محاضرات الكم وألأطياف

المرحله الرابعه

الفصل ألأول : كيمياء وميكانيك الكم

أ.د.كريم هنيكش حسن
قسم الكيمياء
كليه العلوم
جامعه ديالى

Quantum Chemistry and Spectroscopy

Semester one: Quantum mechanics

ملخص مفردات المرحلة الرابعة

الكيمياء الفيزياوية (كيمياء الكم والأطياف)

الفصل الاول: اهداف الكيمياء النظرية، الشكل الجزيئي والفعالية الكيمياوية.

الفصل الثاني: المسألة الحركية والطاقية للمنظومات (مراجعة الميكانيك التقليدي)

- مثال المهتز التوافقي المتشابه في الجهات الثلاثة.
- المهتز التوافقي المتشابه في الجهات الثلاثة موصوفا بالاحداثيات الكروية.
- قانون حفظ الزخم الزاوي.
- معادلات هاملتون للحركة.
- حل المسألة الحركية لجسمين متجاذبين متنقلين في الفراغ.

الفصل الثالث: نظرية الكم القديمة.

- تجربة بلانك حول اشعاع الجسم الاسود.
- الظاهرة الكهروضوئية وتفسير اينشتاين لها.
- نموذج بور-رذرفورد للشكل الذري.
- قواعد سومرفلد للتكمم.
- مسألة المهتز التوافقي ذي الاتجاه الواحد المكمم. حلها حسب سومرفلد(علاقتها بالحركة الاهتزازية للجزيئات).
- الحل المكمم لمسألة الدوار الصلد (علاقتها باطياف الاستدارة للجزيئات).
- الجزيئة ذات الذرتين في حالة الاهتزاز والاستدارة.

- الجسم في صندوق الجهد (الحـــل المكمـــم)، ، علاقـــة المســـالة بالمســـتويات الطاقيـــة للالكترونات.
- المسالة الحركية لذرة الهيدروجين وحلها غير المكمم.
- المسالة الحركية لذرة الهيدروجين وحلها المكمم حسب سومرفلد.

الفصل الرابع: ميكانيك الكم

- تجربة هايزنبرك المفترضة. عملية القياس وقانون اللادقة.
- تمثيل ديراك لميكانيك الكم.
- معادلة القيمة الذاتية. احتمالية القياس.
- قوس العامل ونتائج القياس للحالات العامة.
- الانحلال.
- تبادل العوامل.
- النظام المحافظ.
- المسالة الحركية للمهتز التوافقي ذي الاتجاه الواحد الحل المكمم بصورة دراك.
- مجال المتجهات، فضاءات هلبرت.
- وصف هايزنبرك لميكانيك الكم (ميكانيك المصفوفات).
- القيم الذاتية والمؤملة حسب ميكانيك المصفوفات.

الفصل الخامس: ميكانيك الموجة او وصف شرودنكر لميكانيك الكم.

- التكمم الناتج عن حل معادلة القيمة الذاتية.
- حل المسالة الحركية لذرة الهيدروجين باسلوب شرودنكر.
- معادلة شرودنكر الوقتية واللاوقتية لذرة الهيدروجين.
- المنظومات ذات الالكترونات المتعددة.
- الحلول التقريبية لمعادلة القيمة الذاتية بصيغة شرودنكر.
- نظرية التغيير. حل مسالة ذرة الهليوم بطريقة التغيير.
- نظرية التشويش.
- التشويش من الترتيب صفر.
- التشويش من الترتيب الاول.
- التشويش من الترتيب الثاني.
- نموذج هارتري للانظمة ذات الالكترونات المتعددة.

- الحركة المغزلية للالكترون.
- قانون باولي في التماثل العكسي للدالة الموجية.
- نظرية هارتري-فوك للانظمة ذات الالكترونات المتعددة.

الفصل السادس: حلول معادلة شرودنكر للمنظومات الجزيئية.

- تقريب بورن-اوبنهايمر.
- نظرية الاصرة التكافؤية.
- معالجة هايتلر-لوندون لجزيئة الهيدروجين.
- نظرية المدارات الجزيئية.
- ايون جزيئة الهيدروجين.
- جزيئة الهيدروجين. طاقات المدارات الجزيئية في جزيئة H_2 .
- التوزيع الفراغي للدالتين الموجيتين Ψ_a، Ψ_b في جزيئة الهيدروجين.
- HeH^+.
- نظرية هكل للمدارات الجزيئية.

<u>الاطياف الجزيئية:</u>

- الحالات الاستقرارية للجزيئات , الحالات الارضية والمتهيجة.
- منحنيات الطاقة الالكترونية-الاهتزازية للجزيئات في الحالة الارضية والمتهيجة.
- الانتقالات الالكترونية الطيفية. شكل الجزيئة وتغير الشكل الهندسي.
- اطياف الامتصاص الالكترونية.
- اطياف الانبعاث الالكترونية. الفلورة والفسفرة.
- مخطط يابلونسكي.
- الانتقالات الالكترونية في المركبات الحلقية.
- نظرية الطيف الالكتروني. التردد. شدد الامتصاص. الاستقطاب الطيفي.
- قانون بير-لامبرت.

- <u>اطياف الاهتزاز الجزيئية.</u>
- الجزيئة ذات الذرتين.
- الجزيئات ذات الذرات المتعددة , معادلة ويلسون.
- <u>اطياف الاستدارة للجزيئات</u> (الاطياف المايكروية)
- الانتقالات الاستدارية. والاستدارية-الاهتزازية-تطبيقات مختلفة.
- حزم بيرم المزدوجة.

- التوزيع الفراغي للدالتين الموجبتين ψ a و ψ b في جزيئة الهيدروجين .
- HeH^+
- نظرية هكل للمدارات الجزيئية .

الاطياف الجزيئية

- الحالات الاستقرارية للجزئيات ، الحالات الارضية والمتهيجة .
- منحنيات الطاقة الالكترونية – الاهتزازية للجزئيات في الحالة الارضية والمتهيجة .
- الانتقالات الالكترونية الطيفية ، شكل الجزئية وتغير الشكل الهندسي .
- اطياف الامتصاص الالكترونية .
- اطياف الانبعاث الالكترونية ، الفلورة والفسفرة .
- مخطط بابلونسكي .
- الانتقالات الالكترونية في المركبات الحلقية .
- نظرية الطيف الالكتروني ، التردد ، شدد الامتصاص ، الاستقطاب الطيفي .
- قانون بير – لامبرت .

اطياف الاهتزاز الجزيئية

- الجزئية ذات الذرتين .
- الجزئيات ذات الذرات المتعددة ، معادلة ويلسون .

اطياف الاستدارة للجزئيات (الاطياف المايكروية)

- الانتقالات الاستدارية ، والاستدارية – الاهتزازية – تطبيقات مختلفة .
- حزم بيرم المزدوجة .

اطياف الرنين المغناطيسي

- الرنين النوي المغناطيسي ، اسس نظرية وتطبيقاته .
- الرنين الالكتروني المغناطيسي ، اسس نظرية وتطبيقاته .
- اطياف التاين الضوئي الالكتروني .

مقدمه رياضيه وداله الجهد

Theoretical introduction and Potential function

Quantum chemistry — كيمياء الكم

تهدف الكيمياء النظرية مناقشة شكل وتفاعلات الأنظمة الكيميائية (ذرات أو جزيئات) وحساب قيم وخواص الفيزيائية تمامًا واستنتاجها بصورة مستقلة عن التجارب أو مقترنة بها.

من الممكن معالجة الشكل الهندسي للجزيئة بالحالة المستقرة أو لمجموعة من الجزيئات (الذرات) وذلك من خلال حساب أو معرفة المحتوى الطاقي لكل عند أبعاد مختلفة بين الذرات أي بدلالة الأبعاد المناسبة لإحداثيات الذرات (إحداثيات أطوال وزوايا الأواصر).

أي جزيئة مكونة من ذرتين A ، B يمكن رسم الطاقة الكلية لها بدلالة المتغير الهندسي الوحيد وهو البعد بين الذرتين

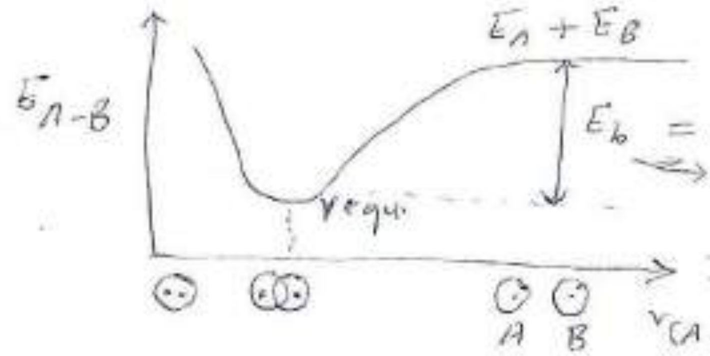
$$E_{AB} = f(r_{A-B})$$

E_{AB} الطاقة الكلية الجزيئية ، r = المسافة بين الذرتين

potential energy curve

Hypersurface energy curve

منحنى الطاقة = سطح الطوبي للطاقة



$E_b = E_{equ} - (E_A + E_B)$

الطاقة الإجمالية الكيميائية

$r_{(A-B)}$ المسافة بين الذرات

E_b : طاقة الرابطة الكيميائية = الفرق بين الطاقة للمنظومة في حالة التلاصق وفي حالة التباعد

$$E_{(A-B)} = \underbrace{E_{el-A} + E_{el-B}}_{\text{تجاذب}} + \underbrace{E_{el-el} + E_{A-B}}_{\text{تنافر}}$$

الكلية

(منحنى مورس)

P. M. Morse.

r_{eq} = البعد الذي تمتلك عنده الجزيئة أقل طاقة

$$E = D_{eq}\left[1 - \exp\{a(r_{eq} - r)\}\right]^2$$

a = constant for particular molecule

D_{eq} : طاقة التفكك

والآن ما نتوصل إليه عن طريق هو ايجاد علاقة تجريبية لطاقة الجزيئة ذات الذرتين من خلال العلاقة التجريبية استطاع وجد منحنيات الطاقة الكلية للجزيئات ذات الذرتين باستخدام المعادلات

$$E_{A-B} = E_b \left[e^{-2\beta (r - r_{equ})} - 2e^{-\beta (r - r_{equ})} \right] - E_A - E_B$$

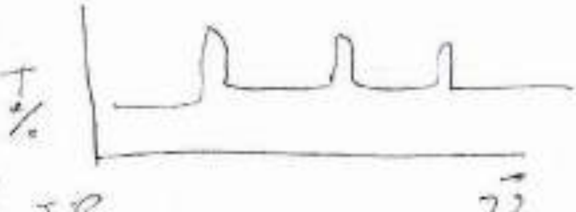
$$\beta^2 = \frac{-K}{2E_b}$$ K - ثابت القوة بين الذرتين

$$K = \frac{d^2 E_{A-B}}{d^2 r_{A-B}}$$

E_b معروف، r_{equ} X-ray، E_A , E_B معروفة، K ثابت القوة

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{K}{m}}$$ يمكن الحصول عليها

m - reduced mass $\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$



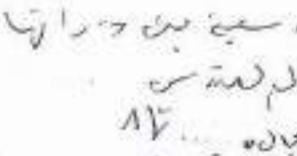
كذلك بالنسبة للجزيئات

polyatomic molecules

$$E_{tot} = f (r_1, r_2, r_3 \dots r_{3N})$$

~~~~ تزيد الطاقة الكلية بزيادة الابعاد لانه يعتمد على ذرات الطول وزوايا الروابط وحقيقة ابعاد هذه الجزيئات المعقدة

كيف تتم حساب الطاقة لجزيئة متعددة الذرات (مركز الحالة / العنصر / الحرة) (H_2O , CH_3 , NH_3)



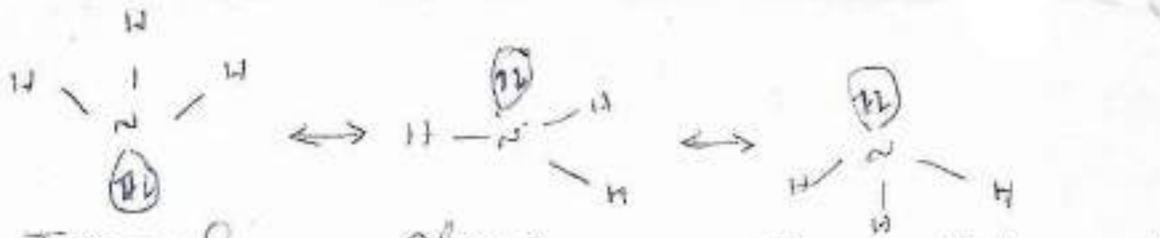
من احتمال الاحداثيات

$$E_{NH_3} = f (r, r_2 , \theta)$$

$r_{N-H} = 1 \, A^{\circ}$

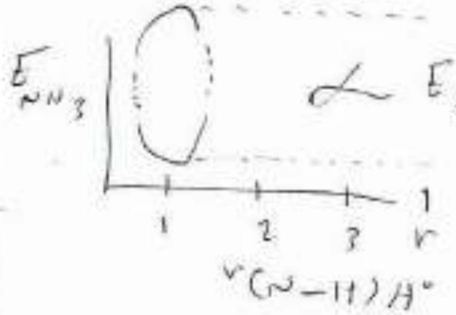
$\angle HNH = 106.7 = 107$

المعلومات المعروفة
~~~~

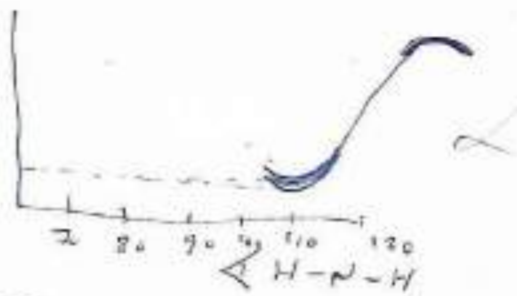


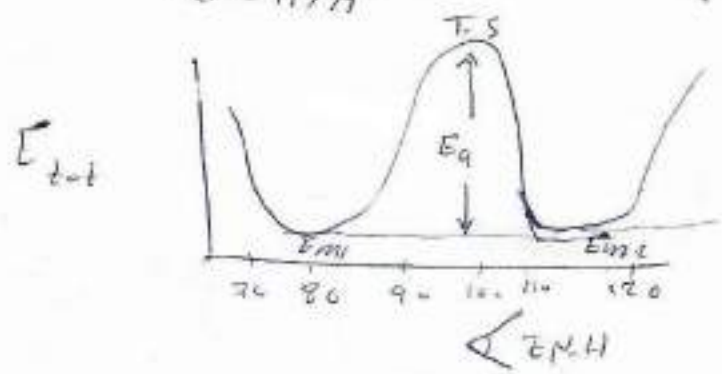
Trigonal pyramid — planar — Trigonal pyramid

I 1A° 70 — II 1A° 90 — III 1Å (180−70) 110°



$\propto$





E_{m1} ، أشكال مستقرة طاقياً وحرارياً

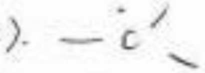
E_{m2} T.S - حالة انتقالية

شكل غير مستقر طاقياً وحرارياً

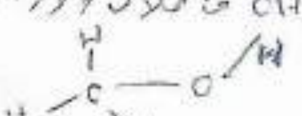
E_a طاقة التنشيط.

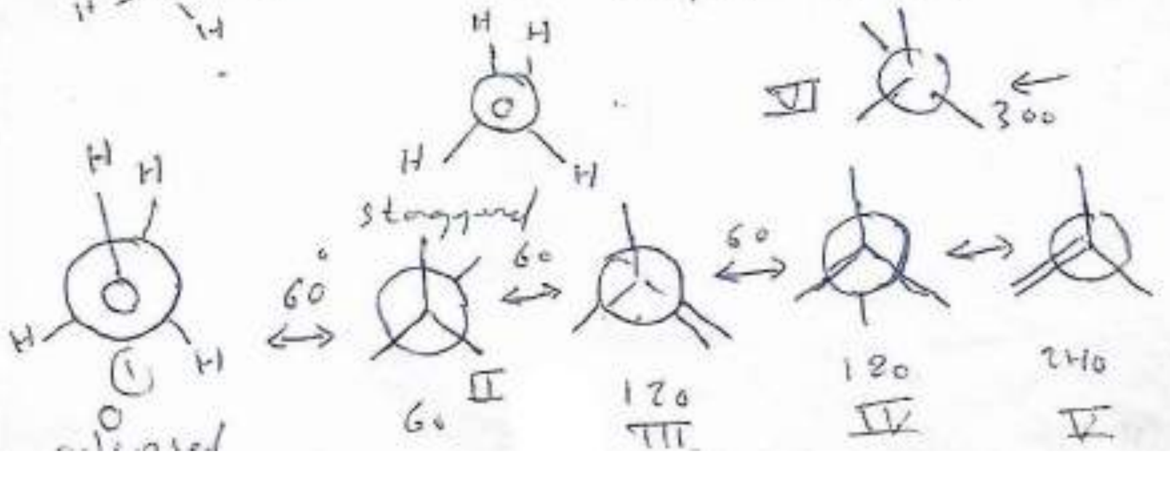
Home work $\bar{C}H_3$, $\dot{C}H_3$

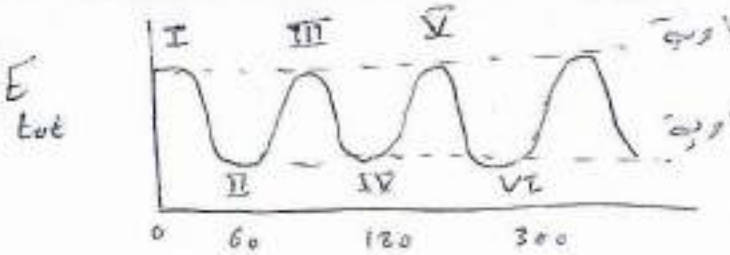
، الشكل المستقر لـ $\dot{C}H_3$ هو (plane).



