



دانشکده فیزیک

دانشگاه صنعتی اصفهان

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

کوانتوم

فرمانروای جهان ناشناخته‌ها

سید جواد هاشمی‌فر



سومین مدرسه تابستانه

افق‌های نو در فیزیک

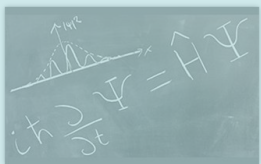






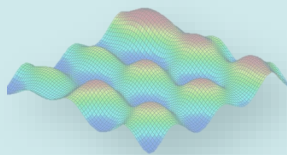
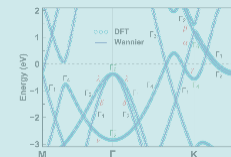
فیزیک کلاسیک ✓

فیزیک کلاسیک ✗



فیزیک کوانتم

خواص الکترونی مواد



سطح انرژی پتانسیل

جستجوی ساختار





سورنا



- قوانین نیوتن (نیرو)
- قوانین الکترومغناطیس و ترمودینامیک

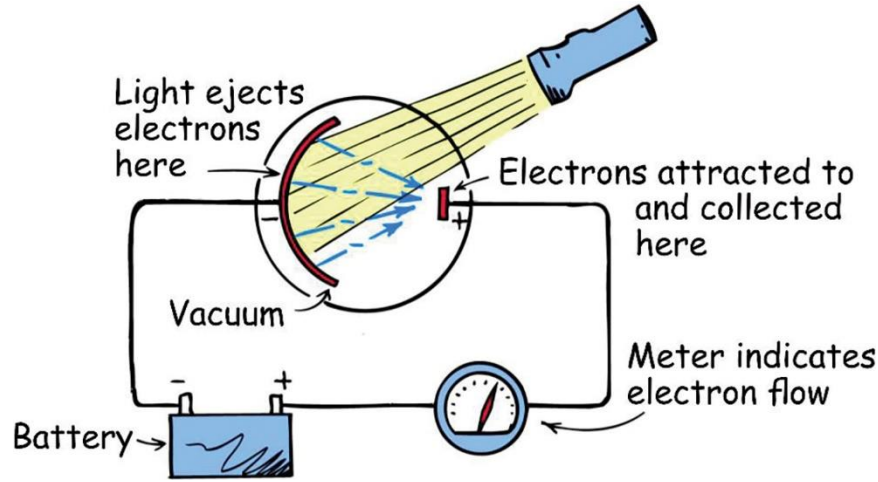




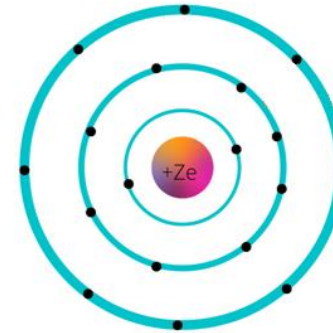
- قوانین نیوتن (نیرو)
- قوانین الکترومغناطیس و ترمودینامیک



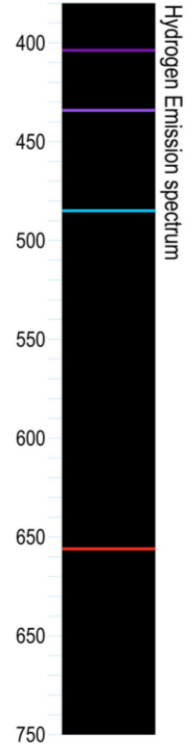
رصدخانه ملی



اثر فوتوالکتریک



پایداری و طیف تابشی اتم





سیلیکن



نمک طعام



سولفید مس

عدم درک خواص مواد!

