



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



کوانتوم: سلطان علم و فناوری

سید جواد هاشمی فر
دانشکده فیزیک

الْعِلْمُ سُلْطَانٌ،
مَنْ وَجَدَهُ صَالٍ بِهِ وَ مَنْ لَمْ يَجِدْهُ صَيْلَ عَلَيْهِ.

دانش، تسلط و قدرت است، هر که آن را بیابد با آن
یورش برد و پیروز شود، و هر که آن را نیابد براو یورش
برند و مغلوب گردد.

- درک پدیده‌های اتمی و الکترونی:

- مفاهیم بنیادی جدید:

- پیش‌بینی خواص مواد:

- فناوری‌های نوین و خارق‌العاده:

آزمایش فوتوالکتریک، طیف تابشی اتم‌ها

فوتون، تابع موج، عدم قطعیت، اندازه‌گیری، درهم‌تنیدگی

؟؟؟؟

تک‌فوتون، ذرات درهم‌تنیده، بیت‌های کوانتومی

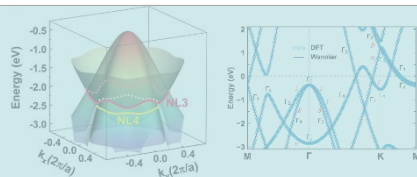
- موفقیت‌های فیزیک کلاسیک



- ضعف مهم فیزیک کلاسیک



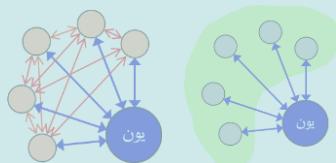
- مکانیک کوانتومی



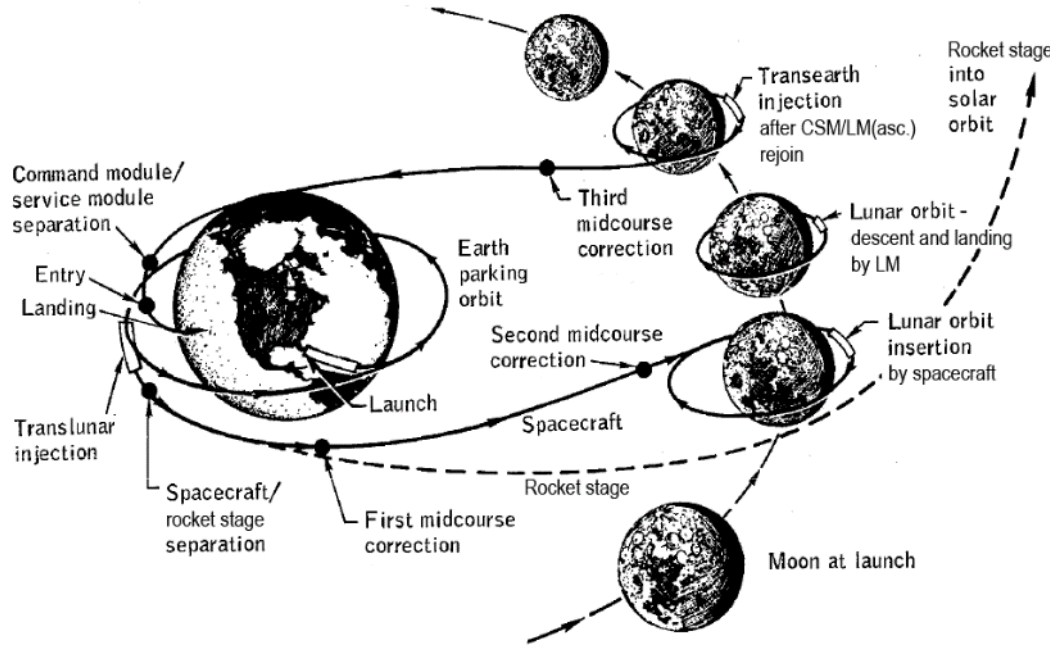
- خواص الکترونی مواد



- نظریه تابعی چگالی کُن - شَم



- کاربردهای محاسبات DFT



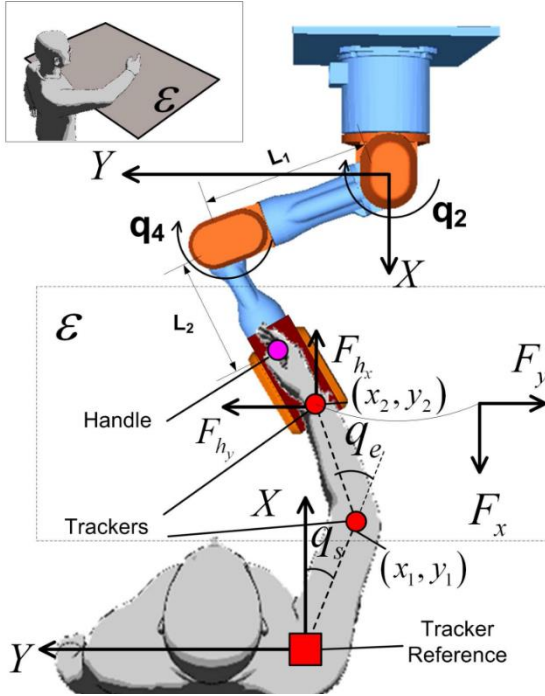
Flight path of the Apollo 11 human lunar landing mission, July 1969

• قوانین نیوتن (نیرو)

• قوانین ماکس (الکتریکی و)

• قوانین ترمودینامیک، کار و آنتروپی





DOI: [10.1109/AIM.2007.4412420](https://doi.org/10.1109/AIM.2007.4412420)

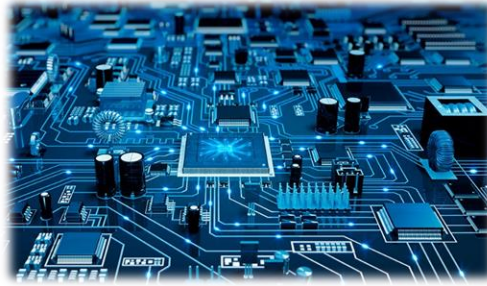
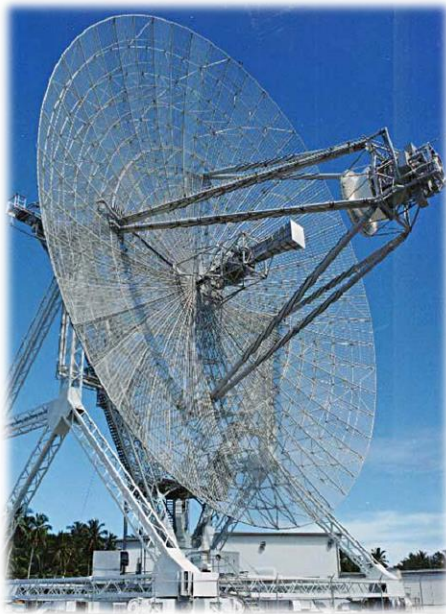
• قوانین نیوتن (نیرو)

• قوانین ماکسول (میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی)

• قوانین



photo: Hamed Jafarnejad



• قوانین نیوتن (نیرو)

• قوانین ماکسول (میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی)





- قوانین نیوتن (نیرو)
- قوانین ماکسول (میدان‌های الکترومغناطیسی)
- قوانین ترمودینامیک (گرما، کار و آنتروپی)



عدم درک خواص مواد!



سیلیکن



نمک طعام



سولفید مس



آلومینیوم

آهن

برنج

برنز

فولاد

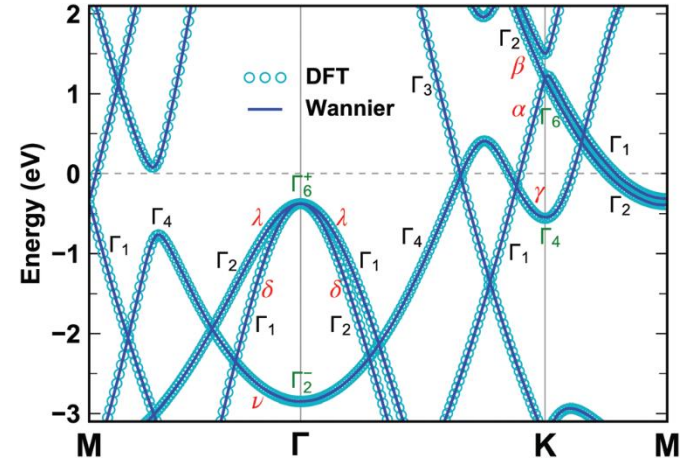
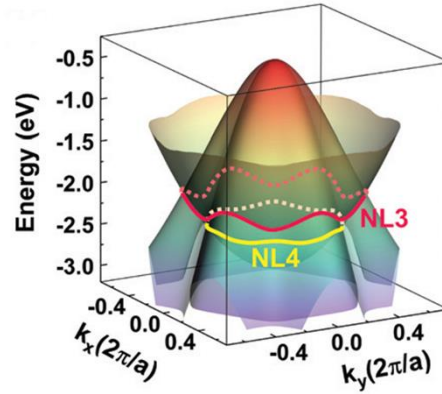
مس