1 مثال ارسم منحني الطاقة جزيئية لميثانول CH_3OH من خلال دوران الـ OH حول محور CO







$\emptyset$ (C-O) rotational

زاوية دوران الاصرة C-O حول الاصرة C O

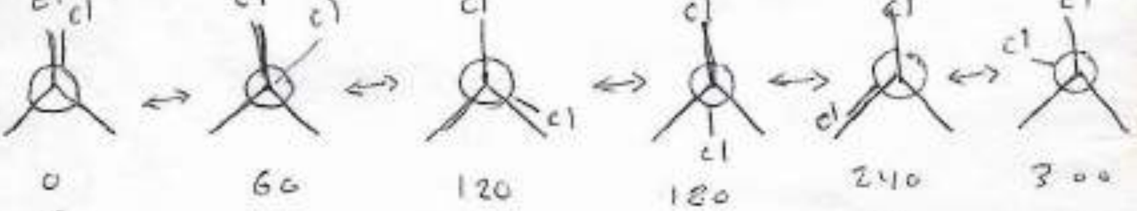
$E_1 = E_3 = E_5 > E_2 = E_4 = E_6$

Transition states unstable thermally and energitically — غير مستقرة

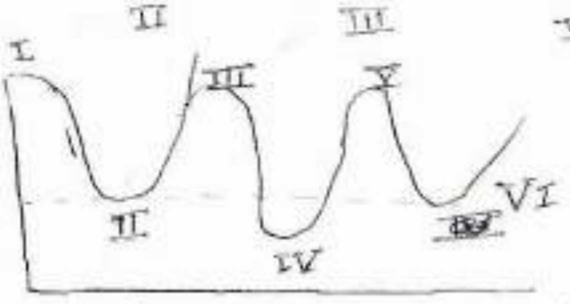
مستقرة حراريا وطاقيا

Home work. CH_3CH_2CN, CH_3CH_2Cl, CH_3CH_3

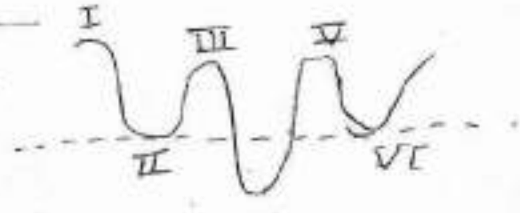
Cl CH_2CH_2 Cl حول



0	60	120	180	240	300
I	II	III	IV	V	VI



$E_I > E_{III} = E_V > E_{II} = E_{VI} > E_{IV}$



زاوية دوران الاصرة Cl-C حول الاصرة C-C

III, V الزاوية 120 بين Cl-Cl

II, VI الزاوية 60 بين Cl-Cl

IV أكثر استقرارا لأن Cl متباعدة

I أقل استقرارا Cl-Cl متطابقة

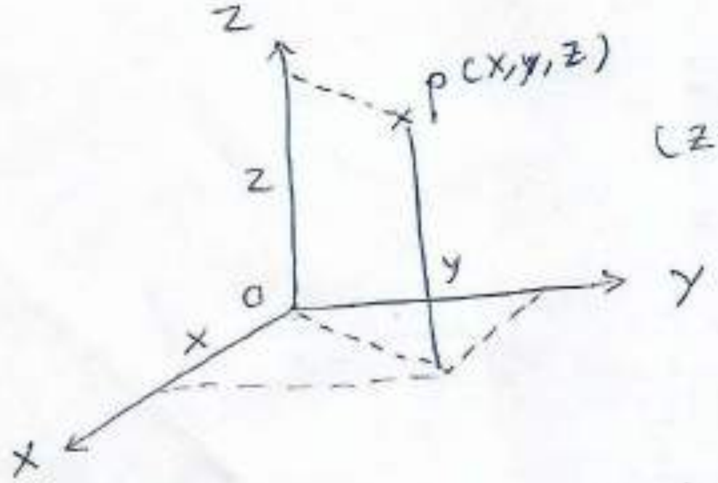
Theoretical Introduction

انواع الاحداثيات

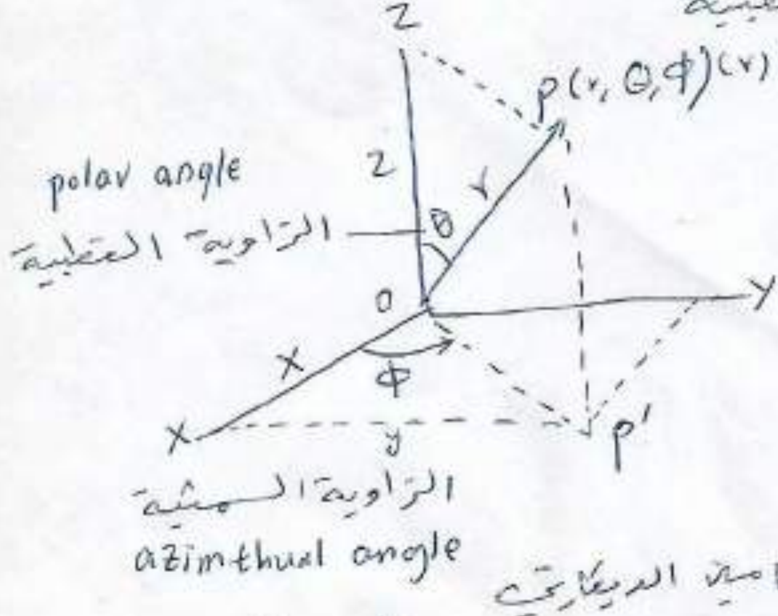
1- Cartesian coordinates
2- Spherical polar coordinates
3- Cylinderical coordinates
4- Confocal elipsoidal coordinates

الديكارتية - الكروية القطبية - الاسطوانية - السمتية

تمثل النقطة في (p) الفراغ بواسطة الاحداثيات (z، y، x)



الاحداثيات الكروية القطبية تمثل (p) بواسطة مسافة (r) وزاويتين (φ ، θ)



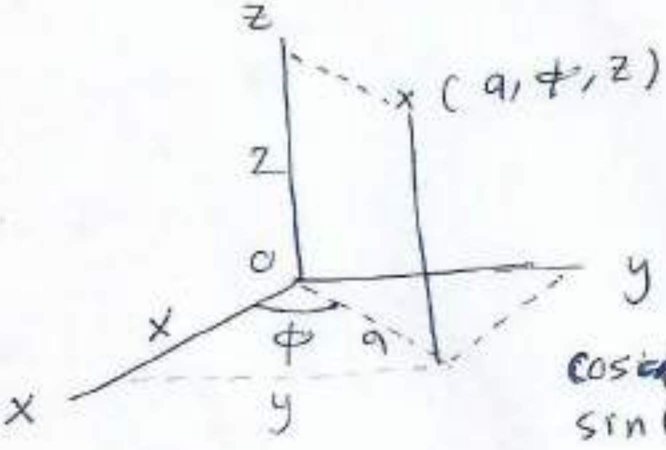
ان العلاقة بين النظامين الديكارتي والقطبي الكروي هي :-

$x = r \cdot \sin\theta \cos\phi$
$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$
$z = r \cdot \cos\theta$

$r \cdot \frac{op'}{r} \cdot \frac{x}{op'} = x$

$(r \cdot \frac{op'}{r} \cdot \frac{y}{op'}) = y$

في الإحداثيات الاسطوانية تحدد النقطة (p) بواسطة مسافتين وزاوية السابقتان هما (z) - وطول مسقط الخط OP في المستوى (x,y) أي (a)



$$x = a \cdot \cos\phi$$
$$y = a \cdot \sin\phi$$
$$z = z$$

$$\cos(\phi) = \frac{x}{a}$$
$$\sin(\phi) = \frac{y}{a}$$

$$x = a \cdot \cos\phi \qquad y = a \cdot \sin\phi$$

Integration limit $-\infty \leq (x, y, z) \leq +\infty$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x, y, z \qquad dx \cdot dy \cdot dz = d\tau$$

$$\int_0^{+\infty} r \int_0^{\pi} \theta \int_0^{2\pi} \phi \qquad r^2 \cdot \sin\theta \, dr \cdot d\theta \cdot d\phi = d\tau$$

$$\int_0^{\infty} a \int_0^{2\pi} \phi \int_{-\infty}^{+\infty} z \qquad a \cdot da \, d\phi \, dz = d\tau$$

الميكانيك الكلاسيكي

Classical mechanics

Classical Mechanics الميكانيك الكلاسيكي

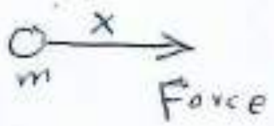
الانظمة المحافظة = النظام المحافظ هو النظام الذي يكون فيه حاصل جمع الطاقة الحركية والكامنة مساويا لـ كمية ثابتة وغير معتمدة على الزمن. ويكون فيه اشتقاق القوة من دالة الجهد

$$F = -\Delta V \qquad \Delta = \frac{d}{dx}$$

$$F_x = m \cdot \frac{d^2 x}{dt^2}$$

$$F_x = -\frac{dV(x)}{dx}$$

equall



$$-\frac{dV(x)}{dx} = m \cdot \frac{d^2 x}{dt^2} = m \cdot \frac{d\dot{x}}{dt}$$

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt}$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{d}{dt} \cdot \frac{dx}{dt} = \frac{d\dot{x}}{dt}$$

نضرب الطرفين × dx

$$-\frac{dV(x)}{dx} \cdot dx = m \cdot \frac{d\dot{x}}{dt} \cdot dx$$

$$-dV(x) = m \cdot d\dot{x} \cdot \frac{dx}{dt} = m \cdot \dot{x}\, d\dot{x}$$

تكامل

$$-\int dV(x) = m \int \dot{x}\, d\dot{x}$$

$$-V(x) + C = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

C ثابت التكامل

$$\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) = C$$

وهذا يبين ان مجموع الطاقة الكامنة والحركية هو ثابت ولا يعتمد على الزمن حيث لا يوجد في المعادلة.

x المسافة $\dot{x}$ السرعة $\ddot{x} = \frac{d}{dt} \cdot \frac{dx}{dt}$

$X_i = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}}$ $\quad T = F(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$

$x_i = -\frac{\partial V}{\partial x}$ $\quad V = F(x, y, z)$

$$X_i + x_i = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} + -\frac{\partial V}{\partial x} = 0$$

دالة لاكرانج

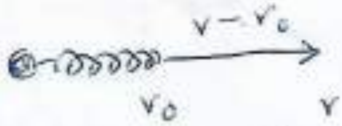
$$L = L(\dot{x}_1, \dot{y}_1, \dot{z}_1, \dot{x}_2, \dot{y}_2, \dot{z}_2 \ldots \dot{x}_n, \dot{y}_n, \dot{z}_n)$$

وحساب الطاقة الكلية بدلالة معادلة لاكرانج

$$L = T - V$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0}$$

حساب الطاقة الكلية للمهتز التوافقي بدلالة الاحداثيات الديكارتية في الجهات الثلاثة x، y، z



$\partial f \propto \Delta r$

$\partial f = c \cdot \Delta r$

$\partial f = c(r - r_0)$

$\partial f = c \cdot r$ very small

$\boxed{V = \frac{1}{2} c x^2}$ الطاقة الكامنة للمهتز

$\boxed{T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2}$

تشكل معادلة لاكرانج

$L = T - V = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} c x^2$

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} c x^2$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \left[m \dot{x} - 0 \right] + \left[0 + c x \right] = m \cdot \frac{d \dot{x}}{dt} + c x$$

$$m \ddot{x} + c x = 0 \longrightarrow m \ddot{x} = - c x$$

تتحول $\ddot{x}$ الى $\frac{d\dot{x}}{dt}$

$$m \cdot \frac{d \dot{x}}{dt} = - c x$$

نضرب الطرفين $\frac{dx}{dt}$

$$\frac{dx}{dt} \cdot m \cdot \frac{d \dot{x}}{dt} = - c x \cdot \frac{dx}{dt}$$

نضرب الطرفين في $\frac{1}{2}$

$$\dot{x} \cdot m \cdot \frac{d \dot{x}}{dt} = - c \cdot x \cdot \frac{dx}{dt}$$

$$\frac{1}{2} m \frac{d \dot{x}^2}{dt} = \frac{1}{2} c \cdot \frac{d x^2}{dt}$$

تكامل الطرفين

$$\frac{1}{2} m \ddot{x}^2 = \frac{1}{2} c x^2 + \text{constant}$$

$$e = \frac{1}{2} C X_0^2 = \text{constan}$$

$$C = 4 \pi^2 m \nu_0^2$$

التردد

$$2\pi \nu_0 \, dt = \frac{dx}{(\dot{x}_0^2 - x^2)^{1/2}} \xrightarrow{\text{تكامل}} 2\pi \nu_0 t + \delta x = \sin^{-1}(x/x_0$$

$$x = x_0 \sin(2\pi \nu_0 t) + \delta x$$

سؤال: - بحث حركة شحنة في مجال كهربائي موحد (ايجاد متغيرات الحركة) بدلالة الوقت، الازاحة، السرعة، الزخم، الطاقة الحركية والكامنة

T الطاقة الحركية

V الكامنة

$$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

$$V = -eFx$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + eFx$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} m\dot{x} = m\ddot{x}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 0 + \frac{\partial eFx}{\partial x}$$

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial x} = eF}$$

$$m\ddot{x} - eF = 0$$

$$\ddot{x} = \frac{eF}{m}$$

$$\frac{d\dot{x}}{dt} = \frac{eF}{m} \quad \text{نضرب بـ } \dot{x}$$

$$\dot{x} \cdot \frac{d\dot{x}}{dt} = \frac{eF}{m} \cdot \dot{x}$$

$$\dot{x}\,\frac{d\dot{x}}{dt} = \frac{eF}{m} \cdot \frac{dx}{dt}$$

$$\dot{x} \cdot d\dot{x} = \frac{eF}{m} \cdot dx$$

$$\int \dot{x}\, d\dot{x} = \frac{eF}{m}\int dx \quad \uparrow$$

(1) x الازاحة باتجاه x

e شحنة الـ e

F ثابت تزايدي

$$\frac{1}{2}\dot{x}^2 = \frac{eFx}{m} + c$$

نضرب بـ 2 x يكمل ↙

$$\dot{x}^2 = \frac{2eFx}{m}$$

$$\dot{x} = \sqrt{\frac{2eFx}{m}}$$

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2eFx}{m}}$$

$$x^{-\frac{1}{2}} dx = \sqrt{\frac{2eF}{m}} \cdot dt$$

تكامل ←

$$2x^{1/2} = \sqrt{\frac{2eF}{m}} \cdot t$$

$$x^{1/2} = \sqrt{\frac{2eF}{m}} \cdot \frac{1}{2} t$$

$$x = \frac{2eF}{m} \cdot \frac{1}{4} \cdot t^2$$

$$x = \frac{1}{2}\frac{eF}{m} \cdot t^2$$

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt}$$

$$\ddot{x} = \frac{d^2x}{dt}$$

(2)

$$x = \frac{2eF}{4m} t^2 = \boxed{\frac{1}{2} \cdot \frac{eF}{m} \cdot t^2}$$

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \boxed{\frac{eFt}{m}}$$

التعجيل غير معتمد على الزمن

$$\ddot{x} = \frac{d\dot{x}}{dt} = \boxed{\frac{eF}{m}}$$

القوة غير معتمدة على الزمن

Newton equation of motions

LAGRANGIAN FORM

في الإحداثيات الديكارتية نعرف السرعة و التعجيل

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} \qquad \ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d\dot{x}}{dt}$$

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt} \qquad \ddot{y} = \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{d\dot{y}}{dt}$$

$$\dot{z} = \frac{dz}{dt} \qquad \ddot{z} = \frac{d^2z}{dt^2} = \frac{d\dot{z}}{dt}$$

قانون نيوتن الثاني يربط القوة والكتلة والتعجيل

$$F_x = m\ddot{x}$$

$$F_y = m\ddot{y}$$

$$F_z = m\ddot{z}$$

مجموع الطاقة الكامنة و الحركية ثابت

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

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}$$

$$F_z = -\frac{\partial V}{\partial z}$$

for a system of n particles with masses m_i

$$T = \frac{1}{2} m_1 (\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \frac{1}{2} m_2 (\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{z}_2^2) + \cdots$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2)$$

من اعلاه يمكن ان نستنتج

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} + \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{y}_i} + \frac{\partial V}{\partial y_i} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{z}_i} + \frac{\partial V}{\partial z_i} = 0$$

$$L = L(x_i\, y_i\, z_i\, , \dot{x}_i\, \dot{y}_i\, \dot{z}_i)$$

$$= T - V$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} + \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}_i} + \frac{\partial L}{\partial y_i} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}_i} + \frac{\partial L}{\partial z_i} = 0$$

وذلك لان

$$\frac{\partial V}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial V}{\partial \dot{y}_i} = \frac{\partial V}{\partial \dot{z}_i}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\partial T}{\partial y_i} = \frac{\partial T}{\partial z_i}$$

اكتب معادلة حركة كتلة (m) تحت الجاذبية في اتجاه $\bar{z}$ (الارتفاع)
واكتب معادلة لاكرانج

$V = mgz$

(4)

الحل solution

$$F_x = m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{\partial (mgz)}{\partial x} = 0$$

$$F_y = m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y} = -\frac{\partial (mgz)}{\partial y} = 0$$

$$F_z = m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z} = -\frac{\partial (mgz)}{\partial z} = mg$$

So $\boxed{m\ddot{x} = 0 \qquad m\ddot{y} = 0 \qquad m\ddot{z} = mg}$

معادلات الحركة فقط عند الاتجاه z

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - mgz$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt}(m\dot{x}) - 0 = \boxed{m\ddot{x}} = 0$$

$= 0$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\right) - \frac{\partial L}{\partial y} = \frac{d}{dt}(m\dot{y}) - 0 = 0$$

$$\boxed{m\ddot{y} = 0}$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} - \frac{\partial L}{\partial z} = \frac{d}{dt}(m\dot{z}) - mg = 0$$

$$= m\ddot{z} - mg = 0$$

$$\boxed{m\ddot{z} = mg}$$

إن ما تم الحصول عليه هي نفس قيم
القوة في الحالتين

الداله الذاتيه والقيمه الذاتيه

Eigen Value and Eigen Function

Operators (المؤثرات (العوامل

(المؤثر هو رمز يأمرنا بعمل شيء على ما يتبعه)

$\sin x$ $\cos a$ $\tan(x+y)$

$\sqrt{5}$ $\frac{\partial}{\partial x}$ $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$

1- commute التبادل تميز بشيئ (٠) . معادلة المؤثر

2- linearity الخطية

$\acute{P} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_{yz}$ $\dot{Q} \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)_{xz}$

$$\acute{P}\dot{Q} = \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial y}\right)_{xz}\right]_{yz} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$$

$$\dot{Q}\acute{P} = \left[\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_{yz}\right]_{xz} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$$

متساويان

so $\acute{P}\dot{Q} = \dot{Q}\acute{P}$ → commute operators

$$p(f+g) = pf + pg$$

$$p(n \cdot f) = n \cdot pf$$

↓ (n) ثابتة

$\sqrt{3+4} \neq \sqrt{3} + \sqrt{4}$ غير خطي

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ ديكارتية

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

If $\Psi = 5 \cdot e^{8x}$ $\quad \hat{p} = (d/dx)$

prove that $E = (5)$

Vectors and scalars

Vectors

لها مقدار واتجاه مثل
القوة - التعجيل ، المجال
الكهربائي

$\vec{E}$

Scalars

لها كميات فقط

$26, (x^2 + 3x + 8)$

Eigen Value and Eigen function

$\hat{p} \cdot F = E \cdot F$ Eigen function

مؤثر دالة قيمة ذاتية دالة

Operator ايكن eigen value

قيمة ايكن

عندما يعمل مؤثر على دالة وان النتيجة ستكون ظهور نفس الدالة مضروبة بمقدار ثابت فتعرف هذه الدالة او المعادلة بمعادلة القيمة الذاتية

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ $x^4 \rightarrow 4x^3 \rightarrow 12x^2$ ✗

$\sin\theta \rightarrow \cos\theta \rightarrow -\sin\theta$ ✓

$\cos\theta \rightarrow -\sin\theta \rightarrow -\cos\theta$ ✓

$e^{\pm nx}$ $\sin nx$

$\hat{p} = \frac{\partial}{\partial x^2}$ $f = \sin nx$ الدالة ثابت ايكن

$\hat{p} f = n \cdot \cos nx \rightarrow -n^2 \sin nx = (-n^2) \sin nx$

$\frac{d}{dx}$ اذا كان العامل

$x^2 \rightarrow 2x$ ✗

$e^{nx} \rightarrow$ ذاتية ✓

$\cos x \rightarrow -\sin x$ غير ذاتية ✗

$\sin x \rightarrow \cos x$ غير ذاتية ✗

الدالة لا تعيد نفسها

show that the function $\Psi = 2e^{ax}$ where a is constant is an eigen function of the operator (d/dx) and calculate the eigen value.

$$\underbrace{\frac{d}{dx}}_{H}(\underbrace{2 \cdot e^{ax}}_{\Psi}) = 2a \cdot e^{ax} = \underbrace{a}_{E} \cdot \underbrace{2 \cdot e^{ax}}_{\Psi} = (a)\,\Psi$$

ثابت

١٠٨

Eigen value

Problems related to eigenvalue equations

1. Determine which of the following functions are eigenfunctions to the operator $\frac{d}{dx}$

(a): e^{ikx} ; (b): $\cos(kx)$; (c) : k ; (d): kx ; (e): $e^{-\alpha x^2}$

Give the corresponding eigenvalue where appropriate

Answer:

In each case form Ωf. If the result is ϖf where ϖ is a constant, then f is an eigenfunction of the operator Ω and ϖ is the eigenvalue

(a): $\frac{de^{ikx}}{dx} = ike^{ikx}$, yes: eigenvalue = ik

(b): $\frac{d\cos(kx)}{dx} = -k\sin kx$; no

(c): $\frac{dk}{dx} = 0$; yes; eigenvalue 0

(d): $\frac{dkx}{dx} = k = \frac{1}{x}kx$; no [$\frac{1}{x}$ is not a constant]

(e): $\frac{de^{-\alpha x^2}}{dx} = -2\alpha x e^{-\alpha x^2}$; no [$-2\alpha x$ is not a constant]

2. Determine which of th following functions are eigenfunctions of the inversion operator $\hat{i}$ (which has the effect of making the replacement x $\rightarrow$ - x-

Answer :

(a): $x^3 - kx$; (b):coskx ; (c): $x^2 + 3x - 1$.
State the eigenvalue of $\hat{i}$ when appropriate
Operate on each function with $\hat{i}$; if the function is regenerated multiplied by a constant, it is an eigenfunction of $\hat{i}$ and the constant is the eigenvalue.