الماس‌های رنگی



آلومینیوم

آهن

برنج

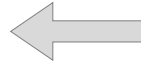
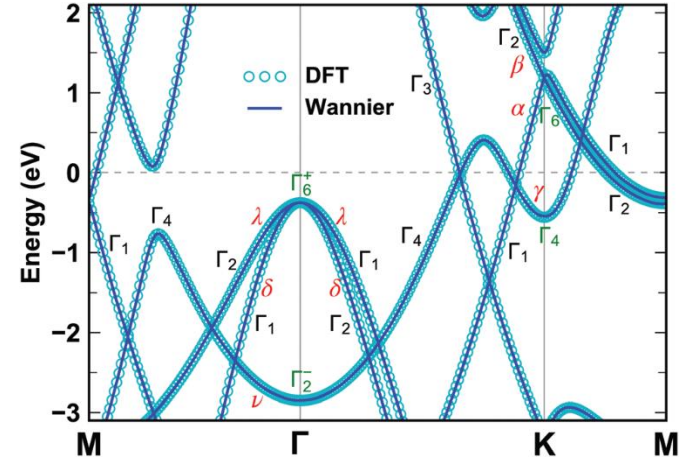
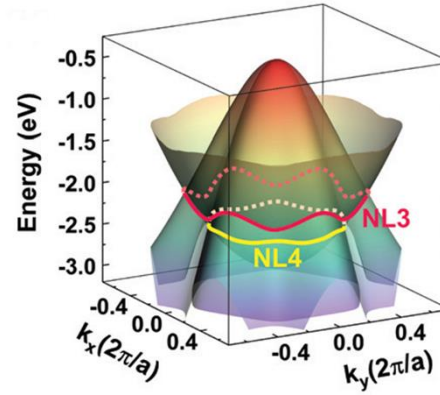


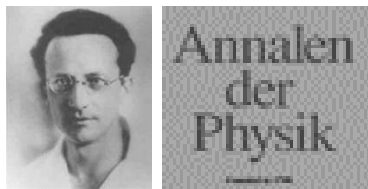
برنز

فولاد

مس

- خواص ساختاری
- خواص مکانیکی
- خواص مغناطیسی
- خواص الکترونی
- خواص اپتیکی





Quantisierung als Eigenwertproblem

E. Schrodinger, 1926



عملگر هامیلتونی

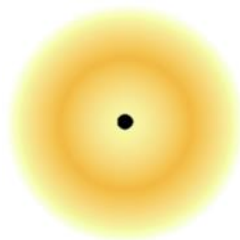
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

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

معادله ویژه مقدری

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

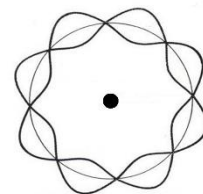
$$E = \int \psi^*(\mathbf{r}) H \psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$



چگالی احتمال



تابع موج



کوانتم، منشاء تحولات بزرگ

- مفاهیم علمی جدید: فوتون، ترازهای انرژی، تابع موج
- درک پدیده‌های اتمی: آزمایش فوتوالکتریک، طیف تابشی اتم‌ها
- درک ویژگی‌های مواد: خواص الکترونی، مکانیکی، مغناطیسی و اپتیکی
- پدیده‌های بدیع: تک‌فوتون، ذرات درهم‌تنیده، بیت‌های کوانتمی
- فناوری‌های نوظهور: محاسبات کوانتمی، مخابرات کوانتمی، حسگرهای کوانتمی
- مفاهیم فلسفی جدید: عدم قطعیت و احتمال کوانتمی

احتمال کلاسیک،

ناشی از پیچیدگی و جهل



احتمال کوانتومی،

یک پدیده ذاتی

$$\frac{1}{\sqrt{2}} | \text{die 1} \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} | \text{die 2} \rangle$$



The Free Will Theorem (Finally)

- If an experimenter's choice of which particle axis to measure is not entirely predetermined by events in her past history, then the response of the particle is also not predetermined by events in its past history.



کوانتم، منشاء تحولات بزرگ

- مفاهیم علمی جدید: فوتون، ترازهای انرژی، تابع موج
- درک پدیده‌های اتمی: آزمایش فوتوالکتریک، طیف تابشی اتم‌ها
- درک ویژگی‌های مواد: خواص الکترونی، مکانیکی، مغناطیسی و اپتیکی
- پدیده‌های بدیع: تک‌فوتون، ذرات درهم‌تنیده، بیت‌های کوانتمی
- فناوری‌های نوظهور: محاسبات کوانتمی، مخابرات کوانتمی، حسگرهای کوانتمی
- مفاهیم فلسفی جدید: عدم قطعیت و احتمال کوانتمی

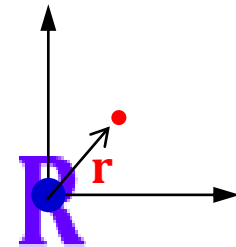
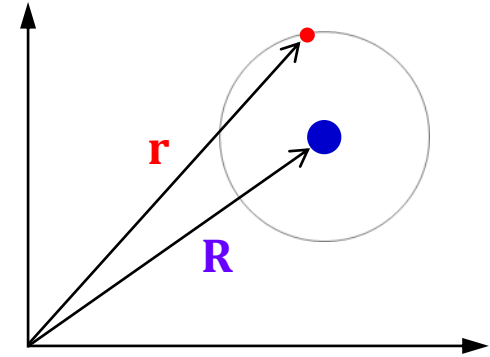
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_R^2}{2M} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{R}|} e^2$$