الماس‌های رنگی





ساختار الکترونی



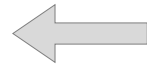
• خواص ساختاری

• خواص ارتعاشی

• خواص مغناطیسی

• خواص الکترونی

• خواص اپتیکی





Quantisierung als Eigenwertproblem

E. Schrodinger, 1926



عملگر هامیلتونی

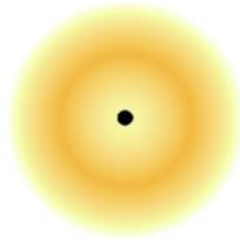
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

تابع موج $\psi(\mathbf{r})$, $\int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 1$

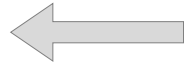
معادله ویژه مقدار

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

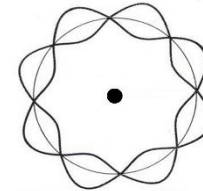
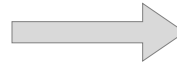
$$E = \int \psi^*(\mathbf{r}) H \psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$



چگالی احتمال



تابع موج



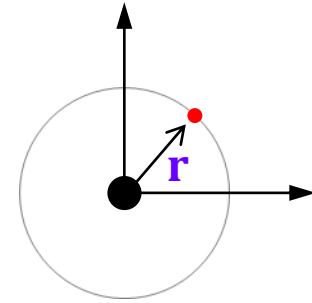
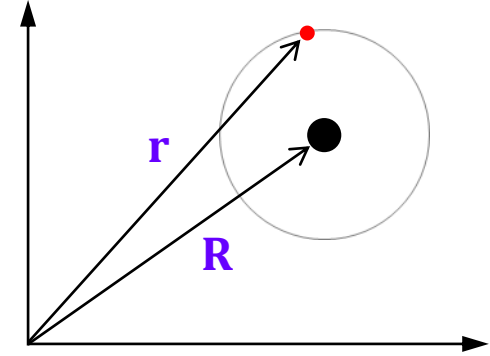
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_R^2}{2M} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}$$

$$e = \hbar = m = 4\pi\epsilon_0 = 1 \Rightarrow \begin{array}{ll} \text{هارتری} & 4.4 \times 10^{-18} \text{ j} \\ \text{بوهر} & 5.3 \times 10^{-11} \text{ m} \end{array}$$

$$H = -\frac{\nabla_r^2}{2} - \frac{\nabla_R^2}{2M} - \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}$$

تقریب آدیاباتیک: دینامیک الکترون، از دینامیک هسته مستقل است و فقط به مکان لحظه‌ای هسته بستگی دارد.

$$H = -\frac{\nabla_r^2}{2} - \frac{1}{r}$$



$$\left(-\frac{\nabla_r^2}{2} - \frac{1}{r}\right)\psi = E\psi$$

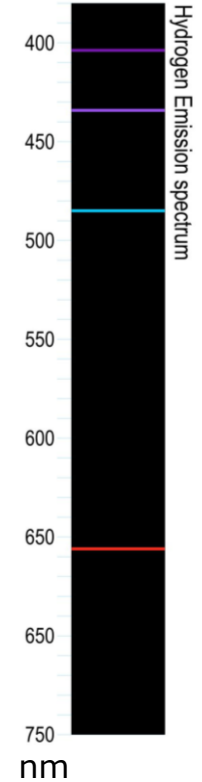
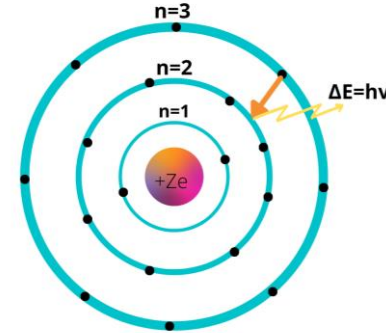
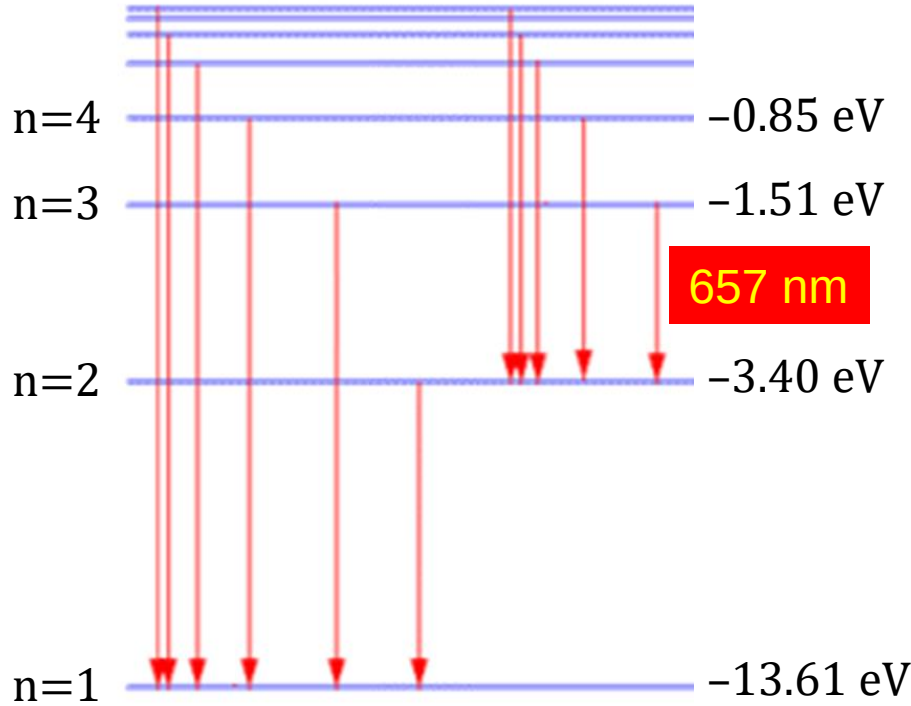
$$-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2(\sin\theta)^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] - \frac{1}{r}\psi = E\psi$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0^*}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_m^l(\theta, \varphi) \quad \rho = \frac{2r}{n}$$

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad l = 0, 1, \dots, n-1 \quad m = -l, \dots, l$$



$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \quad \Delta E = \frac{hc}{\lambda}$$

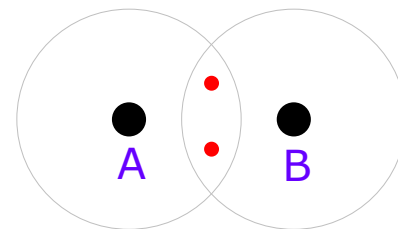


$$H \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$H = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} + \underbrace{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}_{\text{همبستگی الکترونی}} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_A|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_B|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_A|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_B|}$$

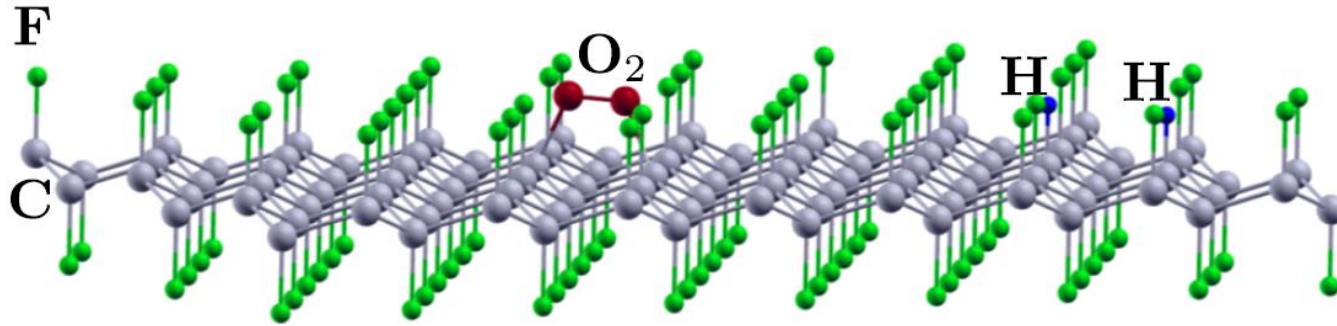
همبستگی الکترونی

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \neq \psi_1(\mathbf{r}_1) \times \psi_2(\mathbf{r}_2)$$



همبستگی بین الکترون‌ها و هسته‌ها موجب پیچیدگی معادله شرودینگر و تابع موج می‌شود و عملاً امکان حل تحلیلی معادلات کوانتومی وجود ندارد.