(b): f = coskx ; (c)
$\hat{i}$coskx = cosk(-kx) = coskx = f
Therefore, f is an eigenfunction with eigenvalue, +1

(c): $f = x^2 + 3x - 1$
$\hat{i}(x^2 + 3x - 1) = x^2 - 3x - 1 \neq$ (constant)*f
Therefor, f not an eigenfunction to $\hat{i}$

3. 1. Determine which of the following functions are eigenfunctions to the operator $\frac{d^2}{dx^2}$

(a): e^{ikx} ; (b): $\cos(kx)$; (c) : k ; (d): kx ; (e): $e^{-\alpha x^2}$

Give the corresponding eigenvalue where appropriate

In each case form Ωf. If the result is ϖf where ϖ is a constant, then f is an eigenfunction of the operator Ω and ϖ is the eigenvalue

Answer:

(a): $\frac{d^2(e^{ikx})}{dx^2} = -k^2 e^{ikx}$, yes eigenvalue $= -k^2$

(b): $\frac{d^2 \cos(kx)}{dx^2} = -k^2 \cos kx$; yes : eigenvalue= -k^2

(c): $\frac{d^2 k}{dx^2} = 0$; yes; eigenvalue

(d): $\frac{d^2(kx)}{dx^2} = 0 = 0(kx)$; yes eigenvalue 0

(e): $\frac{d^2 e^{-\alpha x^2}}{dx^2} = (-2\alpha + 4\alpha^2 x^2)e^{-\alpha x^2}$; no

Hence (a,b,c,d) are eigenfunctions of $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}$;

(*b*,*d*) are eigenfunctions of $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}$, but not of $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}$.

$$\hat{A}f = kf \qquad (4\text{-}1)$$

حيث k القيمة الخاصة

مثال:

أثبت أن الدالة التالية: حيث A,α ثوابت ،

$$\psi = Ae^{-\alpha x}$$

هي دالة مميزة للمؤثر التالي:

$$\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$$

الحل:

$$\hat{F}\psi = \frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{-\alpha x}\right) + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}\left(Ae^{-\alpha x}\right) + \frac{2\alpha}{x}\left(Ae^{-\alpha x}\right)$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 Ae^{-\alpha x} + \frac{2}{x}\left(-\alpha Ae^{-\alpha x}\right) + \frac{2\alpha}{x}\left(Ae^{-\alpha x}\right)$$

$$\hat{F}\psi = \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{x} + \frac{2\alpha}{x}\right)Ae^{-\alpha x}$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 Ae^{-\alpha x}$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2\psi$$

اي أن ψ دالة مميزة و α^2 القيمة المميزة

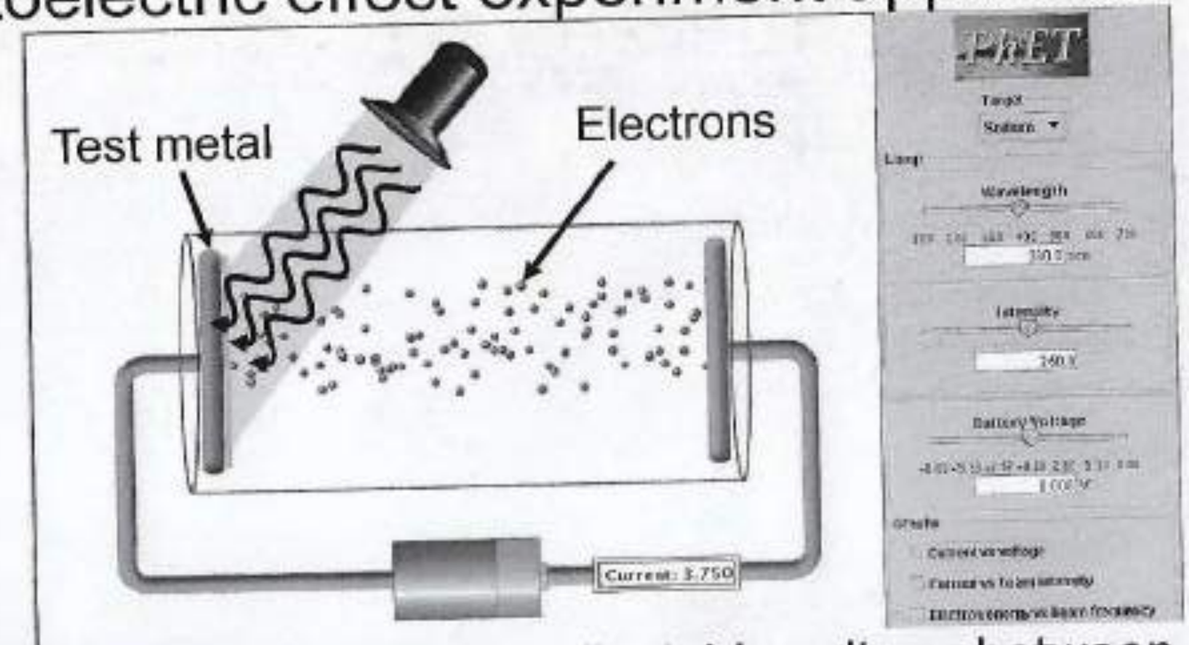
تمرين أوجد الدالة المميزة للمؤثر التالى :

$$\hat{G} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + bx$$

الظاهره الكهروضوئيه

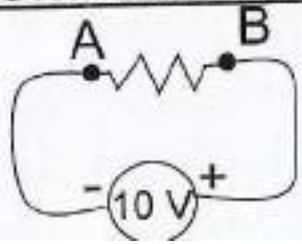
Photoelectric effect

Photoelectric effect experiment apparatus.



Two metal plates in vacuum, adjustable voltage between them, shine light on one plate. Measure current between plates.

I. Understanding the apparatus and experiment.



Potential difference between A and B = +10 V
Measure of energy an electron gains going from A to B.

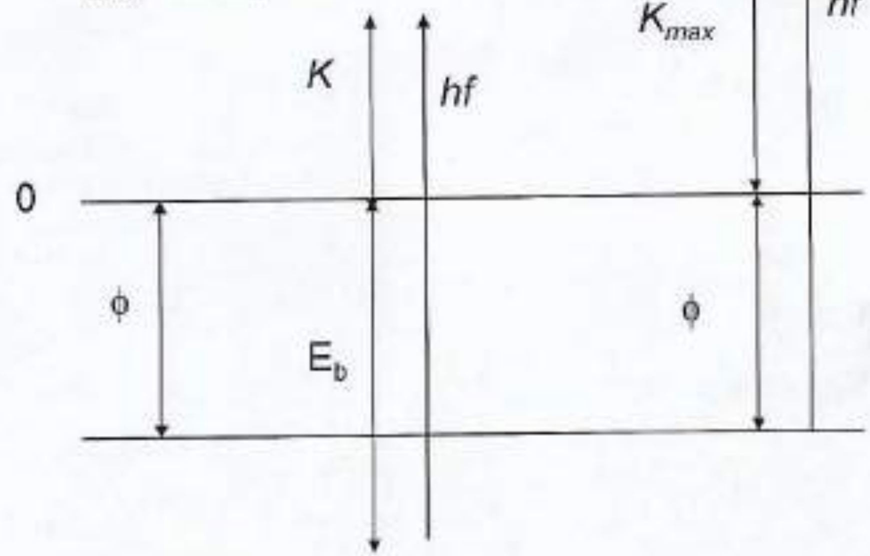
Photons

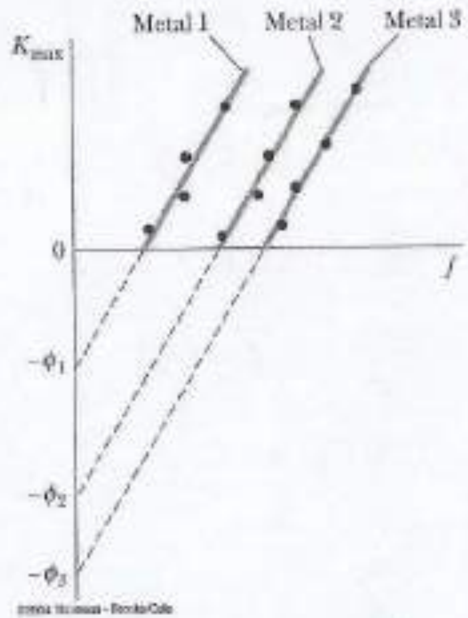
$E = hf$
$hf = K + E_b$
$hf = K_{max} + E_{b,min}$
$E_{b,min} = \phi$
$hf = K_{max} + \phi$
$K_{max} = hf - \phi$

No photoelectrons emitted for $hf < hf_c = E_{b,min} = \phi$,

For, $f > f_c$, *cutoff frequency*
$K_{max} = e\Delta V_s = hf - \phi$

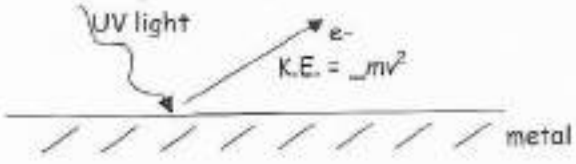
$$\Delta V_s = \frac{h}{e} f - \frac{\phi}{e}$$



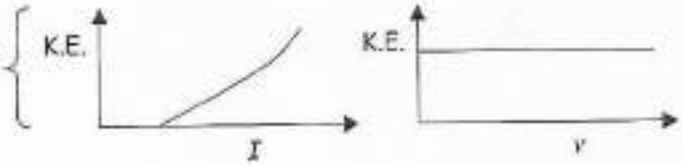


(b) Photoelectric effect

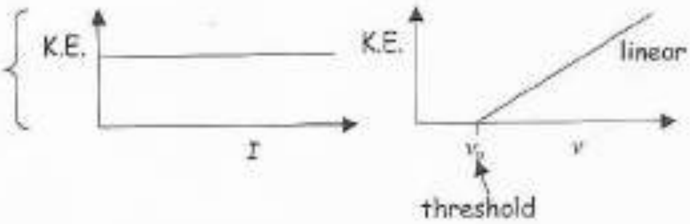
Exp't:



Classically expect:



Exp't: Opposite!



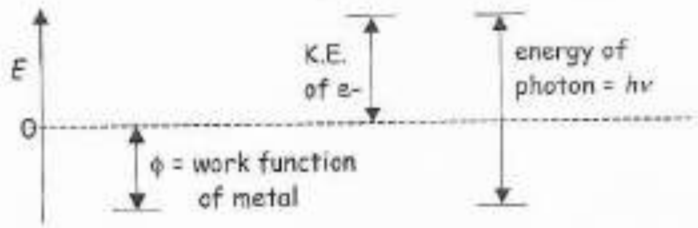
Einstein (1905) proposed:

(1) Light is made up of energy "packets: "photons"

(2) The energy of a photon is proportional to the light frequency

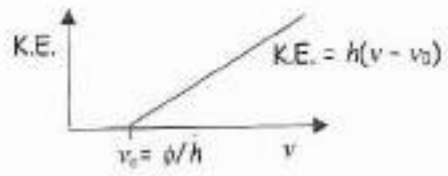
$$\boxed{E = h\nu}$$ h = Planck's constant

New model of photoelectric effect:



∴ K.E. = $h\nu - \phi = h\nu - h\nu_0 = h(\nu - \nu_0)$

∴



Comparing to exp't, value of "h" matches the one found by Planck!

<u>This was an extraordinary result !</u>

Summary:

(1) Structure of atom can't be explained classically
(2) Discrete atomic spectra and Rydberg's formula can't be explained
(3) Blackbody radiation can be "explained" by quantifying energy of oscillators $E = h\nu$
(4) Photoelectric effect can be "explained" by quantifying energy of light $E = h\nu$

photoelectric Effect

discovered in 1887 by Hertz when he try to prove the existance of electromagnetic wave

يحدث الانبعاث الكهروضوئي عندما يضاء سطح معدن (K, Na) بواسطة ضوء مثل U-V, visible

اكتشف Lenard —

١- ان المنبعث هي اشعة كاثودية (الكترونات)

٢- التيار يتناسب مع شدة الضوء الساقط

٣- الطاقة الحركية لا تعتمد على شدة الضوء الساقط

٤- الالكترونات لا تنبعث الا اذا كان تردد الضوء الساقط اعلى من قيمة معينة [يسمى اقل تردد والذي تحته لا يحدث اي انبعاث بتردد العتبة]

Threshold frequency

وهو يختلف حسب المعدن

التفسير ١- بالاعتماد على النظرية الموجية (فشل)

٢- 1905 ← اينشتاين وسع نظرية بلانك

Energy is quantized $E = h\nu, 2h\nu, 3h\nu$

quanta of light is photons

عند امتصاص المعدن للفوتون ← الطاقة (1) يذهب للتغلب على قوة جذب الالكترون للمعدن

الزيادة يتحول الى طاقة حركية ينطلق بها الإلكترون

$$h\nu \begin{cases} h\nu_0 = \phi \\ \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mv_{max}^2 = E_{max} \end{cases}$$

$$\frac{1}{2}mv^2 = \underline{h\nu} - \underline{h\nu_0} = h\nu - \phi$$

$h\nu$: تردد الضوء الساقط ، $h\nu_0$: تردد العتبة ، ϕ: دالة الشغل ↓ work function

اقل شغل لازم لازالة الالكترون من سطح المعدن

ان كتلة الفوتون (في السكون) = صفر حسب نظرية اينشتاين وعندما يتحرك بسرعة الضوء وحسب النظرية النسبية تكون له كتلة لا تساوي صفر

$$E = h\nu = mc^2 = m\cdot c\cdot c = \underline{p}\cdot c$$

(p: الزخم)

$$h\nu = p\cdot c$$

$$\left[p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}\right] \text{ dual nature of light}$$

$$\underset{\text{موجية}}{\lambda} = \underset{\text{مادية}}{(h/p)}$$

λ هو الطول الموجي لدبرولي تطبق خصائص الضوء المادية والموجية سواء؟

ماهو الطول الموجي (λ) لدبرولي لالكترونات تم تعجيلها خلال فرق جهد مقداره 100V.

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \qquad p = \sqrt{2mE}$$

$$E = 1.602\times10^{-19}\,\frac{J}{V}\times100V = 1.602\times10^{-17}\,J$$

$$p = \sqrt{2\times9.110\times10^{-31}\,kg\times1.602\times10^{-17}\,J}$$

$$p = 5.403\times10^{-24}\,kg\cdot m\cdot s^{-1}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626\times10^{-34}\,J\cdot s}{5.403\times10^{-24}\,kg\cdot m\cdot s^{-1}} = 1.226\times10^{-10}\,m = 0.1226\,nm$$

Typical energies

Photon Energies:

Each photon has: Energy = Planks constant * Frequency

(Energy in Joules)

$E=hf=(6.626*10^{-34}\text{ J-s})*(f\text{ s}^{-1})$

$E=hc/\lambda = (1.99*10^{-25}\text{ J-m})/(\lambda\text{ m})$

(Energy in eV)

$E=hf= (4.14*10^{-15}\text{ eV-s})*(f\text{ s}^{-1})$

$E= hc/\lambda = (1240\text{ eV-nm})/(\lambda\text{ nm})$

Red Photon: 650 nm $\quad E_{photon} = \frac{1240\text{ eV-nm}}{650\text{ nm}} = 1.91\text{ eV}$

Work functions of metals (in eV):

				Lead	4.14	Potassium	2.3
Aluminum	4.08 eV	Cesium	2.1	Magnesium	3.68	Platinum	6.35
Beryllium	5.0 eV	Cobalt	5.0	Mercury	4.5	Selenium	5.11
Cadmium	4.07 eV	Copper	4.7	Nickel	5.01	Silver	4.73
Calcium	2.9	Gold	5.1	Niobium	4.3	Sodium	2.28
Carbon	4.81	Iron	4.5			Uranium	3.6
						Zinc	4.3

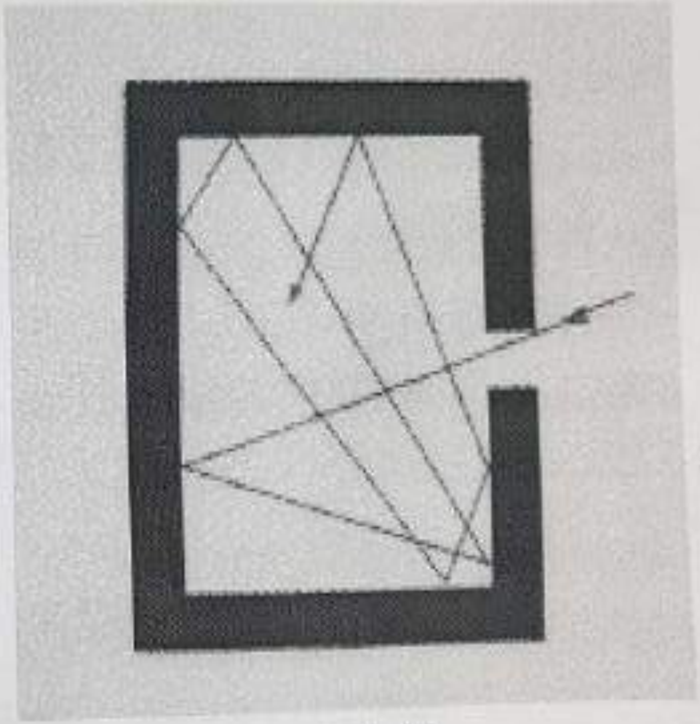
اشعاع الجسم ألأسود

Black body radiation

Black Body **الجسم ألأسود**

Definition of a black body

A black body is an ideal body which allows the whole of the incident radiation to pass into itself (without reflecting the energy) and absorbs within itself this whole incident radiation (without passing on the energy). This propety is valid for radiation corresponding to all wavelengths and to all angels of incidence. Therefore, the black body is an ideal absorber of incident radaition.



Univ. of Oregon web site

٦٠

Basic Laws of Radiation

1) All objects emit radiant energy.

2) Hotter objects emit more energy than colder objects. The amount of energy radiated is proportional to the temperature of the object raised to the fourth power.

➡ This is the Stefan Boltzmann Law

$$F = \sigma T^4$$

F = flux of energy (W/m^2)
T = temperature (K)
$\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\ W/m^2K^4$ (a constant)

Basic Laws of Radiation

1) All objects emit radiant energy.

2) Hotter objects emit more energy than colder objects (per unit area). The amount of energy radiated is proportional to the temperature of the object.

3) The hotter the object, the shorter the wavelength (λ) of emitted energy.

➡ This is Wien's Law

$$\lambda_{max} \cong \frac{3000\ \mu m}{T(K)}$$

- Stefan Boltzmann Law.

