*** مطالب کوانتومی ۲:

* ضرایب کلبش گوردن:

$\vec{J}_1, \vec{J}_2$

$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \longrightarrow |j_2, m_2\rangle$

$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \Longrightarrow$ پایه قدیم

$\vec{J}_1 \longrightarrow |j_1, m_1\rangle$

$\vec{J} \longrightarrow |j, m\rangle \equiv |j_1, j_2, jm\rangle$ پایه جدید

① ضرایب حقیقی باشند و بزرگترین آن مثبت باشد.

$$|jm\rangle = \sum_{m_1,m_2} |j_1, j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | jm\rangle$$

ضرایب کلبش گوردن

$j_1 = \frac{1}{2} \qquad j_2 = \frac{1}{2}$

$m_1 = \pm\frac{1}{2} \qquad m_2 = \pm\frac{1}{2}$

پایه‌ها جدید

$j=0$	$j=1$
$m=0$	$m=0,\pm 1$
$\vert 00\rangle$ (singlet)	(triplet)
	$\vert 1,-1\rangle$
	$\vert 1,0\rangle$
	$\boxed{\vert 1,1\rangle}$

$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1,1\rangle = 1$

$|1,1\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$

$J_- |1,1\rangle = \bigcirc |1,0\rangle =$

$= (J_{1-} + J_{2-}) |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$

$= \bigcirc |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \bigcirc |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle$

$|1,+1\rangle = |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$

$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$

$|1,-1\rangle = |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

$|00\rangle = a|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + b|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$

$m = m_1 + m_2$

$\boxed{j_1 = 1} \quad \boxed{j_2 = 1}$

سوال بهنجارش

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}} \quad b=\frac{1}{\sqrt{2}} \Longleftarrow \begin{cases} a^2+b^2=1 \longleftarrow \{\langle 00|00\rangle=1 \\ \frac{a}{\sqrt{2}}+\frac{b}{\sqrt{2}}=0 \longleftarrow \langle 00|10\rangle=0 \end{cases}$$

$$|00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle-\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle$$

* اتم هیدروژن:

$$\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$$

$|L,m_L\rangle \longleftarrow \vec{L}$ $\qquad$ $\vec{S} \longrightarrow |\frac{1}{2},m_2=\pm\frac{1}{2}\rangle$

$j_1=l$ $\qquad$ عدد صحیح (اوربیتال های اتم هیدروژن)

$j_2=\frac{1}{2}$ $\qquad$ $m_2=\pm\frac{1}{2}$

$m_l=m_1=-l,\dots,+l$ $\qquad$ $j=|l-\frac{1}{2}|\,\dots\,l+\frac{1}{2}$

$m=-j,\dots,+j$

$m=m_1+m_2$ $\qquad$ $\boxed{m_l=m\pm\frac{1}{2}}$ $\qquad$ پایه‌های جدید $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

$\boxed{\text{اوربیتال S} \rightarrow l=0}$ $\qquad$ $j=\frac{1}{2}$ $\quad$ $m=\pm\frac{1}{2}$ $\qquad$ پایه‌های قدیم $|0,\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|0,-\frac{1}{2}\rangle$

$|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle=|0,\frac{1}{2}\rangle$ $\qquad$ $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle=|0,-\frac{1}{2}\rangle$ $\qquad$ $m_l=-1,0,+1$

$m=m_l+m_2$ $\qquad$ $m=m_l-m_2$ $\qquad$ پایه‌های قدیم: $m_2=\pm\frac{1}{2}$

$\boxed{\text{اوربیتال P} \rightarrow l=1}$

$j=\frac{1}{2}$ ($m=\pm\frac{1}{2}$) , $\frac{3}{2}$ ($m=\pm\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}$)

$|1,\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|1,-\frac{1}{2}\rangle$

$|0,\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|0,-\frac{1}{2}\rangle$

$|-1,\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|-1,-\frac{1}{2}\rangle$