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

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

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

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



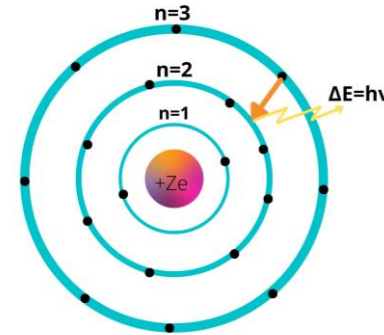
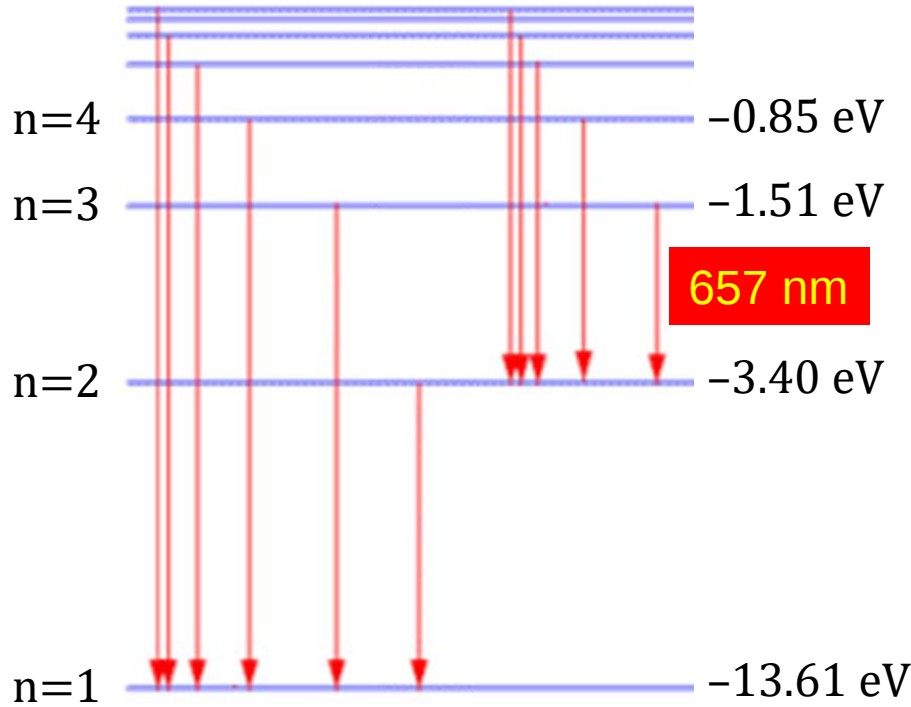
$$\left(-\frac{\nabla_r^2}{2} - \frac{1}{r}\right)\psi = E\psi$$

