل

ترازهاي انرژي چرخنده صلب در صفحه .

نمايش حالت ها با دايره هاي كوچك

صفر = مقادير ويژه

حرکت چرخشي مولکول دو اتمي در صفحه ثابت

$$T = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m}$$

$$= \frac{1}{2} m_o r^2 \dot{\phi}^2 \left(\sin^2 \phi + \cos^2 \phi\right)$$

$$= \frac{1}{2} m_o r^2 \dot{\phi}^2 = \frac{1}{2} I \dot{\phi}^2$$

شکل

$$T = \frac{(px)_1^2 + (py)_1^2}{2m_1} + \frac{(p_x)_2^2 + (p_y)_2^2}{2m_2}$$

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \dot{\phi}^2$$

روابط بين انرژي و تكانه زاويه اي

$$\vec{L} = \vec{OM}_1 \times \vec{P}_1 + \vec{OM}_2 \times \vec{P}_2$$

$$L = r_1 m_1 r_1 \dot{\phi} + r_2 m_2 r_2 \dot{\phi} = (m_1 r_1^{\,2} + m_2 r_2^{\,2})\dot{\phi}$$

$$L = I\dot{\phi}$$

$$E = \frac{L^2}{2I}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$\hat{L}^2 = -\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$\hat{L} = \frac{\eta}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi$$

$$L^2 = m^2\eta^2$$

$$\hat{L}_z = \frac{\eta}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}_z\psi_m(\phi) = \frac{\eta}{i}\frac{d}{d\phi}\left(Ne^{im\varphi}\right)$$

$$= m\eta\left(Ne^{im\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_z \psi_m(\phi) = m\eta \psi_m(\phi)$$

$$L_z = m\eta$$

$$\hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = 0$$

$$\hat{H} \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{H} = 0$$

توابع ویژه دو اپراتور جابه جايي پذير به هر دو اپراتور تعلق دارند و یک دنباله کامل تشکيل مي دهند.

ويژگي مشترک دو توابع در پيامد جا به جايي پذير بودن دو اپرراتور : مشاهده پذير هاي فيزيکي وابسته به آنها بطور همزمان قابل شناخت اند .

فصل پنجم

حرکت در فضاي سه بعدي

تكانه زاويه اي

$$\vec{p} = m\vec{v}$$ با $$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$L_x = yp_z - zp_y$$

$$L_y = zp_x - xp_z$$

$$L_z = xp_y - yp_x$$

$$L^2 = L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2$$

اپراتور هاي وابسته به تكانه زاويه اي

$$\hat{L}_X = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{P}_y$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{P}_z$$

$$\hat{L}_x = \frac{\eta}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\eta}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\eta}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}^2_x + \hat{L}^2_y + \hat{L}^2_z$$

$$\hat{L}_x \hat{L}_y f = \left(\frac{\eta}{i}\right)^2 \left[\left(y\partial_z - z\partial_y\right)\left(z\partial_x - x\partial_z\right)\right] f$$

$$= -\eta^2 \left[y\partial_z \left(z\partial_x - x\partial_z\right) f - z\partial_y \left(z\partial_x - x\partial_z\right) f \right]$$

$$= -\eta^2 \left[yD_z \left(z\partial_x f - x\partial_z f\right) - z\partial_y \left(z\partial_x f - x\partial_z f\right) \right]$$

$$= -\eta^2 \left[y\partial_x f + yz\partial^2{}_{zx} f - yx\partial^2{}_{z^2} f - z^2\partial^2{}_{yx} f + zx\partial^2{}_{yz} f \right]$$

$$\left(\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x\right)f=-\eta^2\left(y\partial_x f-x\partial_y f\right)$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x=i\eta\hat{L}_z$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=i\eta\hat{L}_x$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z=i\eta\hat{L}_y$$

مفهوم فيزيكي جابه جا پذيري اپراتورها

جابه جايي پذير بودن اپراتورها گوياي اين واقعيت فيزيكي است كه كميت هاي وابسته به آنها بطور همزمان قابل شناخت اند .

به عبارت ديگر

مي توان به آنها همزمان مقادير معيني نسبت داد و اندازه گيري و تعيين همزمان آنها خالي از معنا نيست.

جابه جا يي پذير بودن اپراتور هاميلتوني $\hat{H}$ هم با $\hat{L}^2$

و $\hat{L}_z$ در چرخنده صلب .