مشکل از تعداد زیادی الکترون و هسته



$$H = \underbrace{\sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2}}_{\text{الکترون}} + \underbrace{\sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i,\alpha} \frac{-Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}}_{\text{هسته - الکترون}} + \underbrace{\sum_{\alpha>\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} + \sum_\alpha \frac{-\nabla_\alpha^2}{2M_\alpha}}_{\text{هسته}}$$

پیش‌بینی خواص مواد: یک رویای دوردست !!!



The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.

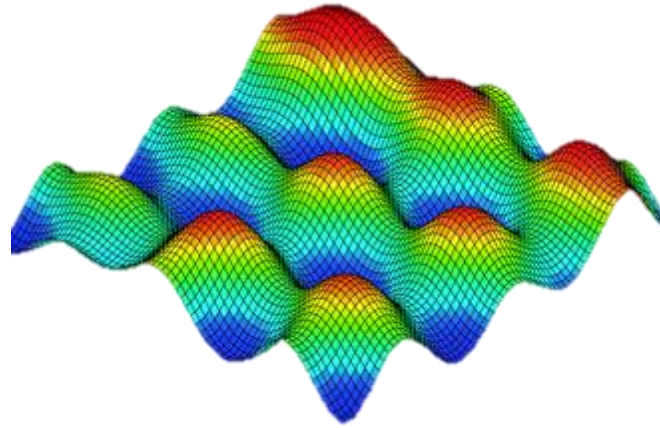
- Paul Dirac -

quoteparrot.com

$$H = \underbrace{\sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2}}_{\text{الکترون}} + \underbrace{\sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}}_{\text{هسته - الکترون}} + \underbrace{\sum_{\alpha>\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} + \sum_\alpha \frac{-\nabla_\alpha^2}{2M_\alpha}}_{\text{هسته}}$$

تقریب آدیاباتیک (برن-اپنهاایمر):
دینامیک الکترون‌ها، از دینامیک هسته‌ها مستقل است.

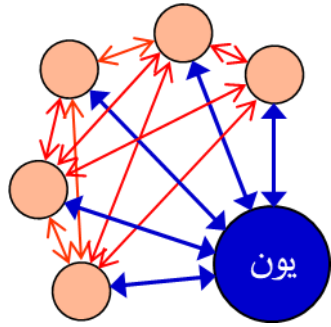
$$\left(H_e = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} \right) \Psi_e(\mathbf{r}_i) = E(\{\mathbf{R}_\alpha\}) \Psi_e(\mathbf{r}_i)$$



تقریب آدیاباتیک (برن-اپنهایمر):
دینامیک الکترون‌ها، از دینامیک هسته‌ها مستقل است.

$$\left(H_e = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} \right) \Psi_e(\mathbf{r}_i) = E(\{\mathbf{R}_\alpha\}) \Psi_e(\mathbf{r}_i)$$

$$H = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \underbrace{\sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}_{\text{همبستگی الکترونی}} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}$$

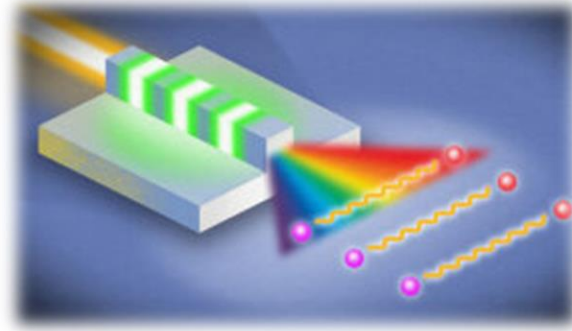


همبستگی الکترونی

Application

Entanglement

☹️
Complication → $\Psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$

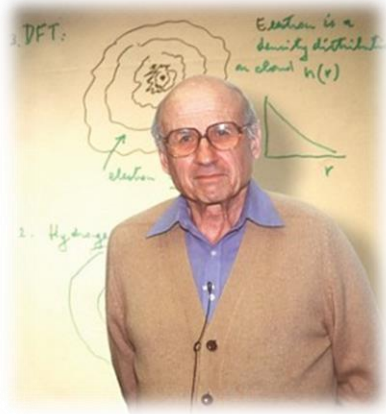


$$H = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \underbrace{\sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}_{\text{همبستگی الکترونی}} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}$$

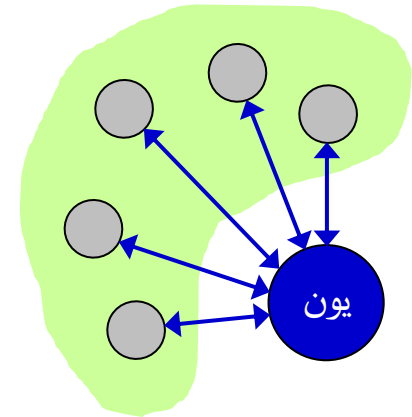
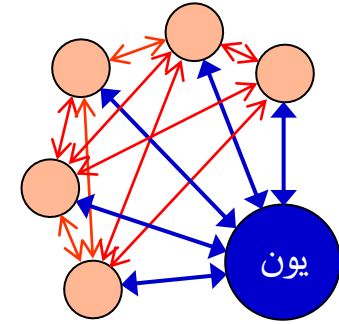
همبستگی الکترونی

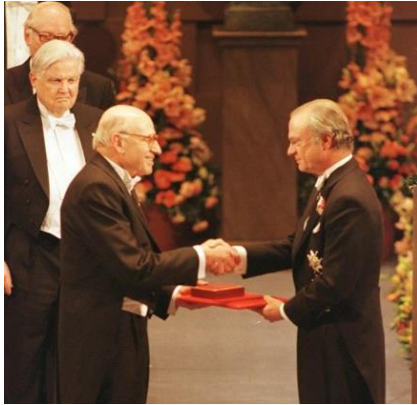


تابع موج پیچیده $\Psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$

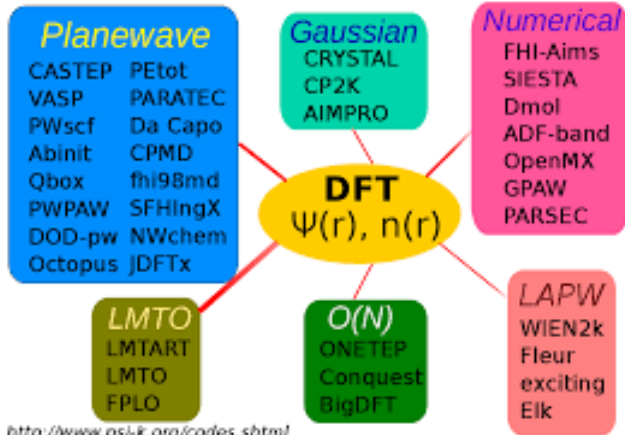


ایده استفاده از یک سامانه کمکی
برای حل معادلات کوانتومی





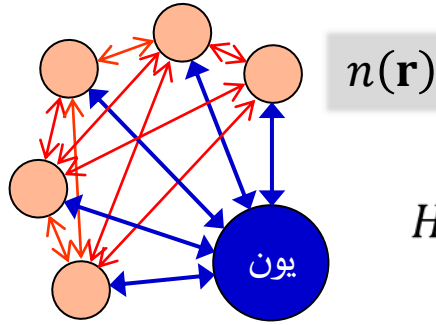
- جایزه نوبل شیمی ۱۹۹۸
- انتشارات بسیار عالی
- تعداد بسیار زیادی کد محاسباتی
- کاربرد در رشته‌های فیزیک، شیمی، مواد، برق، مکانیک



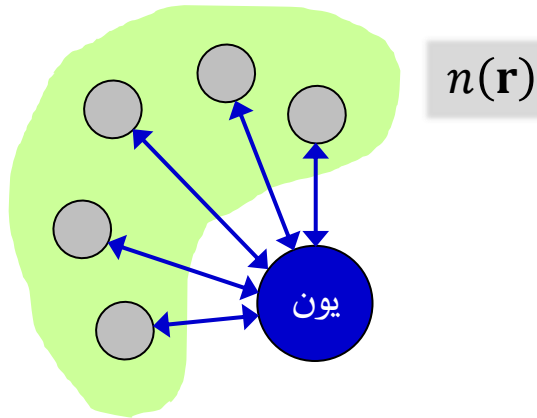
TOP-10 PAPERS

Just 3 papers have received more than 100,000 citations, putting them well ahead of the rest. These runaway hits all cover biological lab techniques, which in general dominate the list of most-cited literature, including 7 of the top 10.