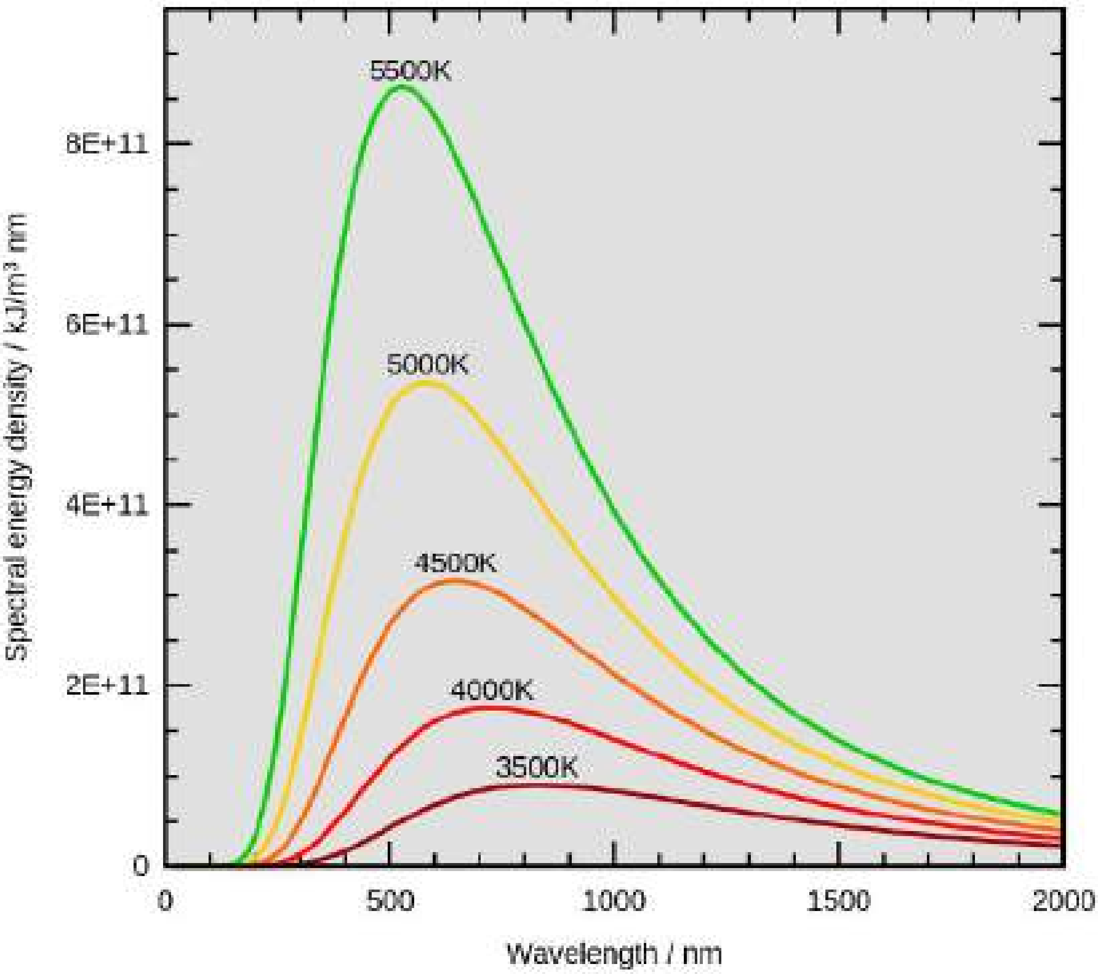
$$F = \sigma T^4$$

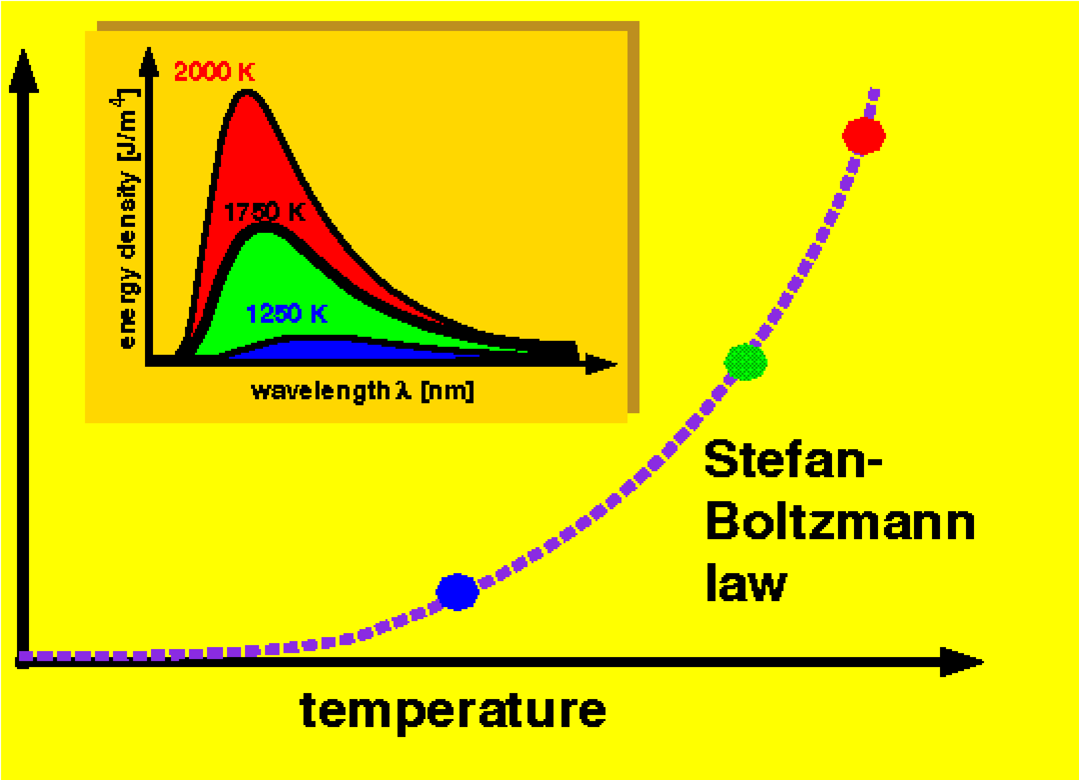
F = flux of energy (W/m^2)
T = temperature (K)
$\sigma = 5.67 \times 10^{-8}$ W/m^2K^4 (a constant)

- Wien's Law

$$\lambda_{max} \cong \frac{3000\ \mu m}{T(K)}$$

ok


5500K
5000K
4500K
4000K
3500K
8E+11
6E+11
4E+11
2E+11
0
0
500
1000
1500
2000
Spectral energy density / kJ/m³ nm
Wavelength / nm


2000 K
1750 K
1250 K
energy density [J/m4]
wavelength λ [nm]
Stefan-
Boltzmann
law
temperature

الخطوط الطيفيه للذرات

Spectral lines of atoms

Spectral lines of atoms الخطوط الطيفية للذرات

عند تسخين املاح الفلزات القلوية الى التوهج وامرار الضوء خلال موشور نحصل على سلسلة من الخطوط الطيفية كل منها مرتبط بطول موجي معين.

$$H_2 \xrightarrow[\text{Vacuum}]{\text{high voltage}} H + H$$

1896 Redberg
1908 Ritz

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} = R\left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right]$$

palmer.

$R = 109677.76\ cm^{-1}$

Region	series name	n_1	n_2
U-V	Lyman	1	2, 3, ---
UV- visible	palmer	2	3, 4, ---
IR	Baschen	3	4, 5, ---
IR	Brackett	4	5, 6, ---
IR	Pfound	5	6, 7, ---

$\frac{R}{n_2^2}$, $\frac{R}{n_1^2}$ كل خط طيفي هو الفرق بين الحدين

<u>Example:</u> Determine $\tilde{\nu}, \lambda, \nu, E$ for the first and last or final lines of Lymam and palmer series

Lyman $n_1 = 1$ $n_2 = \infty$ الاخير $n_2 = 2$ الخط الاول

palmer $n_1 = 2$ $n_2 = \infty$ الاخير $n_2 = 3$ الاول

$n_1 = 1$, $n_2 = 2$ | $\tilde{\nu} = 8.23 \times 10^4\ cm^{-1}$, $\lambda = 1.22 \times 10^{-5}\ cm$
$\nu = 2.46 \times 10^{15}\ s^{-1}$

$n_1 = 1$, $n_2 = \infty$ | $\tilde{\nu} = 1.0967776 \times 10^5\ cm^{-1}$, $\lambda = 9.12 \times 10^{-8}\ m$
$\nu = 8.99 \times 10^{16}\ s^{-1}$

$E = h\nu$

Example

What is the De-Broglie wavelength λ of an electron that has been accelerated through a potential difference of 100v.

$E = ½ m v^2 = p^2/2m \rightarrow p = \sqrt{2mE}$

$E = 100 v \times 1.602 \times 10^{-19} J/ev = 1.602 \times 10^{-17} J$

$P = \sqrt{2} \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1.602 \times 10^{-17} = 5.403 \times 10^{-24} kg.m.s^{-1}$

$\lambda = h/p = 6.626 \times 10^{-34} J.s/5.403 \times 10^{-24} kg.m.s^{-1} = 1.226 \times 10^{-10} = 0.1226$ nm

Spectral lines of atoms

Alkali metal salts when heated to brightness and the emitted light is analyzed through prism, we will have a series of spectral lines corresponds to different wavelengths.

$H_2 \rightarrow H + H$

1896 Redberg

1908 Ritz

Palmer-Redberg-Ritz

$(1/\lambda) = \upsilon = R[(1/n_1^2)-(1/n_2^2)]$ $R = 109678 \ cm^{-1}$

any spectral line is a difference between two terms

Region	spectral series	n_2	n_1
U.V	Lyman	.....3, 2	1
U.V visible	Balmer	..... 4, 3	2
IR	Baschen	.... 5, 4	3
IR	Brackett	.....6, 5	4
IR	Pfund	.....7, 6	5

Example : Determine the λ, υ, υ, and E for the first lyman and palmer series lines.

$n_2 = 2, n_1 = 1$ $\lambda = 1.22 \times 10^{-5}$ cm, $\upsilon = 2.46 \times 10^{15} s^{-1}$, $\upsilon = 8.23 \times 10^4 cm^{-1}$

$n_2 = 3, n_1 = 2$ $\lambda = 6.56 \times 10^{-5}$ cm, $\upsilon = 4.57 \times 10^{14} s^{-1}$, $\upsilon = 1.52 \times 10^4 cm^{-1}$

Final lyman series

$n_2 = \infty, n_1 = 1$ $\lambda = 9.12 \times 10^{-8}$ cm, $\upsilon = 8.99 \times 10^{16} s^{-1}$, $\upsilon = 1.09 \times 10^5 cm^{-1}$

Example: what is the energy of the third line of pfund seies for a hydrogen atom in wave number, wavelength, frequency and energy.

$(1/\lambda) = \upsilon = R_H[(1/n_1^2)-(1/n_2^2)] = 109678(1/5^2-1/8^2) = 2632.3 \ cm^{-1}$

$\lambda = 1/2632.3 = 3.8 \times 10^{-4}$ cm

$\upsilon = c/\lambda = 3 \times 10^{10} cm \ s^{-1}/3.8 \times 10^{-4} cm = 7.9 \times 10^{11} s^{-1}(Hz)$

$E = h\upsilon = 5.23 \times 10^{-20} J$

نموذج بور للذره

The Bohr Model of the Atom

Example: what is the wavelength of the first three lines of Paschen series for a hydrogen atom in μm.

$(1/\lambda) = \upsilon = R_H[(1/n_1^2)-(1/n_2^2)]$

$\lambda = 1/\upsilon = 1/R_H[n_1^2 n_2^2 / (n_2^2 - n_1^2)] = 1/R_H[9 n_2^2 / (n_2^2 - 9)]$ $n_2 = 4, 5, 6$

first line $\lambda = 1/109678[9x16/(16-9)] = 1.875$ μm.
second line $\lambda = 1/109678[9x25/(25-9)] = 1.282$ μm.
third line $\lambda = 1/109678[9x36/(36-9)] = 1.094$ μm.

Example: if the longest wavelength of a series in a hydrogen atom is at 656.3 nm. What is the name of this series. Longest wavelength mean the first line so we assume
$n_2 = n_1 + 1$
Example: One of lyman series in a hydrogen atom is at 97492.208 cm^{-1}, from which n value does electron falls.
$Z = 1$ and lyman series $n_1 = 1$
$(1/\lambda) = \upsilon = R[(1/n_1^2)-(1/n_2^2)]$ $R = 109678\ cm^{-1}$
$97492.208 = 109678\,[1/1^2 - 1/n_2^2]$
$n_2 = 3$

Bohr Rutherford Model of Atom
1911 Rutherford explained that atom contains nucleolus with most positive charge in and electrons circulated around it in an orbit like galaxies around sun.
later Gieger and Marsden etc…studies failed to explain electronic transitions and photo emissions.
1913 Bohr/Denemark and Rutherford/UK suggested several proposal to explain differences between classical theory and experimental results.

1.Nucleous contain (protons + neutrons) and electrons circulated around.

2. Electrons circulated around nucleous in a constant orbit with an angular momentum of $n(h/2\pi)$ where n is an integer = 1,2,3.

3.When electron is in the orbit, there is no emission and its energy is constant if it did not change its orbit. This agree with the idea of the presence of energy levels in atom with electron having constant and limited energy.

4.Each spectral line in an atom resulted from electron transition from E_2 to E_1 energy levels with $\Delta E = E_2 - E_1$ and energy is emitted as light of quanta of frequency υ.
These were proposed for H atom (p, e, n)

We have two forces on the electron :

(a) Centrifugal force to remove electron from its orbit = $(mv^2)/r$
(b) Attraction force of it to nucleous (coulombs law) = $(Ze^2)/r^2$
(c) For the equilibrium and the electron to stay in its orbit the two forces must be equal i.e $(Ze^2)/r^2 = (mv^2)/r \rightarrow (Ze^2)/r = mv^2 \rightarrow$

$$r = (Ze^2)/mv^2$$

$mv^2 = (Ze^2)/r \rightarrow Mvr = (Ze^2)/v$ but $L = mvr = n(h/2\pi) = n\hbar$

$v = nh/(2\pi mr)$

$n(h/2\pi) = (Ze^2)/v \rightarrow v = (2\pi Ze^2)/nh$

so $r = (Ze^2) / m[(2\pi Ze^2)/nh]^2$

$$r = n^2h^2/(4\pi^2 mZe^2)$$

$E = K.E + U \qquad U = -\int [(Ze^2)/r^2]\, dr = -(Ze^2)/r$
$E = \frac{1}{2} mv^2 - (Ze^2)/r$
But from above $mv^2 = (Ze^2)/r$ multiply by 1/2 gives

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2}(Ze^2)/r = (Ze^2)/2r$$

$E = (Ze^2)/2r - (Ze^2)/r = -(Ze^2)/2r$, since $r = n^2h^2/(4\pi^2 mZe^2)$

$E = -(2\pi^2 mZ^2e^4)/n^2h^2$ therefore energy of an electron in any orbit around atom of atomic number Z equal 1/1, 1/4, 1/9, 1/16 of energy of first orbit.

$E_{n2} = -(2\pi^2 mZ^2e^4)/n_2^2h^2$

$E_{n1} = -(2\pi^2 mZ^2e^4)/n_1^2h^2$

$\Delta E = h\upsilon = E_{n2} - E_{n1} = -(2\pi^2 mZ^2e^4)/n_2^2h^2 - [-(2\pi^2 mZ^2e^4)/n_1^2h^2]$

Bohr Rutherford Model of Atom

1911 Rutherford explained that atom contains nucleolus with most positive charge in and electrons circulated around it in an orbit like galaxies around sun.
later Gieger and Marsden etc…studies failed to explain electronic transitions and photo emissions.
1913 Bohr/Denemark and Rutherford/UK suggested several proposal to explain differences between classical theory and experimental results.

1.Nucleous contain (protons + neutrons) and electrons circulated around.

2. Electrons circulated around nucleous in a constant orbit with an angular momentum of $n(h/2\pi)$ where n is an integer = 1,2,3.

3.When electron is in the orbit, there is no emission and its energy is constant if it did not change its orbit. This agree with the idea of the presence of energy levels in atom with electron having constant and limited energy.

4.Each spectral line in an atom resulted from electron transition from E_2 to E_1 energy levels with $\Delta E = E_2 - E_1$ and energy is emitted as light of quanta of frequency υ. These were proposed for H atom (p, e, n)

We have two forces on the electron :

(a) Centrifugal force to remove electron from its orbit = $(mv^2)/r$
(b) Attraction force of it to nucleous (coulombs law) = $(Ze^2)/r^2$
(c) For the equilibrium and the electron to stay in its orbit the two forces must be equal i.e $(Ze^2)/r^2 = (mv^2)/r \rightarrow (Ze^2)/r = mv^2 \rightarrow$

$$\mathbf{r = (Ze^2)/ mv^2}$$

$mv^2 = (Ze^2)/r \rightarrow Mvr = (Ze^2)/v$ but $L = mvr = n(h/2\pi) = n\hbar$

$v = nh/(2\pi mr)$

$n(h/2\pi) = (Ze^2)/v \rightarrow$

$$\mathbf{v = (2\pi Ze^2)/\ nh}$$

so $r = (Ze^2) / m[(2\pi Ze^2)/ nh]^2$

$$\mathbf{r = n^2h^2/(4\pi^2mZe^2)}$$

$E = K.E + U \qquad U = -\int [(Ze^2)/r^2]\, dr = -(Ze^2)/r$

$E = ½\, mv^2 - (Ze^2)/r$

But from above $mv^2 = (Ze^2)/r$ multiply by 1/2 gives

$½\, mv^2 = ½\, (Ze^2)/r = (Ze^2)/2r$

$E = (Ze^2)/2r - (Ze^2)/r = -(Ze^2)/2r$, since $r = n^2h^2/(4\pi^2mZe^2)$

$$\mathbf{E = -(2\pi^2mZ^2e^4) / n^2h^2}$$

therefore energy of an electron in any orbit around atom of atomic number Z equal 1/1, 1/4, 1/9, 1/16 of energy of first orbit.

$E_{n2} = -(2\pi^2mZ^2e^4) / n_2^2h^2$

$E_{n1} = -(2\pi^2mZ^2e^4) / n_1^2h^2$

$\Delta E = h\upsilon = E_{n2} - E_{n1} = -(2\pi^2mZ^2e^4) / n_2^2h^2 - [-(2\pi^2mZ^2e^4) / n_1^2h^2]$

$\upsilon = [(2\pi^2mZ^2e^4)/h^3]\, [1/n_1^2 - 1/n_2^2]$

$\bar{\upsilon} = [(2\pi^2mZ^2e^4)/h^3c]\, [1/n_1^2 - 1/n_2^2]$

electrostatic unit(esu)=e=($4.802 x 10^{-10} cm^{3/2} g^{1/2} s^{-1}$)

$e^2 = 2.306 x 10^{-19} cm^3 g s^{-2}$

Example :Calculate the radius of the first Bohr orbit of H atom.

$Z = 1, n = 1.$ and $r = n^2h^2/(4\pi^2 mZe^2)$

$= [1^2(6.626\ 10^{-27})^2]/(4 x (3.141)^2 x 9.107x10^{-28} x1x (4.8x10^{-10} absecu)^2$

$= 0.529Å$

Example : Calculate the electron speed in the first Bohr orbit of H atom.

$v = nh/(2\pi mr) = [1(6.626\ 10^{-27})]/[2 x (3.141) x 9.107x10^{-28} x 0.529]$
$= 2.188 x 10^8$ cm/s

$H \rightarrow H^+$ + electron ionization : from stable $n_1 = 1$ to $n_2 = \infty$

Ionization potential = $[(2\pi^2 mZ^2e^4)/h^2] [1/n_1^2 - 1/n_2^2]$

For H $IP = 2.179 x 10^{-11}$ erg
1erg = 10^{-7} Joule

$IP = 2.179 x 10^{-11}$ erg x 10^{-7} Joule. $erg^{-1} = 2.179 x 10^{-18}$ joule

1 joule = $1.602 x 10^{-19}$ ev

$IP = 2.179 x 10^{-18}$ joule / ($1.602 x 10^{-19}$ joule. ev^{-1}) = 13.6

$Li \rightarrow Li^{+1} + e\ (IP_1)$ $Li^{+1} \rightarrow Li^{+2} + e\ (IP_2)$ $Li^{+2} \rightarrow Li^{+3} + e\ (IP_3)$

$(IP_3) = (IP_H) .(Z)^2$ where Z is the number of electron lost = 3

$(IP_3) = (IP_H) .(Z)^2 = 13.6 (3^2) = 122.4$ ev

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \rightarrow \frac{Ze^2}{r} = mv^2$$

$$r = \frac{Ze^2}{mv^2}$$

و ممنتم زاویه

$$mvr = \frac{Ze^2}{v} \equiv mvr = \frac{nh}{2\pi}$$

$$\frac{Ze^2}{v} = \frac{nh}{2\pi} \qquad v = \frac{2\pi Z e^2}{nh}$$

$$r = \frac{Ze^2}{m\left(\frac{2\pi Z e^2}{nh}\right)^2}$$

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m Z e^2}$$

$$E = K.E + U \qquad U = -\int \left(\frac{Ze^2}{r^2}\right) dr = -\frac{Ze^2}{r}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

$$mv^2 = \frac{Ze^2}{r} \times \frac{1}{2} \qquad \frac{1}{2}mv^2 = \frac{Ze^2}{2r}$$

$$E = \frac{Ze^2}{2r} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{2r}$$ تعویض r

$$E = -\frac{2\pi^2 m Z^2 e^4}{n^2 h^2} \qquad E_{n_1} \quad E_{n_2}$$

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = h\nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} = hc\tilde{\nu}$$

المهتز التوافقي

Harmonic oscillator

معادلات الحركة للمهتز التوافقي المتشابه بصفات
في الاتجاهات الثلاثة حسب الاحداثيات الديكارتية

المهتز التوافقي يعني الذبذبات في الثانية متساوية
vibration / sec

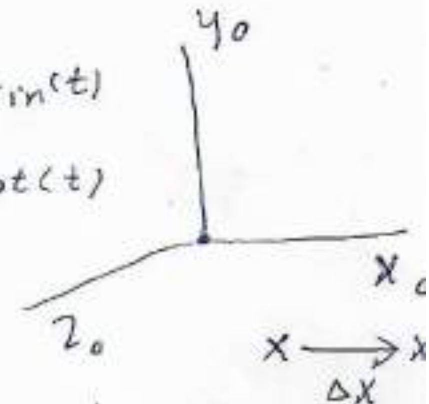
معادلات الحركة هي السرعة، التعجيل وكل ما يتعلق بها.