عبارت $\hat{L}_z$ و $\hat{L}^2$ در مختصات قطبي (كروي)

$$x = r\sin\theta\cos\varphi$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi$$

$$y = r\cos\theta$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$tg\phi = \frac{y}{x}$$

$$\cos\theta = \frac{z}{\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2}}$$

$$2r\frac{\partial r}{\partial z} = 2z$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta \sin\phi$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta \cos\phi$$

$$\frac{\partial \left(tg\phi\right)}{\partial \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{x}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos \phi}{r \sin \theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-\sin \phi}{r \sin \theta}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r}.\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial\theta}.\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial\phi}.\frac{\partial\phi}{\partial x}$$

$$= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}.\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}.\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}.\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}.\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}_z = \frac{\eta}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \left(\sin^2\phi + \cos^2\phi\right)\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}_z = \frac{\eta}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r}.\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial\theta}.\frac{\partial\theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial\phi}.\frac{\partial\phi}{\partial z}$$

$$= \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + 0$$

$$\hat{L}_x = \frac{\eta}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot g\theta.\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\eta}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot g\theta.\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\eta}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}^2 = -\eta^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$\hat{L}^2$ توابع ویژه و مقادیر ویژه اپراتور

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\phi) = \beta\hbar^2 Y(\theta,\phi)$$

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\times\Phi(\phi)$$

$$\frac{\sin\theta}{\Theta} = \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \beta\sin^2\theta + \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = 0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\beta-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+m^2\Phi=0$$

$$m=0,\pm1,\pm2,\ldots\text{با}\qquad \Phi(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$$

θ حل معادله حاوي

معادله لژاندر

$$|x| \le 1 \qquad ، \sqrt{1-x^2} = \sin\theta$$

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{d\Theta}{dx} \cdot \frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d\Theta}{dx}$$

$$\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} = -\sin^2\theta \frac{d\Theta}{dx} = -\left(1-x^2\right)\frac{d\Theta}{dx}$$

$$L^2 = J(J+1)\eta^2$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

$$L^2 = J(J+1)\eta^2$$

$$E_{rot} = J(J+1)\frac{\eta^2}{2I}$$

$J = 0$	$E_o = 0$	$L = 0$	$L_z = 0$
$J = 1$	$E_1 = 2\dfrac{\eta^2}{2I}$	$L = \sqrt{2}\eta$	$L_z = -\eta, 0 + \eta$
$J = 2$	$E_2 = 6\dfrac{\eta^2}{2I}$	$L = \sqrt{6}\eta$	$L_z = -2\eta, -\eta, 0 + \eta + 2\eta$
$J = 3$	$E_3 = 12\dfrac{\eta^2}{2I}$	$L = \sqrt{12}\eta$	$L_z = -3\eta, \ldots, 0, \ldots. + 3\eta$
$J = 4$	$E_4 = 20\dfrac{\eta^2}{2I}$	$L = \sqrt{20}\eta$	$L_z = -4\eta, \ldots. 0, \ldots + 4\eta$

شکل

۱- به هر يک از ترازهاي انرژي با شماره J ، تعداد 2J+1 حالت وابسته است .

۲- اين حالتها به وسيله مؤلفه تکانه زاويه اي نسبت

به راستاي ، oz L_z از هم متمايز مي شوند .

۳- مؤلفه تکانه زاويه اي نسبت به oz ، L_z را عدد

کوانتومي m_J مشخص مي کند .

۴- جهت گيري بردار $\vec{L}$ را در فضا ، مؤلفه L_z را معلوم

مي سازد و جهت گيرهاي کاملاً معيني است .

۵- محدود بودن بیشترین تعداد مشاهده پذیر های فیزیکی برای چرخنده صلب بر سه کمیت:

- انرژی

- قدر مطلق تکانه زاویه ای

- مولفه تکانه زاویه ای L_z

فصل ششم

اتم هیدروژن

$$V(r) = -k\frac{Ze^2}{r}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial X_1} + \frac{\partial^2}{\partial Y_1} + \frac{\partial^2}{\partial Z_1}\right)$$

$$-\frac{\eta^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X_2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_2}\right) + V(r)$$

$$z = Z_2 - Z_1 \qquad y = Y_2 - Y_1 \qquad x = X_2 - X_1$$

مراحل تبديل اپراتور هاميلتوني و جداسازي حركت ها از نظر كوانتومي :

۱. نوشتن هاميلتوني برحسب مختصات مركز جرم بردار X ، Y ، Z و x ، y ، z (مؤلفه هاي $\vec{r}$)

۲. نشان دادن این که هاميلتوني سيستم به هاميلتوني حرکت مرکز جرم و هاميلتوني حرکت دور مرکز جرم (نسبت به مرکز جرم) تجزيه مي شود .