1	305,148 citations
	Protein measurement with the folin phenol reagent (1951)
2	213,005
	Cleavage of structural proteins during the assembly of head of the bacteriophage T4 (1970)
3	155,530
	A rapid and sensitive method for the quantitation of microgram quantities of protein utilizing the principle of protein-dye binding (1976)
4	65,335
	DNA sequencing with chain-terminating inhibitors (1977)
5	60,397
	Single-step method of RNA isolation by acid guanidinium thiocyanate-phenol-chloroform extraction (1987)
6	53,349
	Electrophoretic transfer of proteins from polyacrylamide gels to nitrocellulose sheets: procedure and some applications (1979)
7	46,702
	Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density (1988)
8	46,145
	Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange (1993)
9	45,131
	A simple method for the isolation and purification of total lipids from animal tissues (1957)
10	40,289
	CLUSTAL W: improving the sensitivity of progressive multiple sequence alignment through sequence weighting, position-specific gap penalties and weight matrix choice (1994)

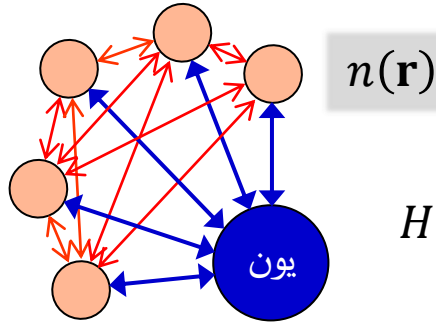


$$H = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}$$

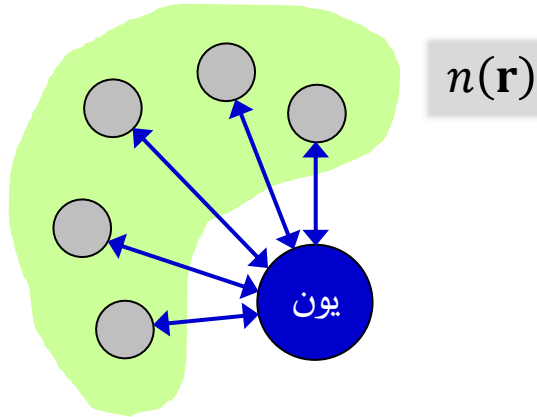


$$\int \frac{n(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{XC}$$

آثار کوانتومی برهم کنش الکترون-الکترون



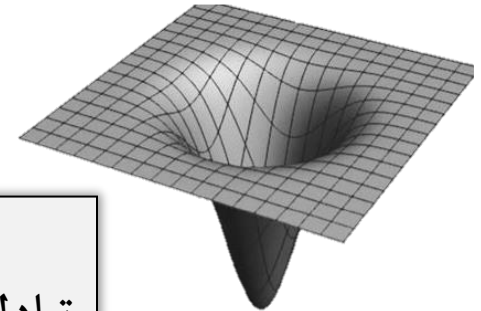
$$H = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}$$



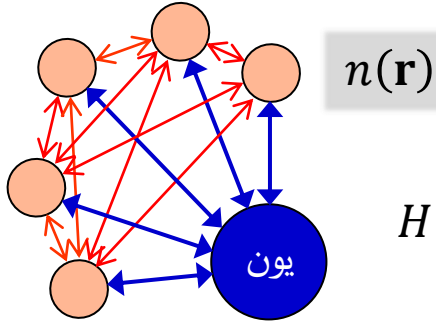
$$E_H + E_{XC}$$

$$E_{XC} = \int \frac{n(\mathbf{r})n_{XC}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

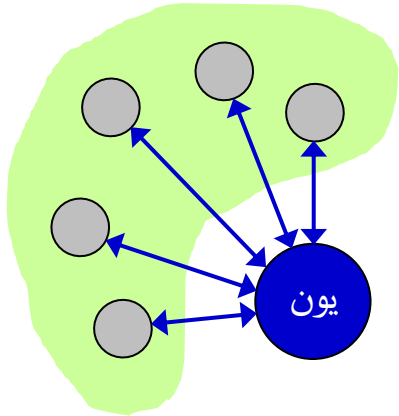
$$E_H = \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$



حفره
تبادلی-همبستگی



$$H = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|}$$



$$h = \frac{\nabla^2}{2} + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) - \sum_\alpha \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha|}$$

تقریب‌های مختلفی برای
پتانسیل تبادلی-همبستگی تولید شده است.

بهشت



:

GW



ACBN0



Hybrid

mGGA



GGA

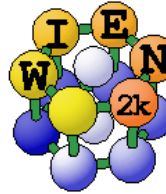
LDA



محاسبات ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی کُن - شَم



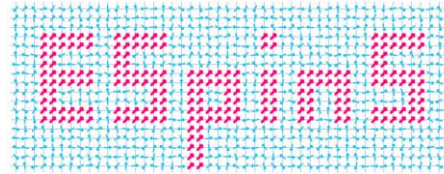
QUANTUM
ESPRESSO



exciting

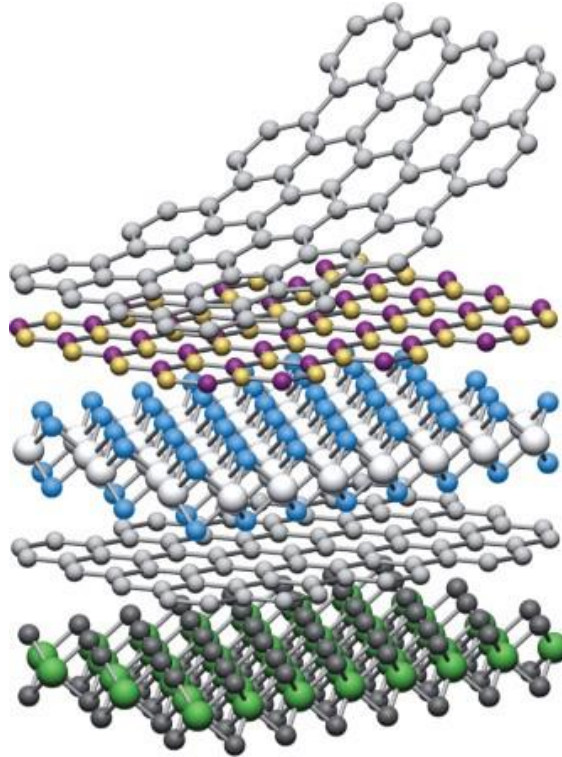


WANNIER90

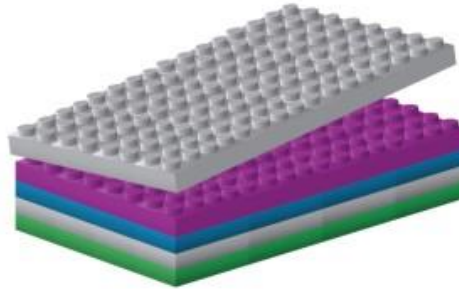


Octopus

پیش بینی خواص مواد، بدون نیاز به داده‌های آزمایشگاهی



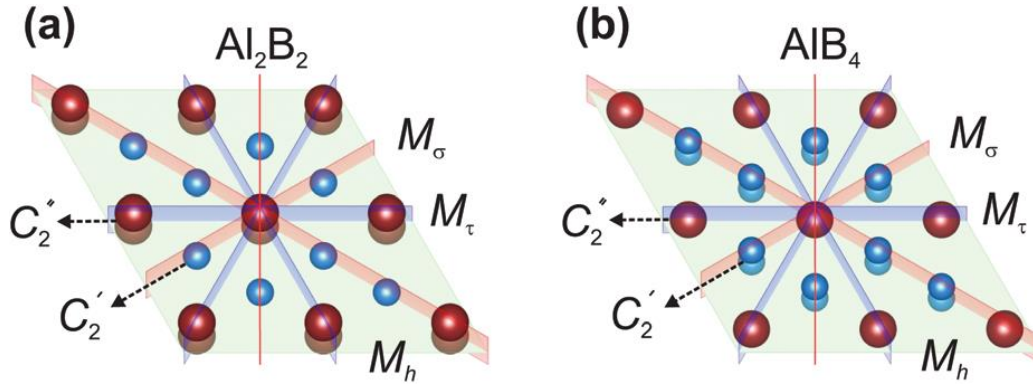
	Graphene	
	hBN	
	MoS ₂	
	WSe ₂	
	Fluorographene	



تکنیک‌های پیشرفته برای
طراحی و تولید مواد جدید

[Nature](#) volume 499, pages 419–425 (2013)