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

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

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

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

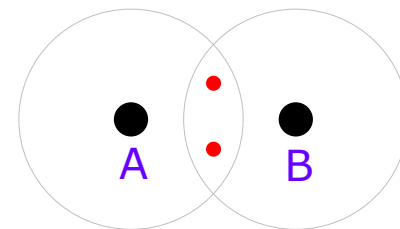


$$H \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

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

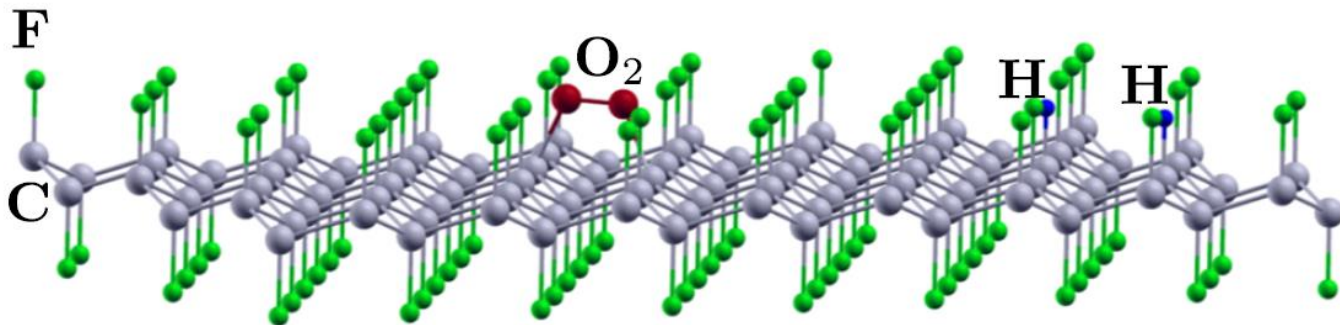
همبستگی الکترونی

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



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

متشکل از تعداد زیادی الکترون و هسته



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

تحریک‌پذیری الکترون‌ها خیلی بیشتر از هسته‌ها است.

- **دینامیک الکترون‌ها**، از دینامیک هسته‌ها مستقل است و به مکان لحظه‌ای هسته‌ها بستگی دارد.
- **دینامیک هسته‌ها**، موجب برانگیختگی الکترونی نمی‌شود.

دینامیک سامانه
بس‌ذره‌ای:

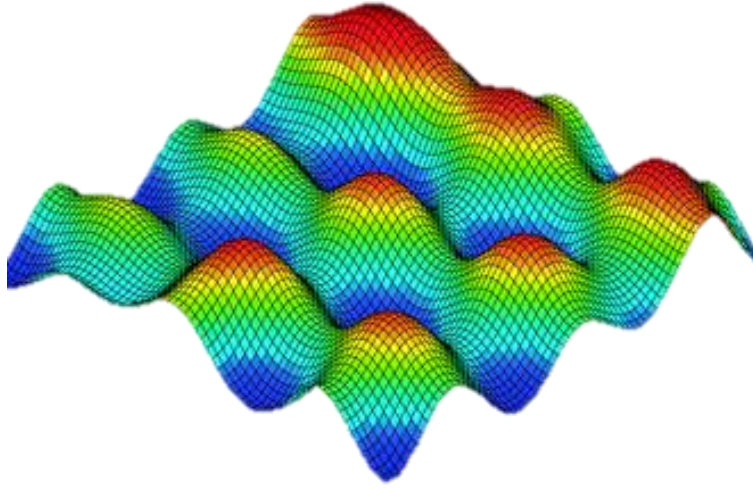
$$\Psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_\alpha) = \Psi_e(\mathbf{r}_i) \times \Psi_I(\mathbf{R}_\alpha)$$

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

$$\left(\sum_{\alpha>\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} + \sum_\alpha \frac{-\nabla_\alpha^2}{2M_\alpha} \right) \Psi_I(\mathbf{R}_\alpha) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(\mathbf{R}_\alpha)$$

الکترون‌ها

هسته‌ها



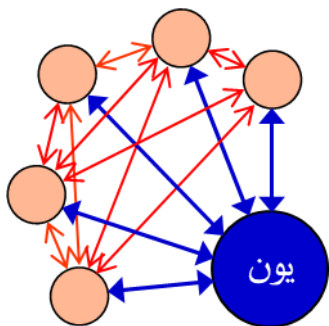
- ساختارهای مختلف یک ماده
- طیف ارتعاشی مواد
- خواص ترمودینامیکی مواد
- خواص شیمیایی

$$\left(\sum_{\alpha} \frac{-\nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \sum_{\alpha > \beta} \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} + E_n(\mathbf{R}_{\alpha}) \right) \Psi_I(\mathbf{R}_{\alpha}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(\mathbf{R}_{\alpha})$$

هسته‌ها

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

همبستگی الکترونی



Complication

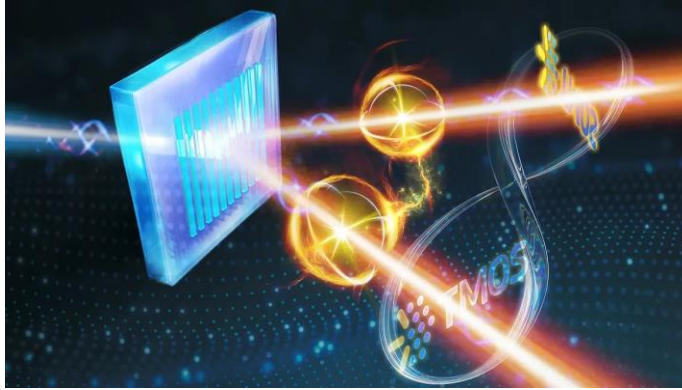
$\Psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$