۳. تبديل هاميلتوني دوم از مختصات دکارتي **X , Y , Z** به مختصات قطبي**r** ، و θ ϕ

$$Z = \frac{m_1 Z_1 + m_2 Z_2}{m_1 + m_2}$$

$$Y = \frac{m_1 Y_1 + m_2 Y_2}{m_1 + m_2}$$

$$X = \frac{m_1 X_1 + m_2 X_2}{m_1 + m_2}$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2}\left[\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial X_1^2} + \frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial X_2^2} + \ldots\right] + V(r)$$

$$= -\frac{\eta^2}{2}\left[\frac{m_1}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{2}{(m_1+m_2)}\frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right.$$

$$\left. + \frac{m_2}{(m_1+m_2)}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{(m_1+m_2)}\frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] + V(r)$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2}\left[\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \left[\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right]\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \ldots \right] + V(r)$$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}-\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)}_{\mathrm{I}}\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\mathrm{II}}+V(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]-k\frac{Ze^2}{r}\right]\psi\left(x,y,z\right)=Ee\,\psi\left(x,y,z\right)$$

$$\nabla^2\psi(r,\theta,\phi)=\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi(r,\theta,\phi)$$

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \eta^2}\psi$$

$$\psi\left(r, \theta, \phi\right) = R\left(r\right) \cdot Y(\theta, \phi)$$

$$\hat{L}^2 Y_1^m\left(\theta, \phi\right) = 1(1+1)\eta^2 Y_1^m(\theta, \phi)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right] + \left[\frac{2\mu}{\eta^2}\left[Ee + k\frac{Ze^2}{r} \right] - \frac{1(1+1)}{r^2} \right] R\left(r\right) = 0$$

اعمال چند تغيير براي ساده تر شدن معادله با فرض $E\langle 0$

۱. وارد كردن متغير بي بعد $p = \alpha r$ با ضريب ثابت α

بطوري كه $\alpha^2 = -\frac{8\mu E}{\eta^2}$

۲. جاي دادن ثابت ديگر $\beta = \frac{2\mu e^2 .Z}{\alpha \eta^2}$ در معادله

۳. دادن مقدار ۱ به طور موقت به ضریب مربوط به واحد هاي الکترو مغناطیسي(ضریب قانون کولن)

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}+\left[\frac{\beta}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}\right]R(\rho)=0$$

نامگذاري حالتهاي کوانتومي اتم تک الکترون

اين نامگذاري در ارتباط با مقاديرعددکوانتومي **L** انجام پذيرفته است .

بستگي به **L** فرم توزيع فضايي دانسيته احتمال در دورتا دور هسته اتم ، در درجه اول بي تاثير بودن قسمت شعاعي توابع موجي ، يعني **R(r)** در تعيين فرم توزيع دانسيته .

طرز نمايش و تعبير فيزيكي اوربيتالهاي اتمي

۱- مطرح نبودن موضوع مدار و مسير معين در اين مدلها

۲- مطرح بودن احتمال حضور ذره (يا ذرات) در نقاط مختلف

منظور از نمايش اوربيتالها ، نمايش اين توزيع است تا تجسّمي از وضع حركت الكترون به دور هسته حاصل شود.

$$\frac{dq}{dv} = e\left|\psi\left(r,\theta,\phi\right)\right|^2$$

به دست آوردن توزيع بار در يكي از حالت ها :

۱. رسم تغييرات در یک راستاي معين يعني رسم تغييرات تابع ψ و $|\psi|^2$ بر حسب تغييرات r و ثابت نگه داشتن θ و ϕ

۲. بررسي و رسم ثابت تغييرات ψ و $|\psi|^2$ بر حسب θ

به ازاي r و ϕ در يک صفحه معين

۳. تعيين شكل فضايي منحني هاي حاصل در (۱) يا (۲) با

تغيير ϕ از 0 تا 2π

رسم تغييرات تابع توزيع شعاعي

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$$

شكل

سطوح تک دانسیته

$$\left|\psi\left(r,\theta,\phi\right)\right|^2 = a$$

کرانه هاي توزيع بار : **a** مقدار ثابت دانسيته بار (يا احتمال) است که به اختيار بر مي داريم اين سطوح را سطوح مرزي اربيتال نيز مي نامند .