ازاحة $\quad x(t) \quad y(t) \quad z(t) \rightarrow E(t)$

$x(t) \quad y(t) \quad z(t) \rightarrow E(t)$

$\dot{x}(t) \quad \dot{y}(t) \quad \dot{z}(t) \rightarrow E_{kin}(t),\ E_{pot}(t)$

$\ddot{x}(t) \quad \ddot{y}(t) \quad \ddot{z}(t) \rightarrow F(t)$



Time dependent

$$E_{kin} = T_x + T_y + T_z \qquad T_x = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

$$x = x_0 \sin\left[(2\pi\nu_0 t) + \delta x\right]$$

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = x_0 \cdot 2\pi\nu_0 \cos(2\pi\nu_0 t + \delta x)$$

$$T_x = \frac{1}{2} m \left(x_0 \cdot 2\pi\nu_0 \cdot \cos(2\pi\nu_0 t + \delta x)\right)^2$$

$$T_x = 2m\pi^2\nu_0^2 x_0^2 \cos^2(2\pi\nu_0 t + \delta x)$$

$$T_y = 2m\pi^2\nu_0^2 y_0^2 \cdot \cos^2(2\pi\nu_0 t + \delta y)$$

$$T_z = 2m\pi^2\nu_0^2 z_0^2 \cdot \cos^2(2\pi\nu_0 t + \delta z)$$

small δ

$$T_x + T_y + T_z = 2m\pi^2\nu_0^2 (x_0^2 + y_0^2 + z_0^2) \cos^2(2\pi\nu_0 t$$

A

$$E_{kin} = T_x \qquad T_x + T_y \qquad T_x + T_y + T_z$$

$$E_{pot} = V_x \qquad V_x + V_y \qquad V_x + V_y + V_z$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$$

$$E_{pot} = V_x + V_y + V_z = \frac{1}{2} c (x^2 + y^2 + z^2)$$

$$V_x = \frac{1}{2} c x^2 \qquad c = 4\pi^2 \nu_0^2 m$$

$$x = x_0 \sin(2\pi \nu_0 t + \delta x)$$

$$V_x = \frac{1}{2} (4\pi^2 \nu_0^2 m)(x_0 \sin(2\pi \nu_0 t + \delta x))$$

$$V_x = 2m\pi^2 \nu_0^2 x_0^2 \sin^2(2\pi \nu_0 t + \delta x)$$

$$V_y = 2m\pi^2 \nu_0^2 y_0^2 \sin^2(2\pi \nu_0 t + \delta y)$$

$$V_z = 2m\pi^2 \nu_0^2 z_0^2 \sin^2(2\pi \nu_0 t + \delta z)$$

$$E_{pot} = V_x + V_y + V_z$$

$$= \underbrace{2m\pi^2 \nu_0^2 (x_0^2 + y_0^2 + z_0^2)}_{A} \sin^2(2\pi \nu_0 t)$$

الطاقة الكلية
باتجاهات ثلاثة

$$E_{total} = E_{kin} + E_{pot}$$

$$= A \cdot \cos^2(2\pi \nu_0 t) + A \cdot \sin^2(2\pi \nu_0 t)$$

$$= A [\cos^2(2\pi \nu_0 t) + \sin^2(2\pi \nu_0 t)]$$

$$= A \cdot (1) = A$$

∴ منظومة المهتز التوافقي هي منظومة
محافظة غير معتمدة على الزمن

$t = \frac{1}{\nu_0}$ التردد هو مقلوب الزمن

at $t = 0$ $(2\pi \nu_0 t) = 0$

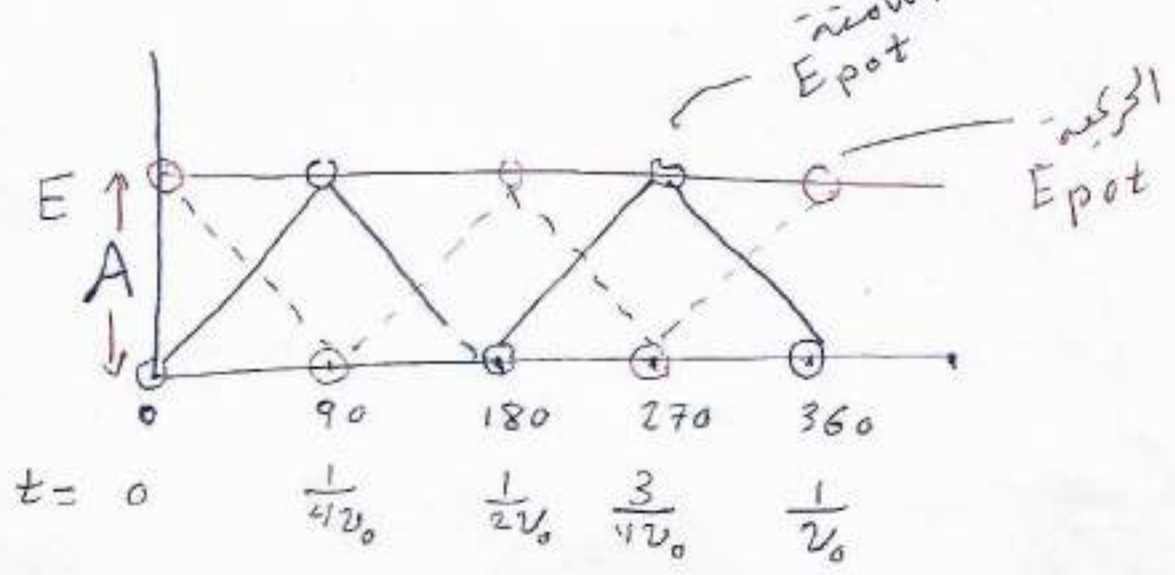
$t = \frac{1}{4\nu_0}$ $(2\pi \nu_0 \cdot \frac{1}{4\nu_0}) = 90$

$t = \frac{1}{2\nu_0}$ $(2\pi \nu_0 \cdot \frac{1}{2\nu_0}) = 180$

$t = \frac{3}{4\nu_0}$ $(2\pi \nu_0 \cdot \frac{3}{4\nu_0}) = 270$

$t = \frac{1}{\nu_0}$ $(2\pi \nu_0 \cdot \frac{1}{\nu_0}) = 360$

E_{pot}		E_{kin}		$t =$
$A \sin^2(2\pi \nu_0 (0))$	0	$A \cos^2(2\pi \nu_0 (0))$	A	0
$A \sin^2(2\pi \nu_0 (90))$	A	$A \cos^2(2\pi \nu_0 (90))$	0	$\frac{1}{4\nu_0}$
$A \sin^2(2\pi \nu_0 (180))$	0	$A \cos^2(2\pi \nu_0 (180))$	A	$\frac{1}{2\nu_0}$
$A \sin^2(2\pi \nu_0 (270))$	A	$A \cos^2(2\pi \nu_0 (270))$	0	$\frac{3}{4\nu_0}$
$A \sin^2(2\pi \nu_0 (360))$	0	$A \cos^2(2\pi \nu_0 (360))$	A	$\frac{1}{\nu_0}$



Harmonic oscillator in three dimensions in term of polar coordinates

In polar coordinate we have : r, θ, φ

$\cos \varphi = x/r \qquad x = r \cos \varphi$

$\sin \theta = r/r \qquad r = r \sin \theta$

$\mathbf{x = r. \sin \theta \cos \varphi}$

$\sin \varphi = y/r \qquad y = r \sin \varphi$

$\sin \theta = r/r \qquad r = r \sin \theta$

$\mathbf{y = r. \sin \theta \sin \varphi}$

$\cos \theta = z/r$

$\mathbf{z = r.\cos \theta}$

$T = ½m (x^2 + y^2 + z^2)$

$\mathbf{x = r. \sin \theta \cos \varphi}$

$x = dx/dt = (dx/dr).(dr/dt) + (dx/d\theta).(d\theta/dt) +(dx/d\varphi).(d\varphi/dt)$

$x = \sin \theta \cos \varphi .r + r \cos \theta \cos \varphi. \theta + r. \sin \theta(- \sin \varphi) \varphi$

$x^2 = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + r^2 \cos^2 \theta \cos^2 \varphi. \theta^2 + r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi. \varphi^2$

The same thing for y

$\mathbf{y = r. \sin \theta \sin \varphi}$

$y = dy/dt = (dy/dr).(dr/dt) + (dy/d\theta).(d\theta/dt) +(dy/d\varphi).(d\varphi/dt)$

$y = r.\sin \theta \sin \varphi + r \cos \theta \sin \varphi. \theta + r. \sin \theta \cos \varphi \varphi$

$y^2 = r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + r^2 \cos^2\theta \sin^2\varphi \theta^2 + r^2 \sin^2 \theta \cos^2\varphi \varphi^2$

$\mathbf{z = r.\cos\theta}$

$z = dz/dt = (dz/dr).(dr/dt) + (dz/d\theta).(d\theta/dt) +(dz/d \varphi).(d\varphi/dt)$

$z = r \cos \theta - r \sin \theta .\theta + 0$

$z^2 = r^2 \cos^2 \theta + r^2 \sin^2 \theta .\theta^2$

$x^2 + y^2 + z^2 = r^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi + r^2 \cos^2\theta \cos^2\varphi . \theta^2 + r^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi . \varphi^2 +$

$r^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi + r^2 \cos^2\theta \sin^2\varphi\, \theta^2 + r^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi\, \varphi^2 + r^2 \cos^2\theta$

$+ r^2 \sin^2\theta . \theta^2$

$= r^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi + r^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi + r^2 \cos^2\theta + r^2 \cos^2\theta \cos\varphi^2 . \theta^2 +$

$r^2 \cos^2\theta \sin^2\varphi\, \theta^2 + r^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi . \varphi^2 + r^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi\, \varphi^2 + r^2 \sin^2\theta . \theta^2$

$= r^2 \sin^2\theta(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi) + r^2 \cos^2\theta + r^2 \cos^2\theta . \theta^2 (\cos\varphi^2 + \sin^2\varphi)$

$+ r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2 (\sin^2\varphi + \cos^2\varphi) + r^2 \sin^2\theta . \theta^2$

$= r^2 \sin^2\theta + r^2 \cos^2\theta + r^2 \cos^2\theta . \theta^2 + r^2 \sin^2\theta . \theta^2 + r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2$

$= r^2(\sin^2\theta + \cos^2\theta) + r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2 + r^2 \theta^2 (\cos^2\theta + \sin^2\theta)$

$= r^2 + r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2 + r^2 \theta^2$

$= r^2 + r^2 \theta^2 + r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2$

$T = ½\, m(x^2 + y^2 + z^2)$

$T = ½\, m(r^2 + r^2 \theta^2 + r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2)$

$V = ½\, C(x^2 + y^2 + z^2) = ½\, C\, r^2 \qquad C = (4\pi^2 m\, \upsilon_0^2)$

$= ½\, (4\pi^2 m\, \upsilon_0^2)\, r^2$

$= 2\pi^2 m\, \upsilon_0^2\, r^2$

(1) Lagrange equations of motion in term of r

$(d/dt)(\partial L/\partial r) - (\partial L/\partial r) = 0 \qquad L = T - V$

$T = ½\, m(r^2 + r^2 \theta^2 + r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2)$

$(d/dt)[\partial/\partial r\{½\, m\, r^2 + ½\, m\, r^2\theta^2 + ½\, m\, r^2 \sin^2\theta\, \varphi^2\} - (\partial V/\partial r) - (\partial L/\partial r) = 0$

$(d/dt)\, [m\, r + 0 + 0 - 0 - (\partial L/\partial r) = 0$

$(d/dt)\ [m\ r - \partial/\partial r(T-V)] = 0$

$(d/dt)\ [m\ r - \partial T/\partial r + \partial V/\partial r] = 0$

$(d/dt)\ [m\ r - (m\ r\ \theta^2 + m\ r \sin^2\theta\ \varphi^2) + 4\pi^2 m\ \upsilon_0^2\ r = 0$

(2) Lagrange equations of motion in term of φ

$(d/dt)(\partial L/\partial \varphi) - (\partial L/\partial \varphi) = 0 \qquad L = T - V$

$(d/dt)\ [\partial/\partial\varphi\ \{½\ m\ r^2 + ½\ m\ r^2\theta^2 + ½\ m\ r^2 \sin^2\theta\ \varphi^2\} - (\partial V/\partial \varphi)$

$- \partial/\partial\varphi\ \{½\ m\ r^2 + ½\ m\ r^2\theta^2 + ½\ m\ r^2 \sin^2\theta\ \varphi^2\} - (\partial V/\partial \varphi) = 0$

$= (d/dt)\{ m\ r^2 \sin^2\theta.\ \varphi\} - 0 = 0$

$d/dt)(\partial L/\partial \varphi) - (\partial L/\partial \varphi) = (d/dt)\{ m\ r^2 \sin^2\theta.\ \varphi\}$

(3) Lagrange equations of motion in term of θ

$(d/dt)(\partial L/\partial \theta) - (\partial L/\partial \theta) = 0 \qquad L = T - V$

$(d/dt)\ [\partial/\partial\theta\ \{½\ m\ r^2 + ½\ m\ r^2\theta^2 + ½\ m\ r^2 \sin^2\theta\ \varphi^2\} - (\partial V/\partial \theta)$

$- \partial/\partial\theta\ \{½\ m\ r^2 + ½\ m\ r^2\theta^2 + ½\ m\ r^2 \sin^2\theta\ \varphi^2\} - (\partial V/\partial \theta) = 0$

$(d/dt)\ [0 + m\ r^2\theta + 0 - 0] - (0 + 0 + (2/2)\ m\ r^2 \sin\theta \cos\theta\ \varphi^2) = 0$

This is because $\sin^2\theta = \sin\theta.\ \sin\theta$

$(\partial/\partial\theta) = \sin\theta \cos\theta + \cos\theta \sin\theta = 2 \sin\theta \cos\theta$

$(d/dt)(\partial L/\partial \theta) - (\partial L/\partial \theta) = (d/dt)\ [\ m\ r^2\theta - m\ r^2 \sin\theta \cos\theta\ \varphi^2\ ] = 0$

(قواعد التكميم لسمرفيلد) 1915 [redacted]

يستنبط سومرفيلد قواعد عامة لمعالجة الانظمة الفيزياوية وفقاً لفرضية بلانك وتسهيلاً لأسلوب المعالجة وقد عممت هذه القواعد على ما يلي

١- تعالج الانظمة وفقاً لميكانيك نيوتن التقليدية حيث يتم اشتقاق معادلات الحركة للمنظومة بصيغة كرتيزية او نيوتن او هاملتونية حسب ملائمة اي من هذه المعادلات للطبيعة الفيزياوية لمسألة المنظومة

٢- من معادلات الحركة تدخل عملية التكميم الى المعالجة بتعريف كمية التأثير او ما يسمى بتكامل التأثير

$$\oint p_k \, dq_k = n_k h$$

q_k الاحداثي او المتغير الدوري

p_k زخم الحركة المقترن بالمتغير q_k [redacted]

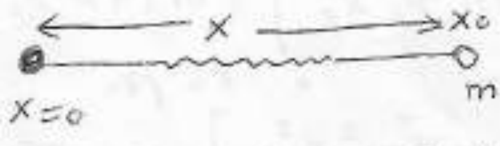
n_k عدد تام يدعى رقم الكم Quantum number.

h ثابت بلانك.

(٣) يتطلب الحل الرياضي للمعادلات التفاضلية حل اعتبار تكامل لها - اي ان تكامل التأثير هو تكامل معرف للحركة الدورية فقط التي تنطلق من موقع وتنتهي بنفس الموقع

حل مسألة المهتز التوافقي ذي الاتجاه الواحد حسب قواعد سومرفيلد

كتلة m مشدودة الى مركز قوة على ان يكون بعدها الاستقراري عن مركز المجال الشدسي X_0



من الحل التقليدي لهذا النظام نحصل على قوة الازاحة

$$-4\pi^2 m \nu_0^2 x = -K \cdot x = \text{القوة}$$

X_0 ارتفاع الذبذبة

$$x = X_0 \sin(2\pi \nu_0 t)$$

$$\dot{x} = 2\pi \nu_0 X_0 \cos(2\pi \nu_0 t)$$

الزخم P_x باتجاه x

$$P_x = m \cdot \frac{dx}{dt} = \boxed{2\pi \cdot m \cdot \nu_0 \cdot X_0 \cos(2\pi \nu_0 t)}$$

ادخال شروط التكامل لسمرفيلد يحسب التكامل لقلقة باعتبار العلاقة

$$dx = \frac{dx}{dt} \cdot dt$$

~~$$\oint P_x dx = \int_0^{1/\nu_0} m(2\pi \nu_0 X_0 \cos 2\pi \nu_0 t) dt = 2\pi^2 \nu_0 m X_0^2 = n \cdot h$$~~

$$\oint P_x dx = \int_{t=0}^{1/\nu_0} m \dot{x} \cdot \frac{dx}{dt} \cdot dt = \int_{t=0}^{1/\nu_0} m \cdot \underbrace{\frac{dx}{dt} \cdot \frac{dx}{dt}}_{\dot{x}^2} \cdot dt$$

$$\int_{t=0}^{1/\nu_0} m(2\pi \nu_0 X_0 \cos(2\pi \nu_0 t))^2 dt$$

$$= \int_0^{1/\nu_0} 4 m \pi^2 \nu_0^2 X_0^2 \underbrace{\cos^2(2\pi \nu_0 t)}_{\frac{1}{2}(1+\cos 2(2\pi \nu_0 t))} dt$$

$\cos^2 x = \frac{1}{2}(1 + \cos 2x)$

$$\int_{t=0}^{1/\nu_0} \frac{4}{2} m\pi^2 \nu_0^2 X_0^2\, dt + \frac{4}{2} m\pi^2 \nu_0^2 X_0^2 \int_{0}^{1/\nu_0} \cos(4\pi\nu_0 t)\, dt$$

$$= 2m\pi^2\nu_0^2 X_0^2 t \Big]_{t=0}^{t=1/\nu_0} + 2m\pi^2\nu_0^2 X_0^2 \Big] \sin(4\pi\nu_0 t) \Big]_{t=0}^{t=1/\nu_0}$$

$\sin 0 = 0$
$\sin\pi = 0$
$\sin 2\pi = 0$
$\sin 4\pi = 0$

$$= 2m\pi^2\nu_0^2 X_0^2 \cdot \frac{1}{\nu_0} - \underbrace{2m\pi^2\nu_0^2(0)}_{\text{zero}}$$

$$= 2m\pi^2\nu_0 X_0^2 = n_k h$$

$$X_{0,n}^2 = \frac{n_k h}{2m\pi^2\nu_0} \longrightarrow X_{0,n} = \left[\frac{n_k h}{2m\pi^2\nu_0}\right]^{1/2}$$

ارتفاع الذبذبة

من الحل التقليدي لمعادلات لجرانش

$$E_{tot} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} k x^2$$

$$= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\overbrace{(2\pi m\nu_0 X_0 \cos(2\pi\nu_0 t))^2}^{P_x^2}}{m}\right] + \frac{1}{2}\,\overbrace{4\pi^2 m\nu_0^2}^{k}\,\overbrace{(X_0 \sin 2\pi\nu_0 t)^2}^{x^2}$$

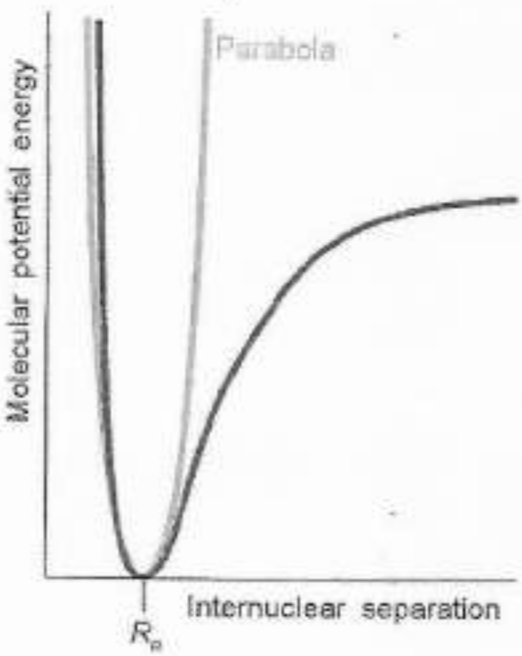
$$= (2\pi^2 m\nu_0^2 X_{0,n}^2)\underbrace{(\cos^2(2\pi\nu_0 t) + \sin^2(2\pi\nu_0 t))}_{1}$$

$$= 2\pi^2 m\nu_0^2 X_{0,n}^2 = 2\pi^2 m\nu_0^2 \cdot \frac{n_k h}{2m\pi^2\nu_0} = n_k h\nu_0$$

$E = nh\nu_0$

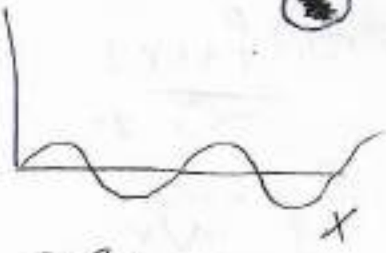
n	E
$n=0$	$E=0$
1	$= h\nu_0$
2	$= 2h\nu_0$
3	$= 3h\nu_0$
4	$= 4h\nu_0$

الطاقة كمية وغير متواصلة. عند ابتداء $n=0$، $E=0$ وهذا غير صحيح لأن الجزيئات تمتلك طاقة



Parabola
Molecular potential energy
Internuclear separation
R_e

Schrödinger Equation.