Application

Entanglement





- محاسبات کوانتومی
- تصویربرداری کوانتومی
- رمزنگاری کوانتومی
- دوربری کوانتومی

EINSTEIN ATTACKS QUANTUM THEORY

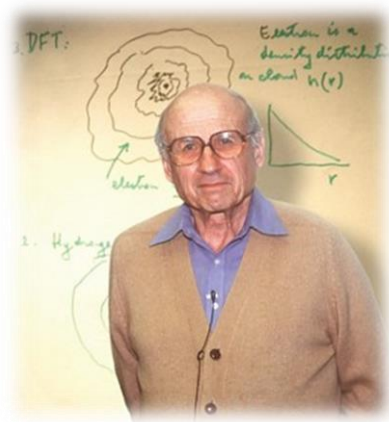
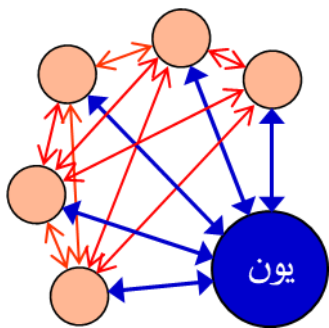
Scientist and Two Colleagues
Find It Is Not 'Complete'
Even Though 'Correct.'

SEE FULLER ONE POSSIBLE

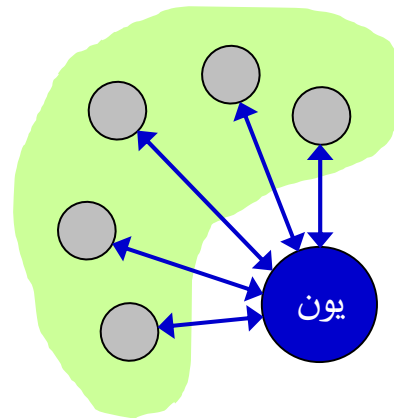
Believe a Whole Description of
'the Physical Reality' Can Be
Provided Eventually.

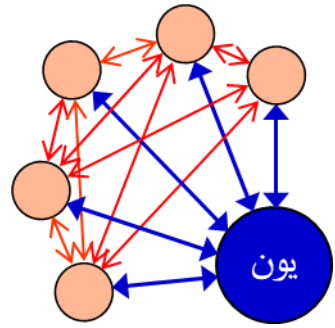
$$\left(\sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2} + \underbrace{\sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}_{\text{همبستگی الکترونی}} + \sum_{i,\alpha} \frac{-Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} \right) \Psi_e(\mathbf{r}_i) = E_n(\mathbf{R}_\alpha) \Psi_e$$

همبستگی الکترونی



Walter Kohn



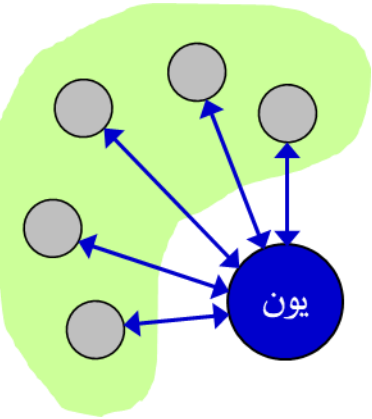


$n(\mathbf{r})$

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

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

$n(\mathbf{r})$



تقریب‌های مختلف تبادلی - همبستگی

⋮



GW



ACBN0



Hybrid

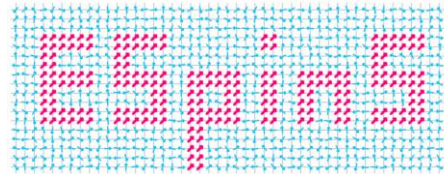
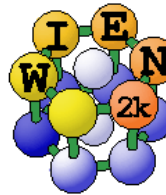
mGGA