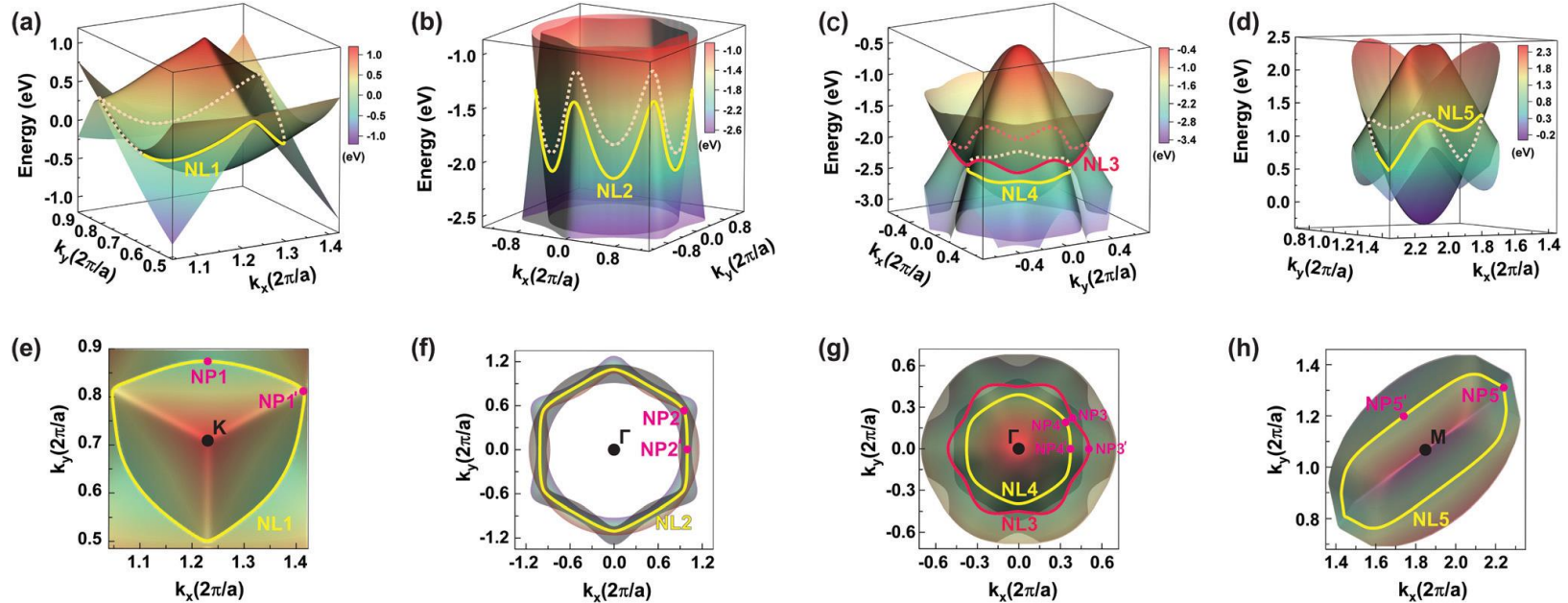
پیش بینی رفتارهای توپولوژی جدید در
بلورهای دوبعدی Al_2B_2 و AlB_4



مواد توپولوژی

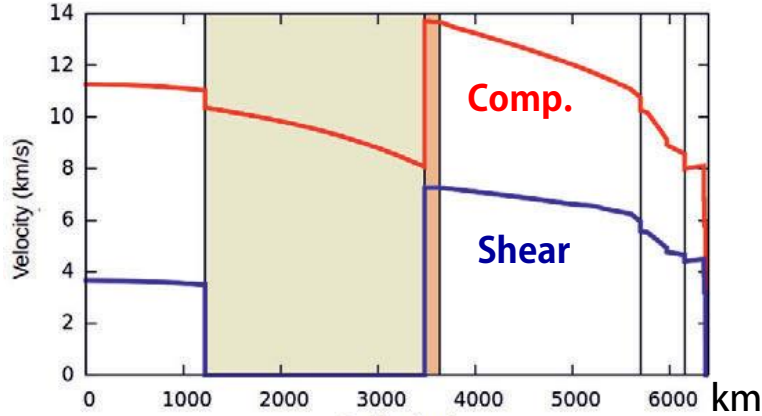


هدایت الکتریکی
سطحی محافظت شده

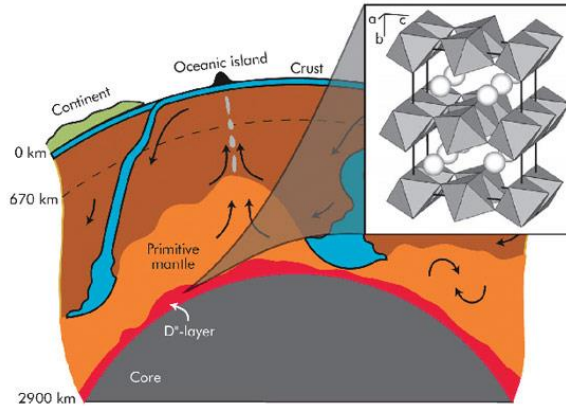
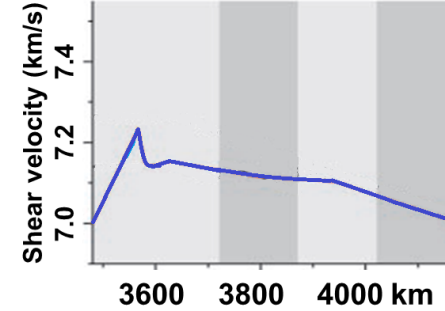


بررسی مواد در شرایط غیرعادی (فشار بسیار بالا)

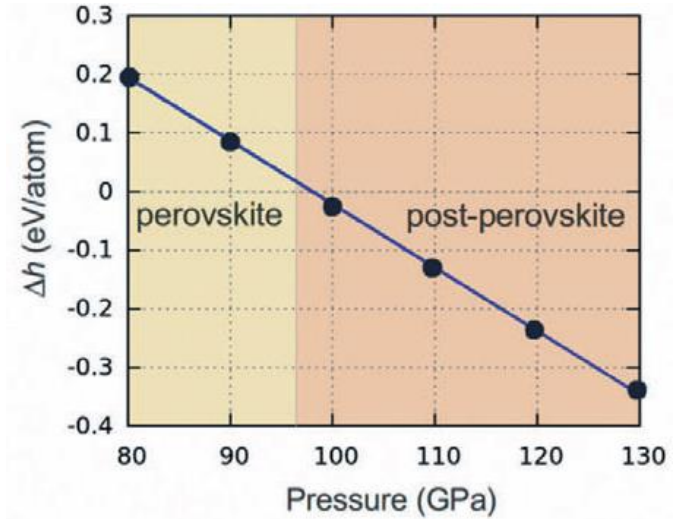
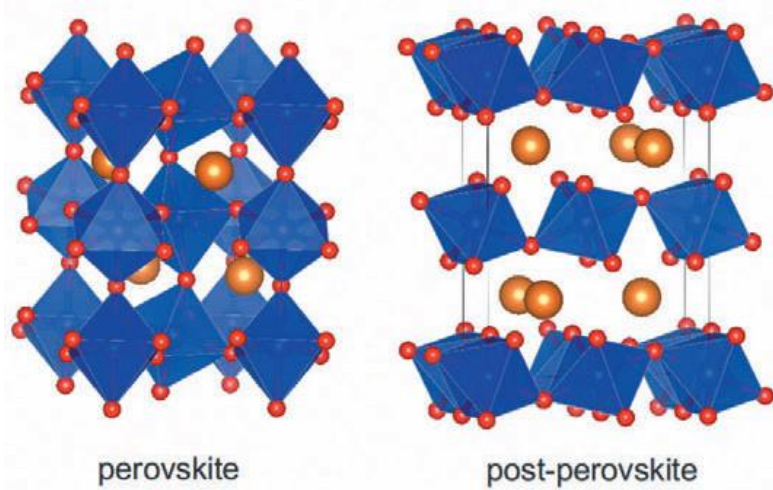
Physics of the Earth and Planetary Interiors (1981) 297



Science (1999) 1326



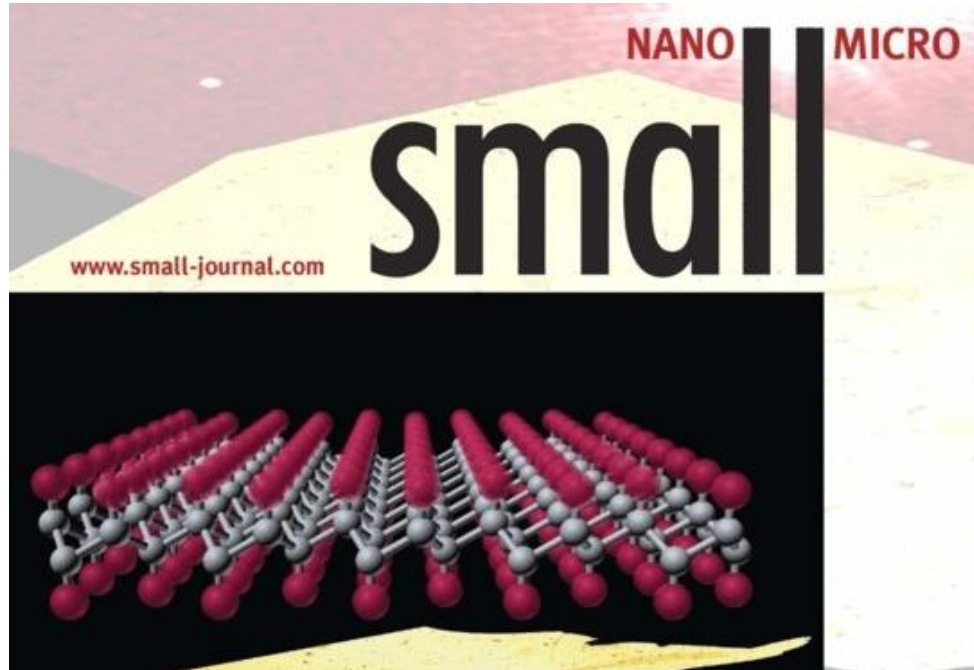
بررسی مواد در شرایط غیرعادی (اعماق زمین)