$|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

$|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle$ $\quad$ $|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle$ $\quad$ $|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle$

$|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle=|1,\frac{1}{2}\rangle$

* تمرین: a و b و c را بدست آورید.

$$\begin{cases} \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = a\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle + b\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle & a^2+b^2=1 \\ \quad \longrightarrow m=\frac{1}{2}=m_\ell+m_2 & \\ \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = c\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle + d\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle & c^2+d^2=1 \end{cases}$$

---

* معادله کلی:

$$j=\ell-\frac{1}{2}\ ,\ \ell+\frac{1}{2}$$

$$\begin{cases} \left|\ell+\frac{1}{2},m\right\rangle = \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\ell-\frac{1}{2},m\right\rangle = \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \end{cases}$$

* جمع دو اسپین:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$|1,1\rangle = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$|1,-1\rangle = \left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} |00\rangle \\ \hline |1,1\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,-1\rangle \end{pmatrix}}_{\text{پایه‌های جدید}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{4\times4}} \underbrace{\begin{pmatrix} \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \end{pmatrix}}_{\text{پایه‌های قدیم}}$$

ماتریس تبدیل بین پایه‌های جدید و قدیم

ماتریس کلبش گوردن

برای حالت خاص : $1 \pm \frac{1}{2}$

$$
\begin{pmatrix}
\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle \\
\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle \\
\hline
\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle
\end{pmatrix}
=
\underbrace{\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0
\end{pmatrix}}_{\text{ماتریس کلبش-گوردن برای اتم هیدروژن}}
\begin{pmatrix}
\left|1, \frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|0, \frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|0, -\frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|-1, +\frac{1}{2}\right\rangle \\
\left|-1, -\frac{1}{2}\right\rangle
\end{pmatrix}
$$

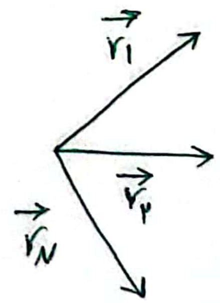
* ذرات یکسان : (تعیین‌ناپذیر)

- می خواهیم سیستمی را بررسی کنیم که N ذره داشته باشد.

تعداد ذراتش بی‌نهایت

تابع موج سیستم N ذره $\quad \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)$

مختصات ذره اول — مختصات ذره Nام



$$P = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 \, \underbrace{d^3 r_1}_{\vec{r}_1 + d\vec{r}_1} \, \underbrace{d^3 r_2}_{\vec{r}_2 + d\vec{r}_2} \dots d^3 r_N$$

* معادله شرودینگر :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N; t) = \hat{H} \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t)$$

هامیلتونی سیستم N ذره

$$\hat{H} \neq \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_N$$

فرض کنیم که V تابع زمان نباشد

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{P_j^2}{2m_j} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, r_N; t)$$

$$\Psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N) = \psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N)\, e^{-i/\hbar\, Et}$$

$$\hat H \psi(\vec r_1, \dots, \vec r_N) = E\psi(\vec r_1, \dots, \vec r_N) \longrightarrow$$ معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان

برای یک سیستم چند الکترونی $\equiv$ مرکز جرم (هسته) + حرکت حول مرکز جرم

$$\hat H = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_R^2}_{} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{Z}}_{}\nabla_i^2 - \underbrace{\sum_{i=1}^{Z}\frac{(Ze)(e)}{|\vec r_i - \vec R|}}_{} + \underbrace{\sum_{\substack{i\neq j\\ i<j}}\frac{(e)(e)}{|\vec r_i - \vec r_j|}}_{}$$

- R ← مختصات مرکز جرم (انرژی جنبشی هسته)
- انرژی جنبشی الکترون‌ها
- i ← مختصات الکترون i ام
- جاذبه‌ی کولنی بین الکترون‌ها و هسته
- دافعه کولنی بین الکترون‌ها

$i = 1, \dots, ۵$

$j = 1, \dots, ۵$ $\Rightarrow$ تقارن تبادلی