GGA

LDA



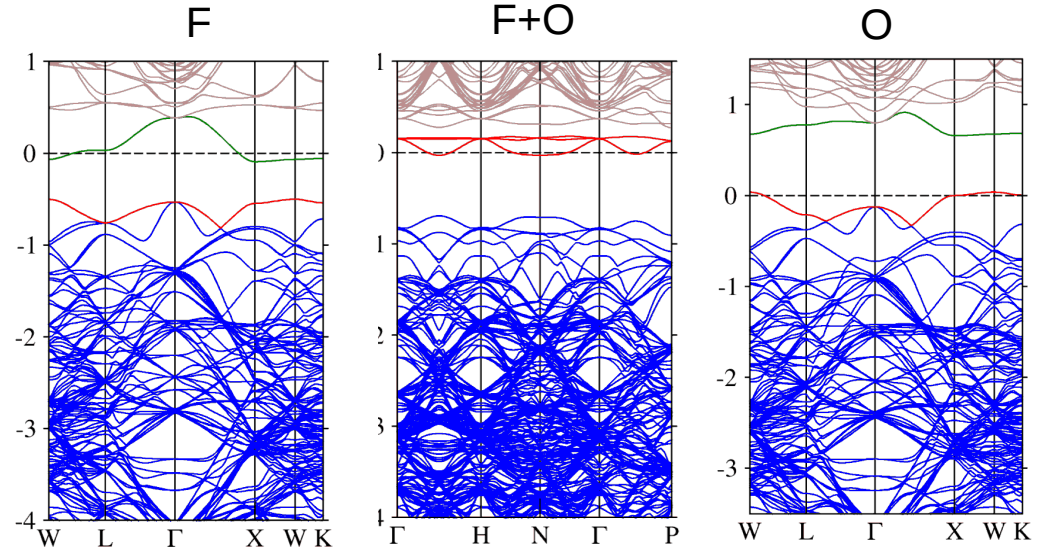
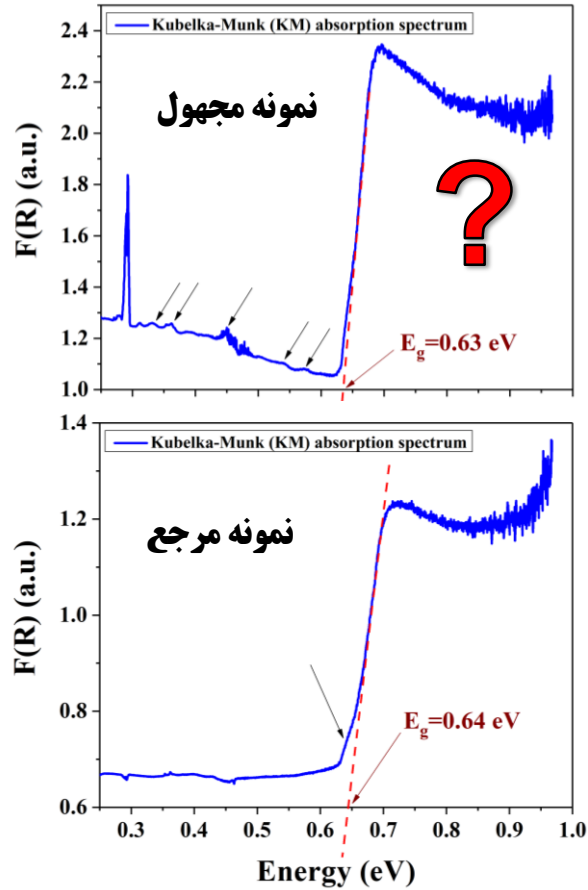


پیش‌بینی خواص مواد، بدون نیاز به داده‌های آزمایشگاهی

محاسبات ابتدا به ساکن کوانتومی، خواص مواد را با دقت خوبی پیش‌بینی می‌کند:

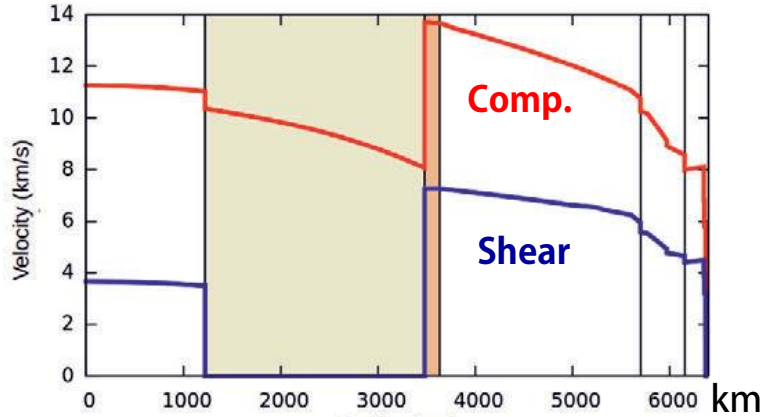


- تحلیل نتایج آزمایشگاهی پیچیده
- شبیه‌سازی شرایط آزمایشگاهی غیرمتعارف
- جستجوی مواد جدید با خواص مطلوب