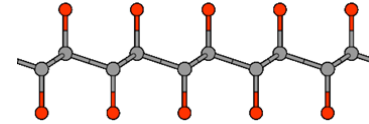
	C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{12}	C_{13}	C_{23}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	v_S
Perovskite	907	1157	1104	513	406	431	364	271	333	7.636
Post-perov.	1252	929	1233	414	325	478	277	266	408	7.783

(GPa)

(km/s)

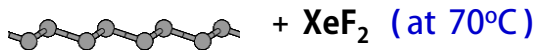
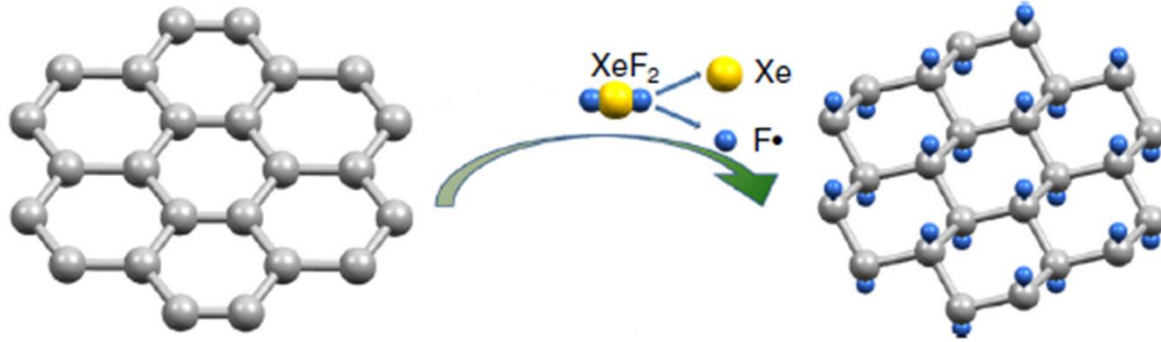


فلوئوروگرافن: یک ماده دوبعدی جدید

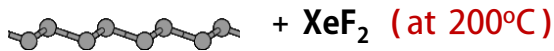


- گاف انرژی بزرگ (۳ eV)
- پایداری حرارتی زیاد
- پایداری مکانیکی زیاد ($Y \approx 100 \text{ N/m}$)

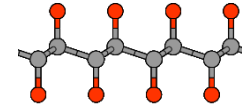
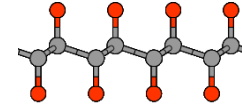
درک نتایج آزمایشگاهی پیچیده (فلوئوروگرافن)



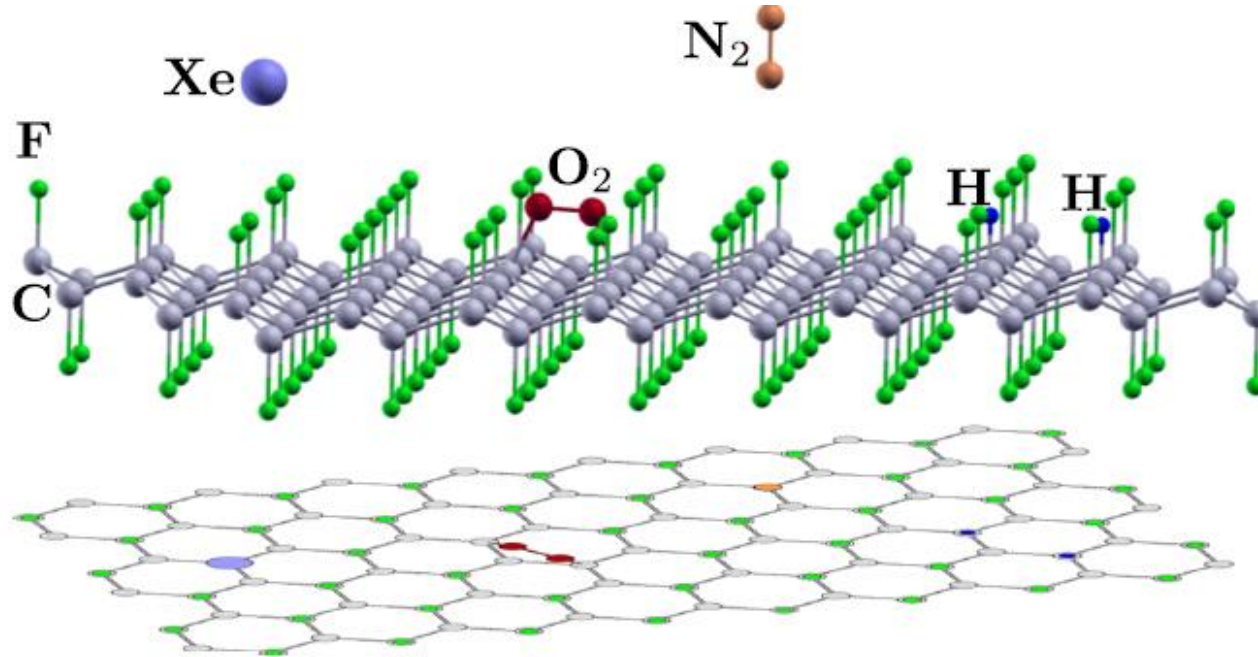
بیش از دو هفته



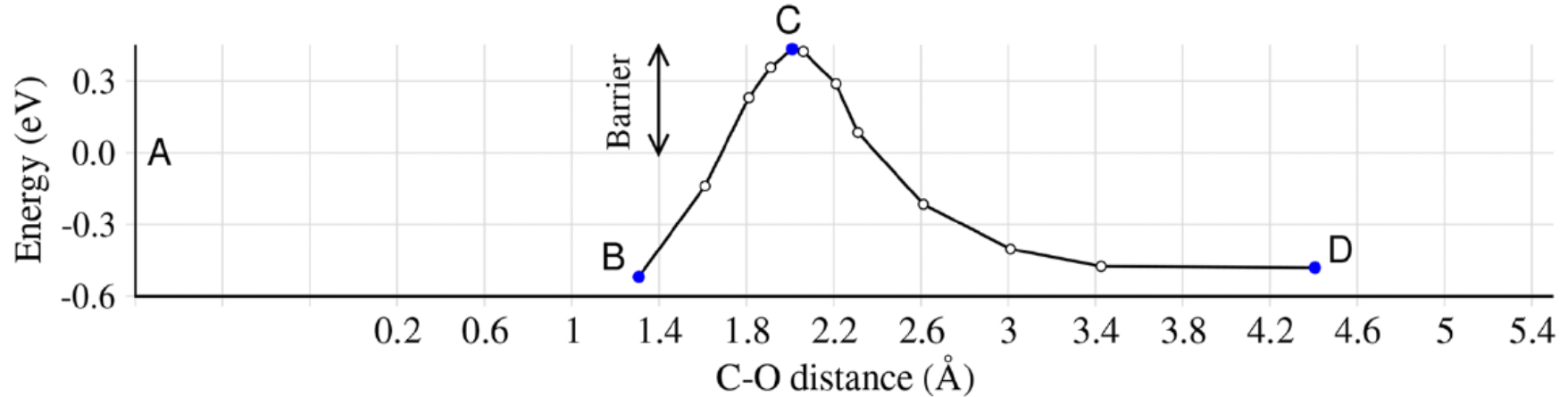
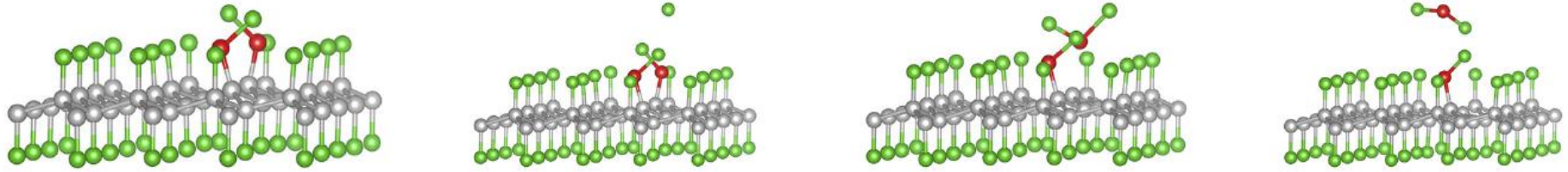
حدود ۱۰ ساعت



درک نتایج آزمایشگاهی پیچیده (فلوئوروگرافن)



درک نتایج آزمایشگاهی پیچیده (فلوئوروگرافن)