السرعة v_x

ارتفاع الموجة y

Classical Mechanics $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

t الزمن اللازم لوصول الموجة الى x

الحل هو التالي

$y = f_1(x) \cdot f_2(t)$

$f_2(t) = A \sin(2\pi \nu t)$

$y = f_1(x) \cdot A \sin(2\pi \nu t)$

نشتق y مرتين بالنسبة الى x بثبوت t

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = f_2(t) \cdot \frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2}$$

نشتق y مرتين بالنسبة الى t و x ثابتة

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = f_1(x) \cdot (-4\pi^2 \nu^2) \cdot A \sin(2\pi \nu t)$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$ معادلة الميكانيك التقليدي (الموجة)

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot f_1(x) \cdot (-4\pi^2 \nu^2) \cdot A \sin(2\pi \nu t)$$

$$= \frac{1}{V_x^2} \cdot f_1(x) (-4\pi^2 \nu^2) \cdot f_2(t)$$

$f_2(t) \frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2}$

$$\frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot (-4\pi^2 \nu^2) f_1(x)$$

نعوض

$$\lambda = \frac{V_x}{\nu} = x \qquad x = \lambda = V_x \cdot t = V_x \cdot \frac{1}{\nu} = [illegible]$$

معكوس الطرفين — نعوض

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{\nu^2}{V_x^2}$$

$$\frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} f_1(x) \qquad \boxed{f_1(x) = \psi}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi$$

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

$$\nabla^2 \psi = -\frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2}\psi$$

$$E = E_k + U = \frac{1}{2}mv^2 + U$$

$$mv^2 = 2(E - U)$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi = 0$$

وهذه هي معادلة شرودنكر والتي تطبقه في تفسير
سلوك المادة الموجية تقر ميكانيك الكم

الان كيفية التنبؤ بدالة الموجية او دراستها الحلقات 1926

Born.

Ψ Ψ^* complex conjucate of Ψ

حاصل ضرب الدالة الموجية (Ψ) بـ Ψ مرتبتها يعطي

(probability density) كثافة الاحتمالية

المحصول عليها — $-i$ تعوض i بـ اتجاهات

$$P(x) = \Psi(x)\,\Psi^*(x)$$

ان $P(x)$ لها اهمية وهي عند مرتبها بدلا اي متغير تعطي الاحتمالية فيه.

مثلا على المحور x احتمالية وجود particle بين $(x, x+dx)$

$$P(x)\cdot d(x) = \Psi(x)\,\Psi^*(x)\cdot dx$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \Psi(x)\,\Psi^*(x)\,dx$$

total probability $\int_{-\infty}^{+\infty} = 1$

Normalized

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{(x,y,z)}\,\Psi_{(x,y,z)}\,dx\,dy\,dz = 1$$

ranges المتغيرات

$$\therefore P(x,y,z) = \Psi^*(x,y,z)\,\Psi(x,y,z)$$

$$\begin{bmatrix} x, x+dx \\ y, y+dy \\ z, z+dz \end{bmatrix}$$

$$P(x,y,z)\,dx\,dy\,dz = \Psi^*_{(x,y,z)}\,\Psi_{(x,y,z)}\,dx\,dy\,dz$$

اختصار $\Psi\,\Psi^*\,dz$ بحيث ان تكون الاحتمالية رقم موجب وحقيقي لذلك نضرب بـ complex conjucate

Schrödinger Equation

studied separately 1926 (هايزنبرك + شرودنكر)

درسوه بصورة منفصلة

ميكانيك المصفوفات   ميكانيك الكم (الموجة)

↓

Same theoretical results

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$ (لبعد واحد)

Time independent Schrödinger equation | د بعد واحدة

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

وبصورة ابسط

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

مبدأ ألأدقه

Uncertainty principle

Uncertainty principle

Werner Heisenberg's — ان مقدرتنا للتحديد ووقت محدودية الدقة القياسات

1932 جائزة نوبل

[من غير الممكن معرفة وفي نفس الوقت الموقع والزخم لجسيم ما بدقة -]

$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} \geq \frac{1}{2}\hbar$

$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v) \geq \hbar$

$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v \geq \frac{1}{2}\hbar = \frac{h}{4\pi}$

Δx : الدقة في او الخطأ في قياس الموقع (x)

m : الكتلة

v : السرعة

Δp : دقة قياس الزخم

h : ثابت بلانك

مثال: اذا كانت الدقة في قياس موقع قذيفة هو (5×10^{-26} m) ما هي دقة قياس سرعتها اذا كانت كتلتها هي 1 غم:

$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$

$\boxed{\Delta p \cdot \Delta x \geq \left|\frac{1}{2}\hbar\right|}$

$(m \cdot \Delta v) \cdot \Delta x = \frac{h}{4\pi}$

$(10^{-3}\,kg)(5\times10^{-26}\,m) \cdot \Delta v = \frac{6.626\times10^{-34}\,J \cdot s}{4\times3.14}$

$\Delta v = 1\times10^{-6}\,m/s$

Energy of a particle in a box from De Broglie relation and boundary condition on wavefunction

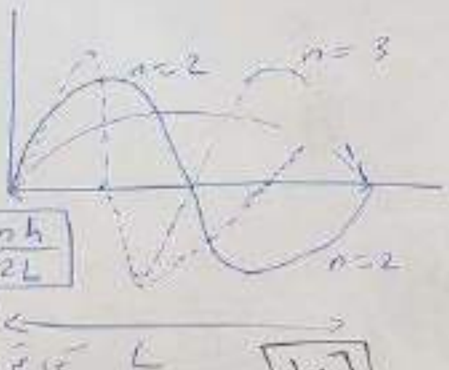
$n=1$ نصف موجة

$n=2$ موجة

$n=3$ موجة ونصف

$L = n \cdot \frac{1}{2}\lambda \qquad n = 1, 2, \ldots$

$\boxed{\lambda = \frac{2L}{n}}$



$\lambda = \frac{h}{p} \qquad p = \frac{h}{\lambda} \qquad \boxed{\therefore p = \frac{nh}{2L}}$

$\because V = 0$ وذلك لانعدام (الطاقة حركية فقط)

$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$

Heisenberg Uncertainty Principle

- Example: Location an Electron.
- The speed of an electron is measured to have a value of $5\times10^{3}\,m/s$ to an accuracy of 0.003% . Find the uncertainty in determining the position of this electron.

Heisenberg Uncertainty Principle

- The momentum of the electron is $p = mv = (9.11\times10^{-31}kg)\cdot(5\times10^{3}m/s)$

  $= 4.56\times10^{-27}kgm/s$
- Since the uncertainty is 0.003% we get $\Delta p = 0.00003p = 1.37\times10^{-31}kgm/s$

Heisenberg Uncertainty Principle

- From the uncertainty principle $\Delta x \Delta p \geq \hbar$

$$\therefore \Delta x \geq \frac{h}{2\pi \Delta p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\, J \cdot s}{2\pi (1.37 \times 10^{-31}\, kgm/s)}$$

$$= 0.77 \times 10^{-3}\, m$$

معادله ديبرولي

De Broglie Equation

de Broglie equation

- Describes wave characteristics of particles

$$\lambda = \frac{\text{Planck's constant}}{\text{momentum}}$$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

$h = 6.626 \times 10^{-34}$ J•s

$J = kg \cdot m^2/s^2$

momentum = mass•velocity

= m • v

mass in kilograms!!!

٢٠

Example problem

Calculate the wavelength (λ) of an electron (e^-) traveling with a velocity of 5.97×10^6 m/s.

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

Angstrom = 10^{-10} m

$m_{e^-} = 9.11 \times 10^{-28}$ g

$$\lambda = \frac{6.626 \times 10^{-34}\ J \cdot s}{9.11 \times 10^{-31}\ kg \cdot 5.97 \times 10^{6}\ m/s}$$

$$\lambda = 1.22 \times 10^{-10}\ m = 1.22\ Å = 0.122\ nm$$

Examples

What is the dBroglie wavelength of an electron travelling at 7×10^{6} m.s^{-1}?

$$\lambda = h/p = 6.63 \times 10^{-34}/9.11 \times 10^{-31} \times 7 \times 10^{6}$$

$$= 1 \times 10^{-10} \text{ m (more or less)}$$

This is similar to the average spacing between atoms in a crystal.

Examples

What is the de Broglie wavelength of a tennis ball (mass 58g) travelling at 10^2 m.s^{-1}?

$\lambda = h/p = 6.63 \times 10^{-34}/0.058 \times 10^2$

$= 1 \times 10^{-34}$ m (more or less)

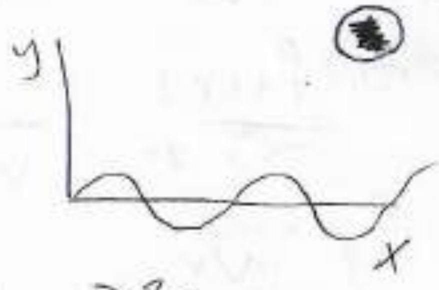
The tennis ball would have to interact with something of a similar size to demonstrate any wave properties!

Remember the nucleus of an atom is around 10^{-15} m, a million, million , million times bigger than this!

معادله شرودنکر

Schrödinger equation

Schrödinger Equation



V_x السرعة

y ارتفاع الموجة

Classical Mechanics $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

t الزمن اللازم للوصول الموجة الى x

الحل هو الاتي

$y = f_1(x) \cdot f_2(t)$

$f_2(t) = A \sin(2\pi \nu t)$

$y = f_1(x) \cdot A \sin(2\pi \nu t)$

نشتق y مرتين بالنسبة الى x بثبوت t

$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = f_2(t) \cdot \frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2}$

نشتق y مرتين بالنسبة الى t و x ثابتة

$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = f_1(x) \cdot (-4\pi^2 \nu^2) \cdot A \sin(2\pi \nu t)$

$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$ معادلة الميكانيك التقليدي (الاولى)

$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot f_1(x) \cdot (-4\pi^2 \nu^2) \cdot A \sin(2\pi \nu t)$

$= \frac{1}{V_x^2} \cdot f_1(x) (-4\pi^2 \nu^2) \cdot f_2(t)$

$\frac{1}{V_x^2} f_2(t) \frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2}$

$$\frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} = \frac{1}{V_x^2} \cdot (-4\pi^2 \nu^2) f_1(x)$$

سرعة

$$\lambda = \frac{V_x}{\nu} = x \qquad x = \lambda = V_x \cdot t = V_x \cdot \frac{1}{\nu} = \frac{V}{\nu}$$

مسافة

مقلوب الزمن

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{\nu^2}{V_x^2}$$

$$\frac{\partial^2 f_1(x)}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} f_1(x) \qquad \boxed{f_1(x) = \psi}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi$$

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

$$\nabla^2 \psi = -\frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2} \psi$$

$$E = E_k + U = \frac{1}{2} m v^2 + U$$

$$m v^2 = 2(E - U)$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi = 0$$

وهذه هي معادلة شرودنجر والتي تطبقه في تفسير سلوك المادة الموجية بنظرية ميكانيك الكم

الان كيف تم التنبؤ بدالة الموجة او دراستها الحل عام 1926
Born.

Ψ $\quad \Psi^{*}$ complex conjucate of Ψ

حاصل ضرب الدالة الموجية (Ψ) بـ Ψ مرافقها يعطي
كثافة الاحتمالية (probability density)

(تعوض i بـ $-i$ المحصول عليها اينما وجدت)

$$P(x) = \Psi(x)\,\Psi^{*}(x)$$

ان $P(x)$ لها خاصية وهي عند ضربها بمدى اي متغير تعطي الاحتمالية فيه .

مثلا على المحور x احتمالية وجود particle بين
$(x, x+dx)$

$$P(x)\cdot d(x) = \Psi(x)\,\Psi^{*}(x)\cdot dx$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \Psi(x)\,\Psi^{*}(x)\,dx$$

total probability $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} = 1$ ← Normalized

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{*}_{(x,y,z)}\,\Psi_{(x,y,z)}\,dx\,dy\,dz = 1$$

$$\therefore\ P(x,y,z) = \Psi^{*}(x,y,z)\,\Psi(x,y,z)$$

المتغيرات ranges

$$\begin{bmatrix} x, x+dx \\ y, y+dy \\ z, z+dz \end{bmatrix}$$

$$P(x,y,z)\,dx\,dy\,dz = \Psi^{*}_{(x,y,z)}\,\Psi_{(x,y,z)}\,dx\,dy\,dz$$

بحيث ان تكون احتمالية رقم موجب وحقيقي لذلك نضرب بـ complex conjucate

اختصار $\Psi\,\Psi^{*}\,dz$

Schrödinger Equation

studied separately 1926 (هايزنبرك + شرودنكر)

درسوه بصورة منفصلة

(ميكانيك الكم (الموجية) ميكانيك المصفوفات

J

Same theoretical results

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$ (لبعد واحد)

Time independent Schrödinger equation | د حقيقة واحدة

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right]$$

$$+V(x,y,z)\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$$

وبصورة ابسط

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z) + V(x,y,z)\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

شروط وفرضيات الداله الموجيه

Conditions and hypothesis of a wave function

ان نظرية او معادلة شرودنكر تعطي معلومات عن

١- موقع الجسم

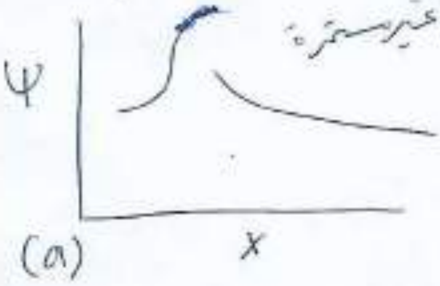
٢- الحصول على المعلومات باستعمال المؤثر operator

٣- المعلومات او النتائج المستحصلة بموجات لا تتناقض مع مبدأ هايزنبرك (اللادقة)

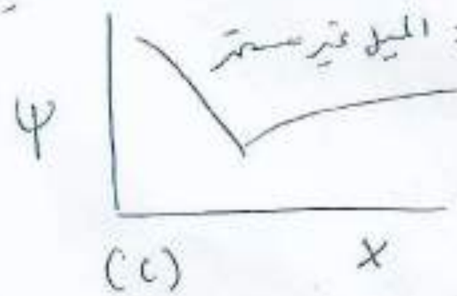
٤- $\Psi\Psi^*$ كثافة الاحتمالية. وهي ضرورية، ذات قيمة واحدة وتكاملها في الفراغ unity $\Psi\Psi^* d\tau = 1$

٥- الدالة الموجية مستمرة. لان مشتقتها الاولى يجب ان تكون محددة والخواص الفيزياوية يجب ان تحدد قيمتها.

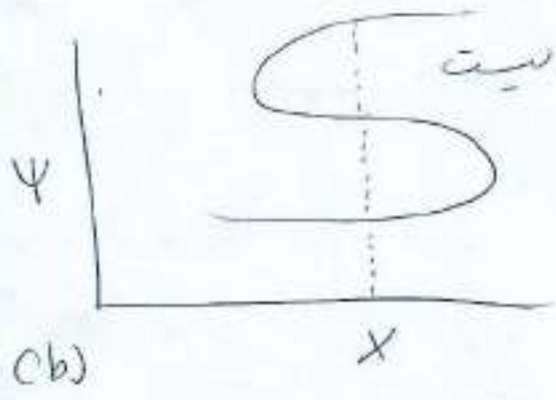
٦- الشروط هي :-



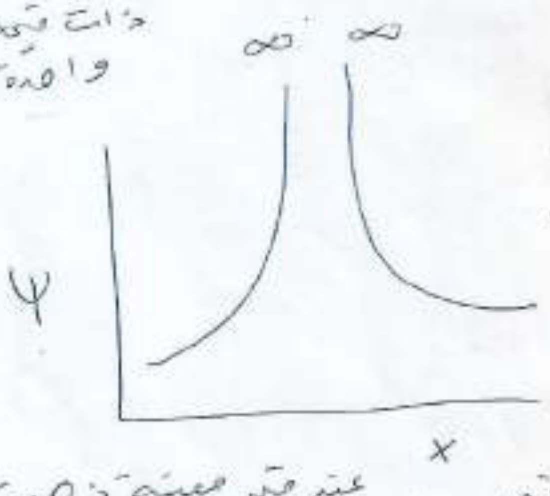
(a) غير مقبولة / غير مستمرة



(c) غير مقبولة : الميل غير مستمر



(b) غير مقبولة :- ليست ذات قيمة واحدة



غير مقبولة : عند قيم معينة تصبح الحل ∞

REQUIREMENTS FOR AN ACCEPTABLE WAVEFUNCTION

1. The wave function ψ **must be continuous.** All its **partial derivatives must also be continuous** (partial derivatives are $\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}$ etc.). This makes the wave function "smooth".

2. The wave function ψ must be **quadratically integrable**. This means that the integral $\int \psi^* \psi \, d\tau$ must exist.

3. Since $\int \psi^* \psi \, d\tau$ is the probability density, **it must be single valued.**

4. The wave functions must form an **orthonormal set.** This means that
   - the wave functions must be **normalized.**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \ \psi_i \, d\tau = 1$$

   - the wave functions must be **orthogonal.**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \ \psi_j \, d\tau = 0$$

OR $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \ \psi_j \, d\tau = \delta_{ij}$ where $\delta_{ij} = 1$ when $i = j$ and $\delta_{ij} = 0$ when $i \neq j$

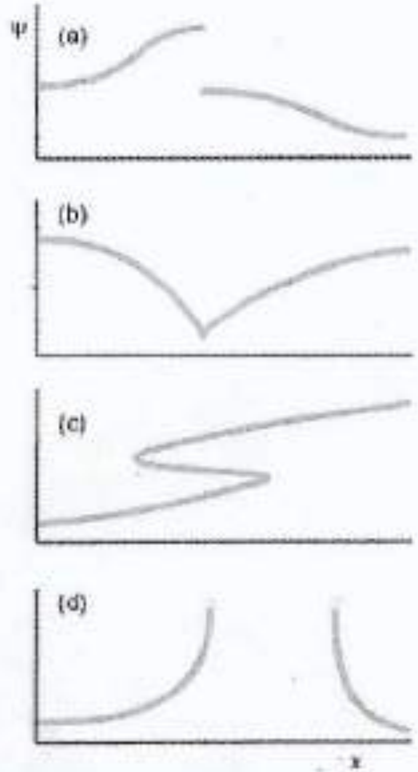
δ_{ij} is called Kronecker delta

5. The wave function must be **finite everywhere.**

6. The wave function must satisfy the **boundary conditions** of the quantum mechanical system it represents.

Properties of an Acceptable Wavefunction

- The wavefunction must be
  - Continuous
  - Single-valued
  - No singularities
  - Continuous first derivatives



A unitary operator preserves the ``lengths'' and ``angles'' between vectors, and it can be considered as a type of rotation operator in abstract vector space. Like Hermitian operators, the eigenvectors of a unitary matrix are orthogonal. However, its eigenvalues are not necessarily real.