بيان مقطع هايي از سطوح مرزي اربيتال در يكي از صفحه هاي xoy ، xoz يا yoz به وسيله رايانه در تاليفات جديد .

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_o)^2}\frac{2\pi^2\mu e^4 z^2}{n^2 h^2}$$

$$n = 1,2,3,\ldots,\infty \qquad , E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_o)^2}\frac{2\pi^2\mu e^4}{n^2 h^2}$$

$$E_H$$ يا $$E_1 = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_o)^2}\frac{2\pi^2\mu e^4}{h^2}$$

$$E_1 = -21.7 \times 10^{-19} J$$
$$= -13.56 eV$$

$$E_n = \frac{E_H}{n^2}$$

برداشت طیف اتم هیدروژن و منظومه هاي مشابه با دستگاهي با قدرت تفکیک بالا .

تشكيل اولين خط سري بالمر H_α در دو خط با مقياس

اعداد موجي به فاصله $0.365cm^{-1}$ از هم .

خط زرد سديم ، خط **D**، متشكل از دو خط به طول موج **589.5** و **588.99** نانومتر .

اين ساختار ظرفيت طيف را حمل بر چه اثري مي توان كرد ؟

اثبات مدل سياره اي بوهر بين تكانه زاويه اي الكترون و ممان مغناطيسي حاصل از دوران آن ذره به دور هسته .

تكانه زاويه اي

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

ممان مغناطيسي

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e}L_z$$

$$\mu = -\frac{e\hbar}{2m_e}\sqrt{l(l+1)}$$

$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m_e}m_l$$

تاثير نتايج آزمايش و دوتايي بودن خطوط طيفي در طيف هيدروژن ، در تكميل نظريه هاي مربوط به الكترون و ساختار الكتروني اتم .

همخوان نبودن نتايج آزمايشات با داده هاي مدل كوانتومي شرودينگر بر طبق تحقيقات س . گودسميت و ج. اولنبک از دانشگاه ليدن .

انتخاب فرضيه اي که الکترون يک نوع حرکت خودي و تکانه زاويه اي ذاتي دارد که ممان مغناطيسي ناشي از آن به نوبه خود کوانتومي شده است ، بطوري که مؤلفه آن در امتداد ميدان فقط دو مقدار کسب مي کند .

اسپين : حرکت و تکانه زاويه اي مربوط به آن را گويند.

در نتيجه :

وارد شدن عدد کوانتومي چهارمي وابسته به اسپين در توصيف حالتهاي الکتروني

که با عدد S نشان مي دهيم.

تعبير ساختار ظريف طيف ها و داده هاي اندازه گيري هاي مغناطيسي با وارد كردن اسپين

$S=\sqrt{s(s+1)}\hbar$ با $s=\frac{1}{2}$

$S_z=m_s\hbar$ با $m_s=\pm\frac{1}{2}$

$$\cos\theta = \frac{s_Z}{s}$$

$$= \frac{\pm\ m_s}{\sqrt{s(s+1)}} = \frac{\pm 1}{\sqrt{3}}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

$$\mu_Z = \pm\frac{e\eta}{4m}$$

$$s_Z = \pm\frac{\eta}{2}$$

$$\vec{\mu} = -g\frac{e}{2m}\vec{s}$$

$$\mu_z = \pm\mu_B = \pm\frac{e\hbar}{2m}\,(SI)$$

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{s}$$

$$J = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar$$

$$\hat{S}_Z \alpha(\sigma) = \frac{1}{2}\eta\alpha(\sigma)$$

$$\hat{S}_Z \beta(\sigma) = -\frac{1}{2}\eta\beta(\sigma)$$

$$\alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad \beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma^2 = 3\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\eta^2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\psi(x, y, z, \sigma) = \psi_1(x, y, z)\alpha(\sigma) + \psi_2(x, y, z)\beta(\sigma)$$

www.salampnu.com