محاسبات ابتدا به ساکن کوانتومی، خواص مواد را با دقت خوبی پیش بینی می کند:

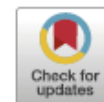
- تحلیل نتایج آزمایشگاهی پیچیده
- جستجوی مواد جدید با خواص مطلوب
- شبیه سازی شرایط آزمایشگاهی غیرمتعارف



Contents lists available at [ScienceDirect](https://www.sciencedirect.com)

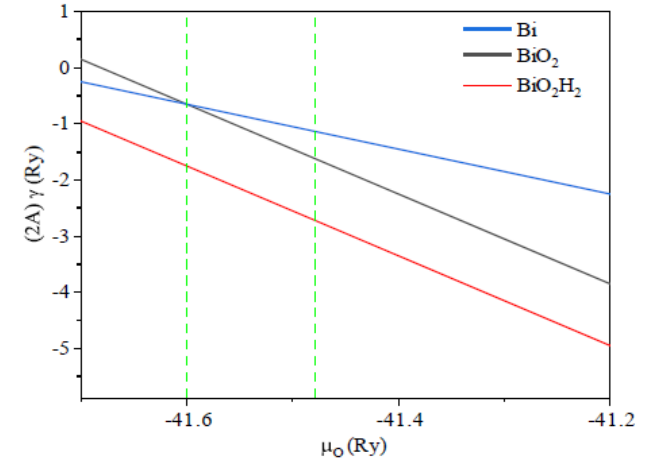
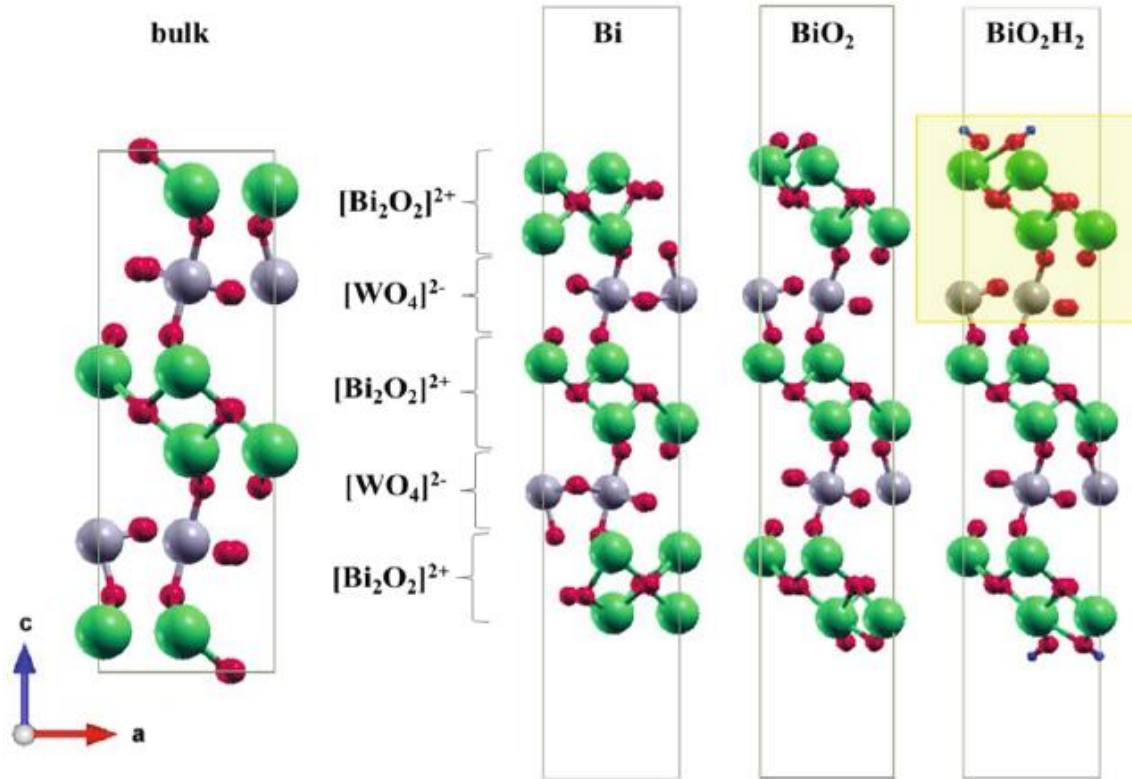
Chemical Engineering Journal

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cej



Decrypting the photocatalytic bacterial inactivation of hierarchical flower-like Bi_2WO_6 microspheres induced by surface properties: Experimental studies and *ab initio* calculations

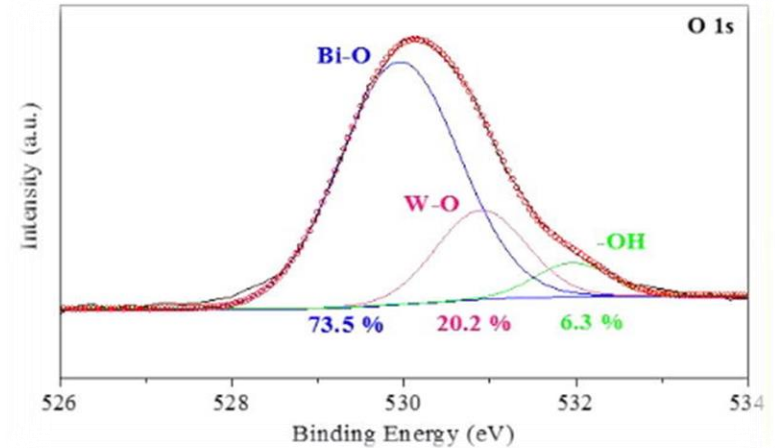
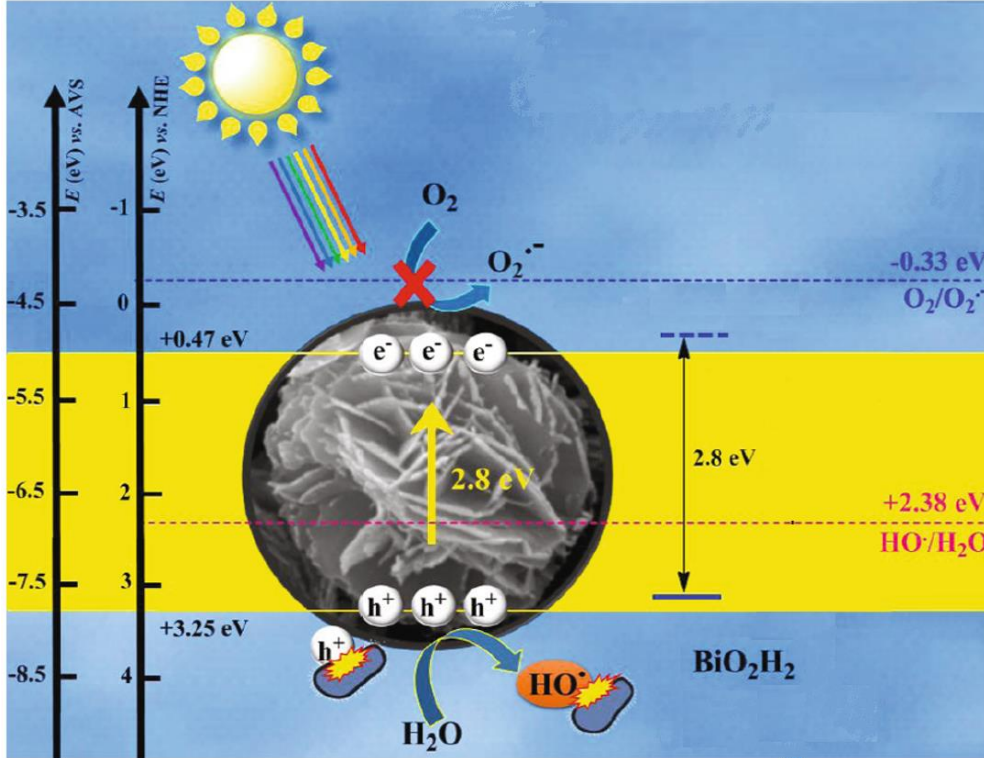
Minoo Karbasi^{a,b,*}, S. Javad Hashemifar^{c,*}, Fathallah Karimzadeh^b, Stefanos Giannakis^{d,*}, César Pulgarin^{a,g}, Keyvan Raeissi^b, Andrzej Sienkiewicz^{e,f}

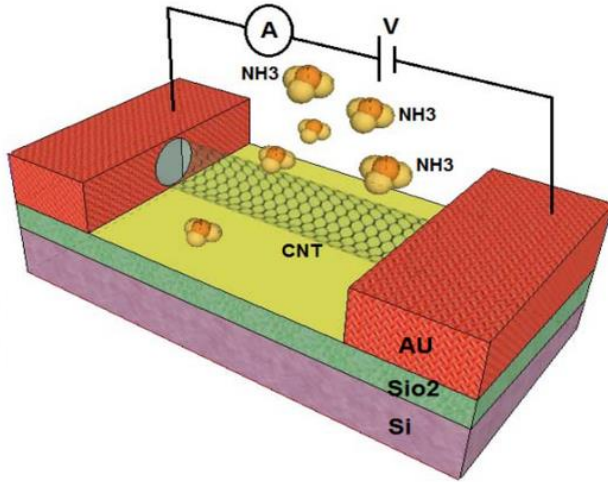


سطح BiO_2H_2 پایدارتر است.
 یعنی در سطح هیدروژن وجود دارد.