Postulates of Quantum Mechanics

In this section, we will present six postulates of quantum mechanics. Again, we follow the presentation of McQuarrie [1], with the exception of postulate 6, which McQuarrie does not include. A few of the postulates have already been discussed in section 3.

Postulate 1. The state of a quantum mechanical system is completely specified by a function $\Psi(r, t)$ that depends on the coordinates of the particle(s) and on time. This function, called the wave function or state function, has the important property that $\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)d\tau$ is the probability that the particle lies in the volume element $d\tau$ located at $\mathbf{r}$ at time t.

The wavefunction must satisfy certain mathematical conditions because of this probabilistic interpretation. For the case of a single particle, the probability of finding it *somewhere* is 1, so that we have the normalization condition

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)d\tau = 1 \tag{110}$$

It is customary to also normalize many-particle wavefunctions to 1.[2] The wavefunction must also be single-valued, continuous, and finite.

Postulate 2. To every observable in classical mechanics there corresponds a linear, Hermitian operator in quantum mechanics.

This postulate comes about because of the considerations raised in section 3.1.5: if we require that the expectation value of an operator $\hat{A}$ is real, then $\hat{A}$ must be a Hermitian operator. Some common operators occuring in quantum mechanics are collected in Table 1.

Table 1: Physical observables and their corresponding quantum operators (single particle)

اسم المشاهدة	رمز المشاهدة	رمز المؤثر	المؤثر
Position الموضع	$\underline{r}$	$\hat{r}$	**Multiply by** $\underline{r}$
Momentum كمية الحركة	$\mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{p}}$	$-i\hbar\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x}+\hat{j}\frac{\partial}{\partial y}+\hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$
Kinetic energy الطاقة الحركية	T	$\hat{T}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$
Potential energy الطاقة الكامنة	$V(\mathbf{r})$	$\hat{V}(\mathbf{r})$	**Multiply by** $V(\mathbf{r})$
Hamiltonian الهاملتوني	H	$\hat{H}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\mathbf{r})$
Total energy الطاقة الكلية	E	$\hat{E}$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
Angular momentum كمية الحركة الزاوية المدارية	l_x	$\hat{l}_x$	$-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$

(الاندفاع الزاوي)			
	l_y	$\hat{l}_y$	$-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$
	l_z	$\hat{l}_z$	$-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

Postulate 3. In any measurement of the observable associated with operator $\hat{A}$, the only values that will ever be observed are the eigenvalues a, which satisfy the eigenvalue equation

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \tag{111}$$

This postulate captures the central point of quantum mechanics--the values of dynamical variables can be quantized (although it is still possible to have a continuum of eigenvalues in the case of unbound states). If the system is in an eigenstate of $\hat{A}$with eigenvalue a, then any measurement of the quantity Awill yield a.

Although measurements must always yield an eigenvalue, the state does not have to be an eigenstate of $\hat{A}$*initially*. An arbitrary state can be expanded in the complete set of eigenvectors of $\hat{A}$($\hat{A}\Psi_i = a_i\Psi_i$) as

$$\Psi = \sum_i^n c_i\Psi_i \tag{112}$$

where n may go to infinity. In this case we only know that the measurement of A will yield *one* of the values a_i, but we don't know which one. However, we do know the *probability* that eigenvalue a_i will occur--it is the absolute value squared of the coefficient, $|c_i|^2$ (cf. section 3.1.4), leading to the fourth postulate below.

An important second half of the third postulate is that, after measurement of Ψ yields some eigenvalue a_i, the wavefunction immediately "collapses" into the corresponding eigenstate Ψ_i (in the case that a_i is degenerate, then Ψ becomes the projection of Ψ onto the degenerate subspace). Thus, measurement affects the state of the system. This fact is used in many elaborate experimental tests of quantum mechanics.

Postulate 4. If a system is in a state described by a normalized wave function Ψ, then the average value of the observable corresponding to $\hat{A}$ is given by

$$< A >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau \qquad (113)$$

Postulate 5. The wavefunction or state function of a system evolves in time according to the time-dependent Schrödinger equation

$$\hat{H}\Psi(r,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad (114)$$

The central equation of quantum mechanics must be accepted as a postulate, as discussed in section 2.2.

Postulate 6. The total wavefunction must be antisymmetric with respect to the interchange of all coordinates of one fermion with those of another. Electronic spin must be included in this set of coordinates.

The Pauli exclusion principle is a direct result of this *antisymmetry principle*. We will later see that Slater determinants provide a convenient means of enforcing this property on electronic wavefunctions.

تطبيقات الفرضيات

Normalize the wavefunction $\psi = \frac{1}{?} e^{-r/a_0}$

i.e find $N \rightarrow \psi = N \cdot e^{-r/a_0}$

$$\int \psi \psi^* d\tau = 1 \rightarrow \int N \cdot e^{-r/a_0} \cdot N \cdot e^{-r/a_0} \cdot d\tau = 1$$

$$1 = N^2 \int_0^{\infty} r^2 \cdot e^{-2r/a_0} \cdot dr \int_0^{\pi} \sin\theta \cdot d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$1 = N^2 \left(\frac{a_0^3}{4}\right)(2)(2\pi) = N^2 \cdot \pi \cdot a_0^3$$

$$N = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \longrightarrow \boxed{\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \cdot e^{-r/a_0}}$$

الاحتمالية

The wavefunction of an electron in the lowest energy state of a hydrogen atom is $\propto e^{-r/a_0}$

اوجد احتمالية وجود الالكترون في $1pm^3$ (a) في النواة

(b) على مسافة a_0 منها

$$P \propto \psi \psi^* dV = e^{-r/a_0} \cdot e^{-r/a_0} \cdot dV$$

$$P = e^{-2r/a_0} \cdot (1pm^3)$$

(a) $r = 0 \longrightarrow P = e^{-2(0)/a_0}(1) = e^{0} \cdot (1) = 1.00$

(b) $r = a_0 \longrightarrow P = e^{-2}(1pm^3) = 0.14(1) = 0.14$

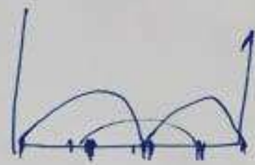
$$P_{(a)} / P_{(b)} = (1)/(0.14) = 7.1$$

الاحتمالية في النواة سبعة مرات الاحتمالية على بعد a_0 منها
لانه سالب ويريد ان ينجذب اليها.

$\psi = \sin \frac{n\pi x}{a}$

$P = \frac{2}{a}\int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a}\, dx$

$P = \frac{2}{a} \int_0^a \frac{1}{2}\left[1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}\right] dx$



$P = \frac{1}{a} \left[dx - \cos \frac{2n\pi x}{a} dx\right]_0^a$

$P = \frac{1}{a}\left[x - \frac{a}{2n\pi} \sin 2n\pi x\right]$

$P = \frac{1}{a}\left[x - \frac{a}{2n\pi} \frac{\sin 2n\pi x}{a}\right]_0^{3a}$ 3

$P = \frac{1}{a}\left[a - 0 - [0 - 0]\ \right]$ ~~1st~~ $\frac{a}{4}$

$P = \frac{1}{a}\left[x - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a}\right]_{a/4}^{3a/4}$

$= \left[\frac{x}{a} - \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a}\right]_{\frac{a}{4}}^{\frac{3a}{4}}$

$(0.75 - 0.25) - ($

$P = 0.\cancel{25}$

$2 \times 1 \times 0.25$

$\sin \frac{2 \times 1 \times 0.75\, a \cdot \pi}{a}$

$\sin 1.5\pi -$

Evaluate the root mean square $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ of an electron from the nucleous in the hydrogen atom $\Psi = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}}} e^{-r/a_0}$

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^\infty \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \cdot e^{-r/a_0} \cdot r^2 \cdot r^2 \cdot \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0} \, dr$$

$$\int_0^\pi \sin\theta \cdot d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{\pi a_0^3} \int r^4 \cdot e^{-2r/a_0} \cdot dr \, (2)(2\pi)$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{\pi a_0^3} \times \frac{4\times3\times2\times1}{\frac{2\times2\times2\times2\times2}{a_0^5}} (2)(2\pi)$$

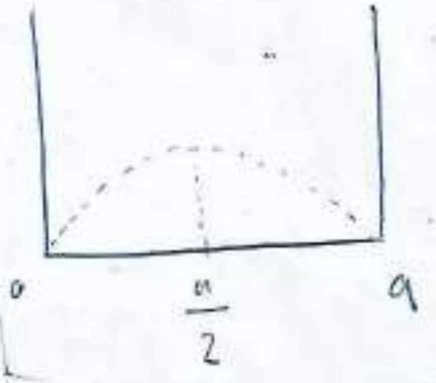
$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{\pi a_0^3} \times \frac{3 a_0^5}{4} \times 4\pi = 3 a_0^2$$

$$\langle r^2 \rangle = 3 a_0^2$$

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = \sqrt{3}\, a_0 = (3)^{1/2} \cdot (52.9) = 91.6 \text{ pm}$$

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = \boxed{91.6 \text{ pm}}$$

10.



In spherical / coordinates
polar

$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$

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

$z = r \cdot \cos\theta$

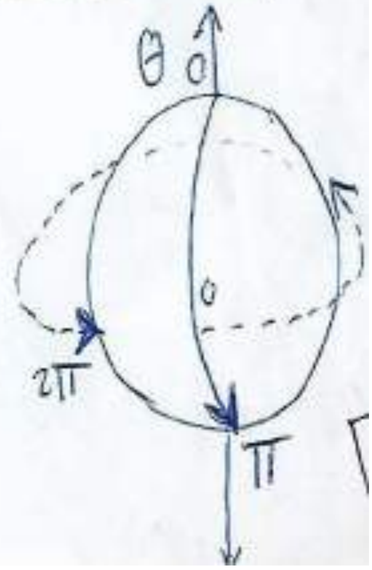
$$d\tau = r^2 \cdot \sin\theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\phi$$

يمكن تغطية سطح الكرة (تكامل):

بتدوير θ من $0 \leftarrow \pi$ (اكمل قوس)

بعدها ندور القوس الناتج من $0 \leftarrow 2\pi$

ϕ (ϕ)



$\int^{\pi} \theta \int^{2\pi} \phi$

اوجد معدل البعد (average position) لجسيم في صندوق اذا كانت الدالة الموجية هي

$$\psi = \left(\frac{2}{a}\right) \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$\hat{O} = \hat{X} = x$$

$$\langle x \rangle = \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot x \cdot \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a}\, dx$$

$$z = \frac{n\pi x}{a}$$

$$\frac{dz}{dx} = \frac{n\pi}{a}$$

$$dx = \frac{a}{n\pi} \cdot dz$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a}\, dx$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0^a z \cdot \sin^2 z \cdot dz$$

$x = 0 \rightarrow z = 0$
$x = a \rightarrow z = n\pi$

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0^{n\pi} z \cdot \sin^2 z \cdot dz$$

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right) = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a^2}{n^2\pi^2}\right)\left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right)$$

$$\langle x \rangle = \left(\frac{a}{2}\right)$$ منتصف potential well صندوق الدقيقة

تقضي الدقيقة وقتها $\left(\frac{a}{2}\right)$ على طرفي المركز لانها متناظرة عند $n=1$

معادلات جسم في صندوق الجهد

Particle in a box problem

Energy of a particle in a box from De Broglie relation and boundary condition on wavefunction

$n=1$ عقدة موجية $n=3$

$n=2$ موجية

موجية وعقدة

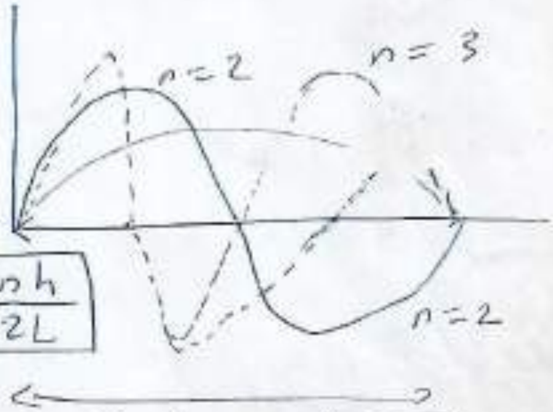
$L = n \cdot \frac{1}{2} \lambda$ $n = 1, 2, \ldots$

$$\boxed{\lambda = \frac{2L}{n}}$$

$\lambda = \frac{h}{p}$ $p = \frac{h}{\lambda}$ $$\boxed{\therefore p = \frac{nh}{2L}}$$

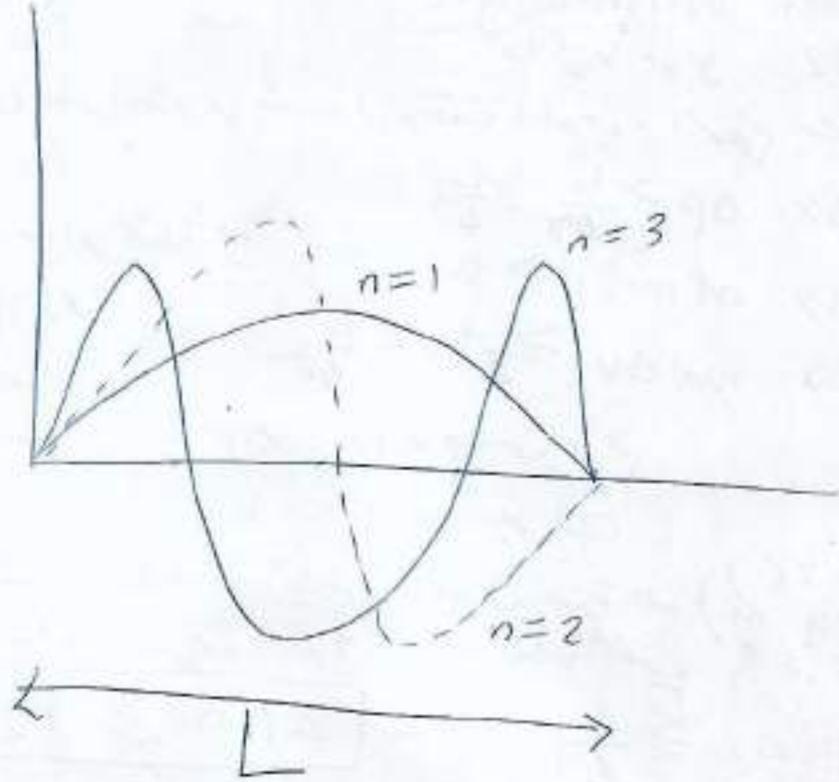
$\therefore V = 0$ داخل الصندوق

الطاقة حركية فقط



$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ كما تم اشتقاقها سابقا

١٠٦

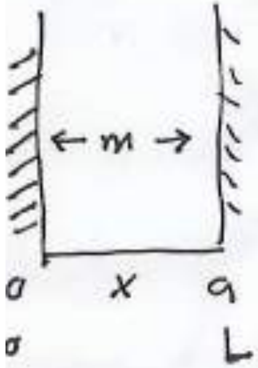


number of nodes = n − 1

n = 1 zero node
n = 2 1 nodes
n = 3 2 nodes

particle in abox

حركة جسيم في صندوق ذو جهد



$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} x + B\cos\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} x$$

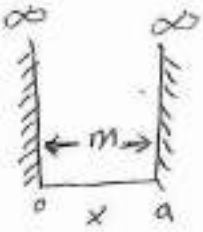
Boundary condition: ψ(x) = 0 when x=0:→B=0

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} x$$

Boundary condition: ψ(x) = 0 when x=L:

$$\psi(0) = A\sin\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} L = 0 \Longrightarrow E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

particle in one-dimensional box [redacted]



الدالة الموجية للجسيم بين $x = 0$
$x = a$ لحركة الجسيم

حيث $V = 0$ داخل الصندوق

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + E\Psi = 0$$

الحل العام للمعادلة -

$$\Psi = A\sin\left(\frac{2mE}{\hbar}\right)^{1/2}x + A'\cos\left(\frac{2mE}{\hbar}\right)^{1/2}x$$

الجسم خارج الصندوق $(x = a)$ يساوي ∞

لذلك تكون $\Psi = 0$ عندما $V = \infty$

من ميكانيك الكم

For Ψ to be zero at $x = 0$, $x = a$

at $x = 0$ A' must be zero

at $x = a$ $\longrightarrow \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} = n\pi$

Because $\sin n\pi = 0$

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} a = n\pi$$

{ First / second } boundary conditions

$$\frac{2mE}{\hbar^2}a^2 = n^2\pi^2$$

(معادلة طاقة الجسيم في الصندوق) | [illegible]

١٦٥

$\frac{2mE \times 4\pi^2}{h^2} a^2 = n^2 \pi^2$ (55) 2

الطاقة مكممة

$$\boxed{E = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}}$$

$n = 1, 2, 3$ / quontized

no zero point energy.

$n = 1 \quad E = \frac{h^2}{8ma^2}$

Q. $\Psi = 0$ شرط

$\Psi = A \sin \frac{n\pi x}{a}$

$x = 0$
$x = a$
الاحتمالية للتواجد بين ... هي واحد unity

$$1 = \int_0^a \psi^* \psi \, dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx$$

$$= \frac{A^2 a}{\pi} \int_0^{\pi} \sin^2(n\alpha) d\alpha \quad \left[\alpha = \frac{\pi x}{a}\right]$$

$$\int_0^{\pi} \sin^2(n\alpha) d\alpha = \frac{\pi}{2}$$

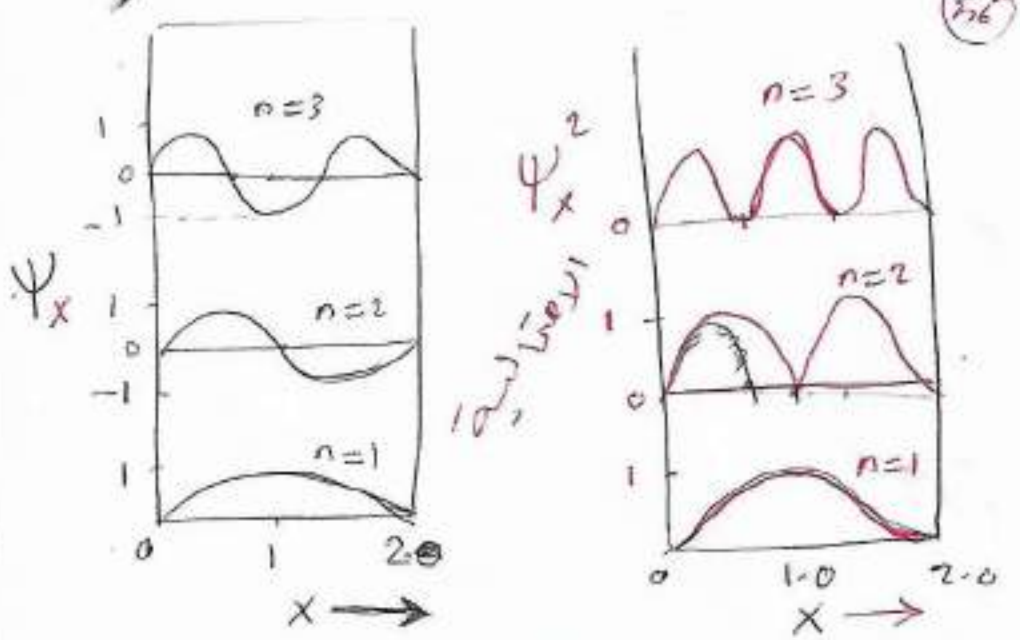
$\frac{d\alpha}{dx} = \frac{\pi}{a}$

$dx = \frac{a}{\pi} d\alpha$

$\psi \psi^*$ → real and equall ψ^2

$$1 = \frac{A^2 \cdot a}{\pi} \times \frac{\pi}{2}$$

$$A = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}$$



رسم دالة الموجة ومربعها

probability = $\Psi \cdot \Psi^*$

مثال وضع الكترون في صندوق Box ذو بعد طول L . احسب فرق الطاقة بين n=1 و n=2

عندما ① L = 1 Å ② L = 10 cm

① عندما L = 1 Å = 1×10^{-8} cm

② عندما L = 10 cm

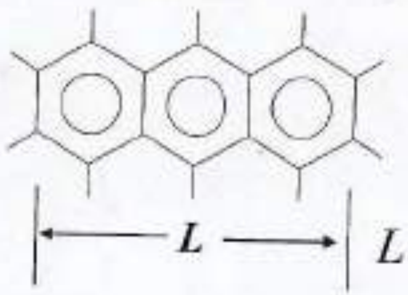
$n=1 \quad E_1 = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{(1)^2 \times (6.63 \times 10^{-27})^2}{8 \times 9.108 \times 10^{-28} g \times (1 \times 10^{-8})^2}$

$E_1 = 6.0 \times 10^{-11}$

$n=2 \quad E_2 = 24 \times 10^{-11} = \frac{(2)^2 (6.63 \times 10^{-27})^2}{8 \times 9.108 \times 10^{-28} \times (1 \times 10^{-8})^2}$

$E_2 - E_1 = (24-6) \times 10^{-11} = 1.8 \times 10^{-10}$ erg

Particle in a Box → Simple model of molecular energy levels.