درک عمیق تر نتایج آزمایشگاهی

- رادیکال های O_2 در سطح تولید نمی شود.
- رادیکال های OH در سطح شکل می گیرد.





تبادل بار بین مولکول گاز و نانولوله



تغییر هدایت الکتریکی نانولوله

Sensors 2014, 14(3), 5502

رساله دکتری رشته مهندسی برق خانم زهرا کرمی هرستانی

تحت عنوان

بررسی و ساخت حسگر گاز بر پایه اکسید قلع و نانولوله کربنی

توسط کمیته زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت:

در تاریخ

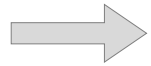
- | | |
|-----------------------------|------------------------|
| ۱- استاد راهنمای پایان نامه | دکتر سید مسعود سیدی |
| ۲- استاد راهنمای پایان نامه | دکتر محمدحسین شیخی |
| ۳- استاد مشاور پایان نامه | دکتر سید جواد هاشمی فر |

$$H \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$H = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} + \underbrace{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}_{\text{همبستگی الکترونی}} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_A|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_B|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_A|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_B|}$$

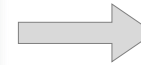
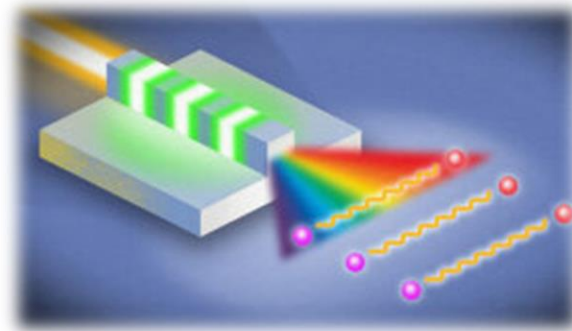
همبستگی الکترونی

$$\Rightarrow \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \neq \psi_1(\mathbf{r}_1) \times \psi_2(\mathbf{r}_2)$$



Entanglement

درهم تنیدگی کوانتومی



**فناوری های
کوانتومی**

محاسبات
کوانتمی

رمزنگاری
کوانتمی

رادارهای
کوانتمی

حسگرهای
فوق دقیق
مغناطیسی

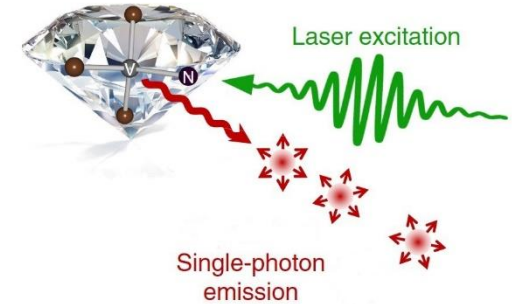
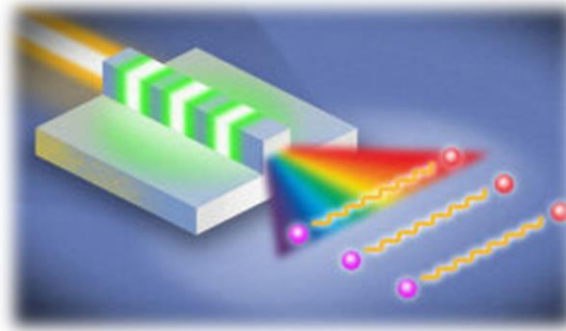
فوتونیک
کوانتمی

ارتباطات
فوق امن

چشمه فوتون درهم تنیده

چشمه تک فوتون

مواد توپولوژی

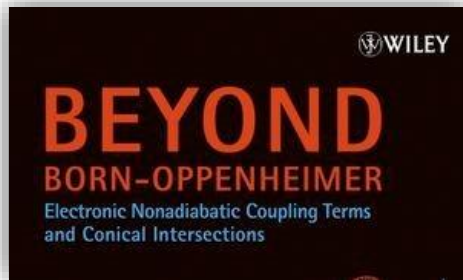


معادله ویژه مقاداری

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad \equiv \quad \frac{\delta}{\delta \psi_t(\mathbf{r})} \left(\frac{\int \psi_t^*(\mathbf{r}) H \psi_t(\mathbf{r})}{\int \psi_t^*(\mathbf{r}) \psi_t(\mathbf{r})} \right) = 0$$

اصل وردش

$$\psi_t(\mathbf{r}) = A_1 \varphi_1(\mathbf{r}) + A_2 \varphi_2(\mathbf{r}) + A_3 \varphi_3(\mathbf{r}) + \dots$$



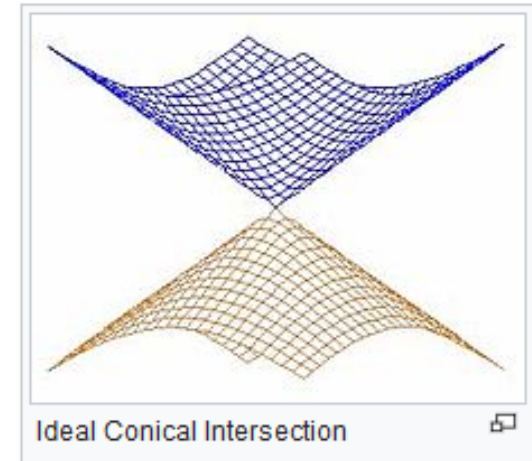
برهم کنش الکترون-فونون (Vibronic coupling)

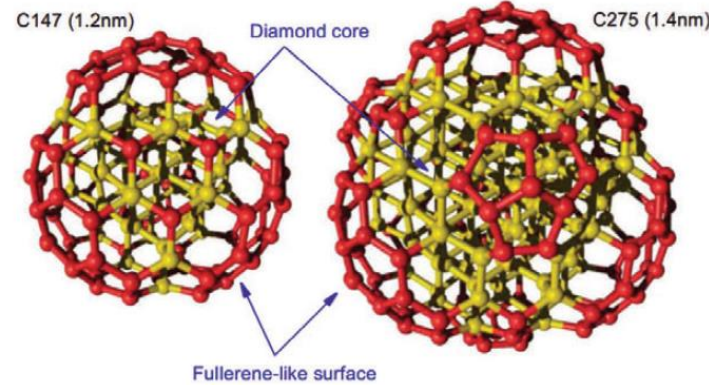
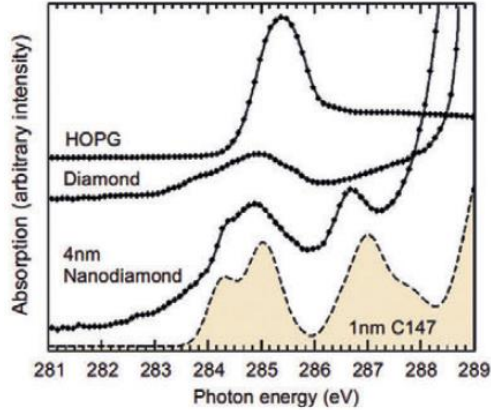
ترابرد در فلزات ، ابررسانا

Conical intersection

From Wikipedia, the free encyclopedia

In quantum chemistry, a **conical intersection** of two or more potential energy surfaces is the set of molecular geometry points where the potential energy surfaces are degenerate (intersect) and the non-adiabatic couplings between these states are non-vanishing. In the vicinity of conical intersections, the Born–Oppenheimer approximation breaks down and the coupling between electronic and nuclear motion becomes important, allowing non-adiabatic processes to take place. The location and characterization of conical intersections are therefore essential to the understanding of a wide range of important phenomena governed by non-adiabatic events, such as photoisomerization, photosynthesis, vision and the photostability of DNA





نانوالماس:

شهاب سنگ ها، الماس انفجاری،
لایه نشانی تبخیر شیمیایی
کاربردهای پزشکی و صنعتی

طیف پراش ایکس نانوالماس
با الماس فرق دارد !!!

نتیجه شبیه سازی: نانوالماس، پوسته گرافیتی دارد.

محاسبات DFT، مکمل آزمایش های تجربی.

- پیکربندی تعادلی مواد
- دینامیک مولکولی
- خواص مکانیکی (مدول ها و ثابت های کشسانی)
- خواص ارتعاشی (IR ، Raman)
- پایداری ترمودینامیکی (گذار فازها)
- انرژی تشکیل
- انرژی جذب سطحی
- مسیر واکنش های شیمیایی