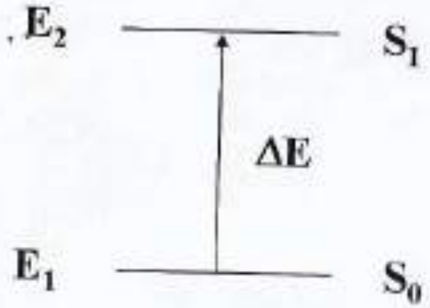


$L \approx 6$ Å

Anthracene

π electrons – consider "free" in box of length L.

Ignore all coulomb interactions.



Calculate wavelength of absorption of light.

Form particle in box energy level formula

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

$m = m_e = 9\times10^{-31}$ kg

$L = 6$ Å $= 6\times10^{-10}$ m

$h = 6.6\times10^{-34}$ Js

$\Delta E = 5.04\times10^{-19}$ J

$\Delta E = h\nu$

$\nu = \Delta E / h = 7.64\times10^{14}$ Hz

$\lambda = c/\nu = 393$ nm blue-violet

Experiment $\Rightarrow$ 400 nm

particle in a box $\quad n = 1, 2, 3 \ldots$

Two adjacent energy levels $\quad n, n+1$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \qquad E_{n+1} = \frac{(n+1)^2 h^2}{8ma^2}$$

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{h^2}{8ma^2} \qquad 2.2$$

اشتقاق

Zero point energy $n = 1$

if $L = 1\ nm$

Zero point energy for electron $= 6 \times 10^{-20}\ J$

$n=2 \leftarrow n=1$ اقل طاقة تنشيط من

$1.8 \times 10^{-19}\ J \sim 1.1\ eV$

احسب طاقة اثارة النواة (البروتون) الموجود في منطقة

بعد طوله مقارب الى قطر النواة (1fm)

in one dimensional infinite square well

الجواب (0.6 GeV)

1fm =

الدالة الموجية لجسيم في صندوق البعد واحد

$$\Psi = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Q1: what is the ground state energy for an electron that is confined to a potential well with a width of 0.2 nm

$$E = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{(6.626\times10^{-34})^2 \times (1)^2}{8\times 9.11\times10^{-31}\times(0.2\times10^{-9})^2}$$

$$= 1.506\times10^{-18}\ J$$

$$= \frac{1.506\times10^{-18}\times 6.022\times10^{23}\ mole^{-1}}{1000\ J.KJ}$$

$$= 907\ KJ/mole$$

Q.2. Calculate the energy between the first two level ($n=0$, $n=1$) for the following

1. 50 gm golf ball constrained to 100m fairway
2. An (α-particle) (He-nucleaus) moving in 10 m accelerator tube
3. An electron in 1.5 A° (1.5×10^{-10} m) bond

$E_0 = 0$

$$m_{\alpha\ particle} = \frac{4\times10^{-3}\ kg}{6.022\times10^{23}} = 6.64\times10^{-27}$$

الكترون يوجد في جزيئة ذات طول يساوي 1 nm

احسب (1) اقل طاقة ممكنة ان يمتلكها الالكترون

(2) اقل طاقة لازمة لاثارة الالكترون من المستوى (1)

(3) احتمالية وجود الالكترون في منتصف الجزيئة بين اعلاه

$x = 0.49$ nm $\quad x = 0.51$ nm

(4) ما هي احتمالية وجود الالكترون بين $x = 0$

$x = 0.2$ nm

(1) min. energy $n = 1$ $\quad E = \dfrac{(1)^2 (h)^2}{8 \times 9.1 \times 10^{-31} \times (1 \times 10^{-9})^2}$

$= 6.024 \times 10^{-20}$ J

$= 36.28$ kJ/mole

(2) اقل طاقة لاثارة من $n=1$ $\quad E_2 \leftarrow E_1$

$n = 2$

$E_2 = \dfrac{(2)^2 (h^2)}{8 \times 9.11 \times 10^{-31} \times}$

$= 24.096 \times 10^{-20}$ J $= 145.1$ kJ/mole

$\Delta E = E_2 - E_1 = 145.1 - 36.28 = 108.8$ kJ/mole

(3) $\psi^2_{(L)} \, dL \quad L = x, y, z$

$dL = 0.02$ nm $\quad$ معدل $\left\{ \begin{matrix} 0.49 \\ 0.51 \end{matrix} \right.$ 0.5 nm

$= \left(\dfrac{2}{1.0 \times 10^{-9} \, m}\right) \sin^2\left(\dfrac{0.5 \times \pi}{1.0 \times 10^{-9}}\right)(0.02)$

$= 0.04 \quad \psi\psi = \dfrac{2}{a} \sin^2\left(\dfrac{n \pi x}{a}\right)$

(4) $\int_{0}^{a} = \int_{x=0\,nm}^{x=0.2\,nm} \psi^2_{(L)}\, dL = \int_{0}^{0.2} \frac{2}{1\times10^{-9}} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dL$

$$= 2\times10^{9} \left[\frac{1}{2}x - \left(\frac{1.0\,nm}{4\pi}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{1.0}\right) \right]_{0}^{0.2}$$

$$= 2\times10^{9} \left[\frac{1}{2}\times0.2 - \left(\frac{1.0}{2\pi}\right) \sin\left(\frac{0.4\pi}{1.0}\right) \right]$$

(59)

$$= 0.0486$$

الدالة الموجية للإلكترون عند الحالة المستقرة في ذرة الهيدروجين هي

$$\psi_{(1)} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

حيث $a_0 = 0.53$ Å أوجد احتمالية وجود الإلكترون داخل كرة صغيرة ذات حجم $1\,pm^3 = 0.1$ Å^3 ($\frac{1}{100}$ من حجم ذرة الهيدروجين)

$\psi^2_{(r)}\, dV$ الاحتمالية (ج)

(a) على النواة $r = 0$

$$\left[\psi^2_{(r)} dV\right]_{r=0} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) dV = \frac{1}{(53)^3 \cdot \pi \cdot pm^3} \times 1\,pm^3$$

$$= 2.14\times10^{-6}$$

(b) على بعد 50 pm من النواة فإن احتمالية وجود الإلكترون ←

$$\left[\psi^2_{(r)}\,dv\right]_{r=50} = \left[\frac{1}{(53)^2\,\pi\,pm^3}\right]\left[\exp\left(2\left(-\frac{50}{53}\right)\right)1\,pm^3\right]$$

$$= 2.14\times10^{-6}\exp(-1.89)$$

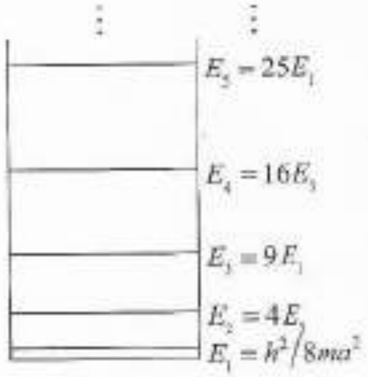
$$= 3.24\times10^{-7}$$

(60)

$$\psi^2_{(r)}\,dv = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\exp^{-r/a_0}\cdot\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\exp^{-r/a_0}$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\exp^{-2r/a_0}$$

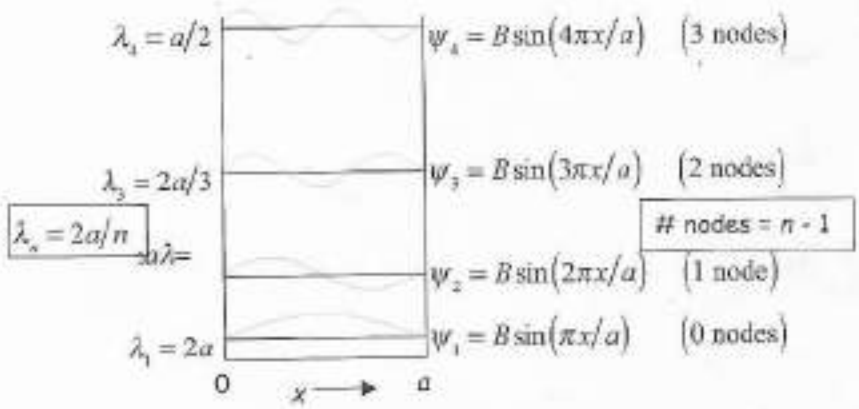
(a) The energy spacing between successive states gets progressively larger as n increases



$$E_{n+1} - E_n = \left[(n+1)^2 - n^2\right]\frac{h^2}{8ma^2}$$

$$\boxed{E_{n+1} - E_n = (2n+1)E_1}$$

(b) The wavefunction $\psi(x)$ is sinusoidal, with the number of nodes increased by one for each successive state



(c) The energy spacings increase as the box size decreases.

$$E \propto \frac{1}{a^2}$$

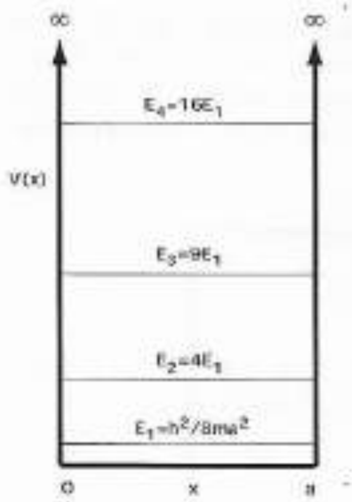


Figure 1. Potential well and lowest energy levels for particle in a box.

This potential is represented by the dark lines in Fig. 1. Infinite potential energy constitute an impenetrable barrier. The particle is thus bound to a *potential well.* Since the particle cannot penetrate beyond $x = 0$ or $x = a$,

$$\psi(x) = 0 \quad \text{for} \quad x < 0 \quad \text{and} \quad x > a \tag{10}$$

By the requirement that the wavefunction be continuous, it must be true as well that

$$\psi(0) = 0 \quad \text{and} \quad \psi(a) = 0 \tag{11}$$

which constitutes a pair of boundary conditions on the wavefunction *within* the box. Inside the box, $V(x) = 0$, so the Schrödinger equation reduces to the free-particle form (1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\,\psi(x), \qquad 0 \le x \le a \tag{12}$$

We again have the differential equation

$$\psi''(x) + k^2\,\psi(x) = 0 \qquad \text{with} \qquad k^2 = 2mE/\hbar^2 \tag{13}$$

The general solution can be written

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \tag{14}$$

The first few eigenfunctions and the corresponding probability distributions are plotted in Fig. 2. There is a close analogy between the states of this quantum system and the modes of vibration of a violin string. The patterns of standing waves on the string are, in fact, identical in form with the wavefunctions (24).

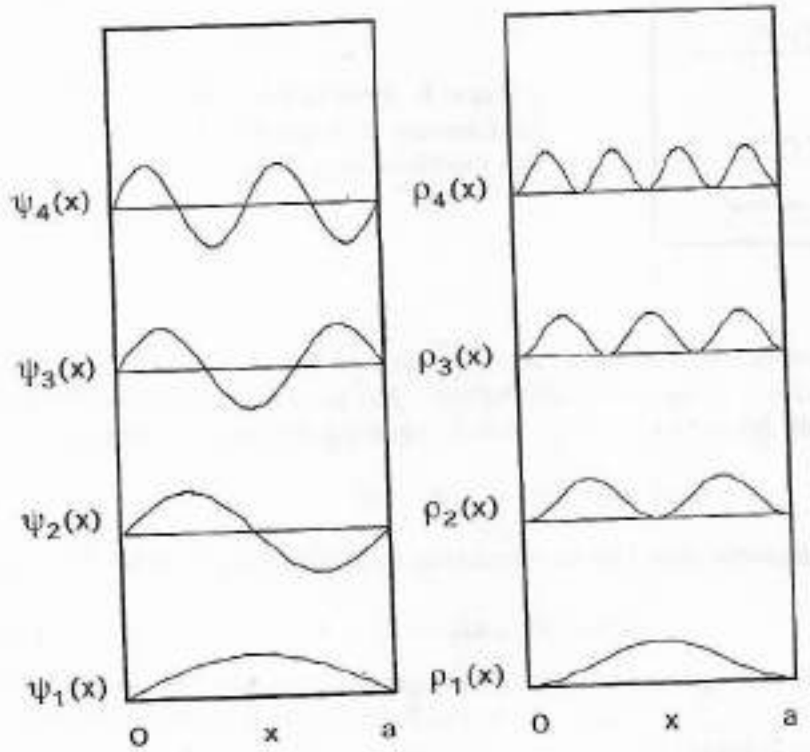


Figure 2. Eigenfunctions and probability densities for particle in a box.

A significant feature of the particle-in-a-box quantum states is the occurrence of *nodes*. These are points, other than the two end points (which are fixed by the boundary conditions), at which the wavefunction vanishes. At a node there is exactly zero probability of finding the particle. The nth quantum state has, in fact, $n-1$ nodes. It is generally true that the number of nodes increases with the energy of a quantum state, which can be rationalized by the following qualitative argument. As the number of nodes increases, so does the number and steepness of the 'wiggles' in the wavefunction. It's like skiing down a slalom course. Accordingly, the average curvature, given by the second derivative, must increase. But the second derivative is proportional to the kinetic energy operator. Therefore, the more nodes, the higher the energy. This will prove to be an invaluable guide in more complex quantum systems.

Another important property of the eigenfunctions (24) applies to the integral over a product of two *different* eigenfunctions. It is easy to see from Fig. 3 that the integral

$$\int_0^a \psi_2(x)\,\psi_1(x)\,dx = 0$$

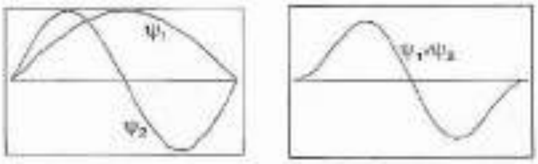


Figure 3. Product of n=1 and n=2 eigenfunctions.

To prove this result in general, use the trigonometric identity

$$\sin\alpha\,\sin\beta = \frac{1}{2}[\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)]$$

to show that

$$\int_0^a \psi_m(x)\,\psi_n(x)\,dx = 0 \quad \text{if} \quad m \neq n \tag{25}$$

This property is called *orthogonality*. We will show in the Chap. 4 that this is a general result for quantum-mechanical eigenfunctions. The normalization (22) together with the orthogonality (25) can be combined into a single relationship

$$\int_0^a \psi_m(x)\,\psi_n(x)\,dx = \delta_{mn} \tag{26}$$

in terms of the *Kronecker delta*

$$\delta_{mn} \equiv \begin{cases} 1 \text{ if } m = n \\ 0 \text{ if } m \neq n \end{cases}$$

اوجد معدل البعد (average positron) لجسيم في صندوق احادي البعد

الدالة الموجية هي $\Psi = \left(\frac{2}{a}\right) \sin \frac{n\pi x}{a}$

$$\hat{O} = \hat{X} = x \qquad \langle x \rangle = \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot x \cdot \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a}\, dx$$

$$z = \frac{n\pi x}{a}$$

$$\frac{dz}{dx} = \frac{n\pi}{a} \qquad \langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a}\, dx$$

$$dx = \frac{a}{n\pi} \cdot dz \qquad \langle x \rangle = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0 z \cdot \sin^2 z \cdot dz$$

$$\left.\begin{array}{l} x = 0 \rightarrow z = 0 \\ x = a \rightarrow z = n\pi \end{array}\right] \langle x \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0^{n\pi} z \cdot \sin^2 z \cdot dz$$

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right) = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a^2}{n^2\pi^2}\right)\left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right)$$

$\langle x \rangle = \left(\frac{a}{2}\right)$ حيث ان الدقيقة محصورة بـ Potential Well

تقضي نصف وقتها $\left(\frac{a}{2}\right)$ على طرفي المركز لانها متناظرة عند $n=1$

Particle in three dimensional box

توصف الحركة بمعادلة شرودنجر

partial differential equation

تحل بطريقة فصل المتغيرات حيث ان الدالة Ψ هي

حاصل ضرب الدوال الثلاث

$$\Psi(x,y,z) = X\cdot\Psi(x)\, Y\Psi(y)\, Z\Psi(z)$$

نعوض في معادلة شرودنجر ونقسم على

$X(x)\,Y(y)\,Z(z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right]$$ + ~~V(x,y,z)~~

$$+ V(x,y,z)\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$$

$\Psi(x,y,z)$ wave function

$V(x,y,z)$ potential function

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{d^2X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)}\cdot\frac{d^2Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{Z(z)}\cdot\frac{d^2Z(z)}{dz^2}\right] = E$$

حيث ان V هي صفر في اي مكان داخل الصندوق

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$E_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{d^2X(x)}{dx^2}\right]$$

$$E_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{Y(y)}\cdot\frac{d^2Y(y)}{dy^2}\right]$$

$$E_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{Z(z)}\cdot\frac{d^2Z(z)}{dz^2}\right]$$

وهي تشبه معادلات الحركة في اتجاه

واحد

$$X(x) = A_x \sin \frac{n_1 \pi x}{a} = A_x \sin \left(\frac{2mE_x}{\hbar^2} \right) x$$

$$Y(y) = A_y \sin \frac{n_2 \pi y}{b} = A_y \sin \left(\frac{2mE_y}{\hbar^2} \right) y$$

$$Z(z) = A_z \sin \frac{n_3 \pi z}{c} = A_z \sin \left(\frac{2mE_z}{\hbar^2} \right) z$$

a, b, c length of the box sides in the x, y, z directions n_1, n_2, n_3 quantum numbers

مستويات الطاقة المسموحة هي

$$E = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

if the box is cube $a = b = c$ So

$$E = \frac{h^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

كل رقم كمي يعطي طاقة واحدة بالنسبة الى
one dimensional box

بينما هنا وجود عدة مستويات بنفس الطاقة

n_1	n_2	n_3
1	1	2
1	2	1
2	1	1

} تعطي نفس الطاقة الكلية $\Longrightarrow$ Degeneracy الانحلال

different States of system
different wave functions

حركه الجسم الحر

The free particle

66

(1) The free particles مسألة الجسيم الحر

نفترض جسم كتلته m يتحرك بسرعة v وطاقته الكامنة $U = 0$

معادلة شرودنكر

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\psi = 0$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \psi = 0$$

بالقسمة على ψ

$$\frac{1}{\psi}\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E = 0$$

الطاقة الكلية تجزأ لمركباتها

$$E = E_x + E_y + E_z \longrightarrow$$

$$\psi = \psi_x \, \psi_y \, \psi_z \longrightarrow$$

نفرض

نتج

$$\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m E_x}{h^2}\right) + \left(\frac{1}{\psi_y}\frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + \frac{8\pi^2 m E_y}{h^2}\right) + \left(\frac{1}{\psi_z}\cdot\frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m E_z}{h^2}\right) = 0$$

كل حد بين قوسين هو دالة لمتغير واحد فقط

حل المعادلة اعلاه هو

$$\psi_x = A_x \sin\left(\frac{2\pi x}{h}\sqrt{2mE_x}\right)$$

$$\psi_y = A_y \sin\left(\frac{2\pi y}{h}\sqrt{2mE_y}\right)$$

$$\psi_z = A_z \sin\left(\frac{2\pi z}{h}\sqrt{2mE_z}\right)$$

حيث A_x, A_y, A_z هي ثوابت وللحصول على الحل نطبق الشروط الحدودية .....

متوحد

Boundary condition

$$E_x = \frac{1}{2} m v_x^2 \qquad E_y = \frac{1}{2} m v_y^2 \qquad E_z = \frac{1}{2} m v_z^2$$

حيث ان V_x ، V_y ، V_z مركبات السرعة (

لذلك يتبين ان خواص دوال الموجة ψ هي حاصل ضرب
الحلول المعادلات الثلاثة

$$E = \frac{1}{2} m (V_x^2 + V_y^2 + V_z^2) = \frac{1}{2} m V^2$$

$$U = 0 \rightarrow K.E = \text{total energy.}$$