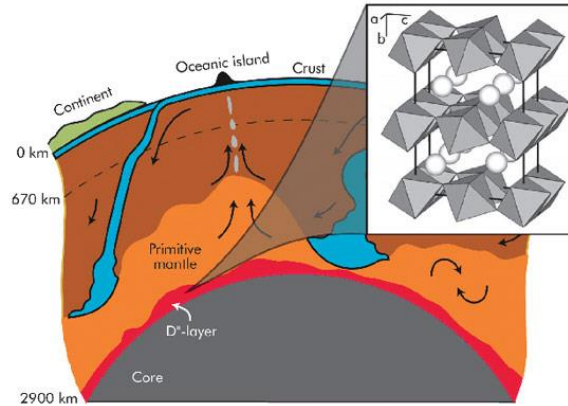
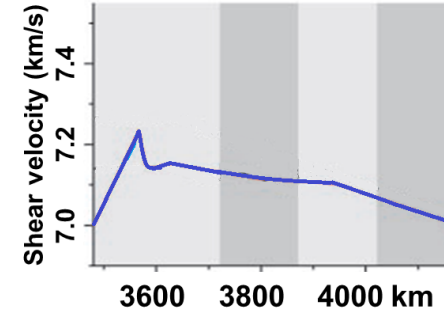


بررسی مواد در شرایط غیرعادی (فشار بسیار بالا)

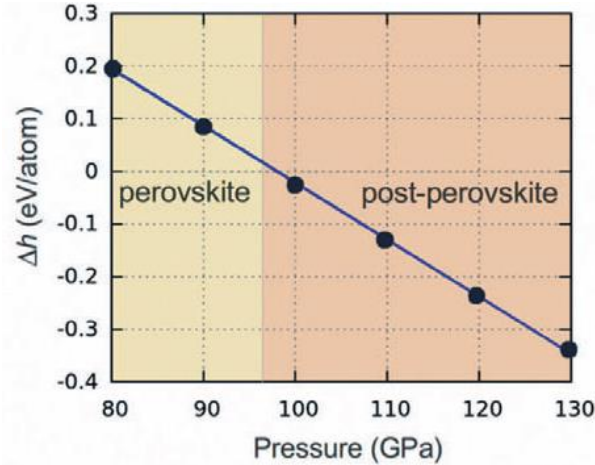
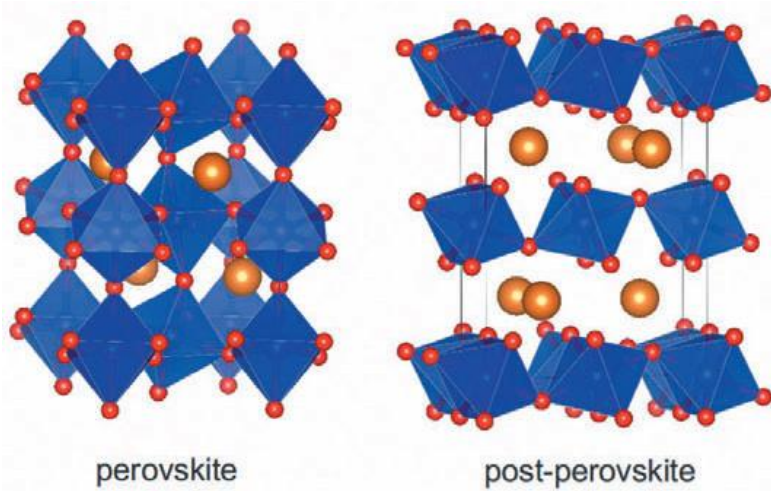
Physics of the Earth and Planetary Interiors (1981) 297



Science (1999) 1326

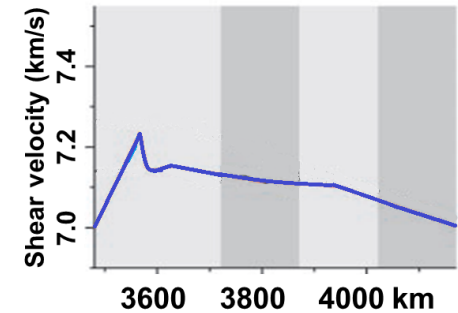


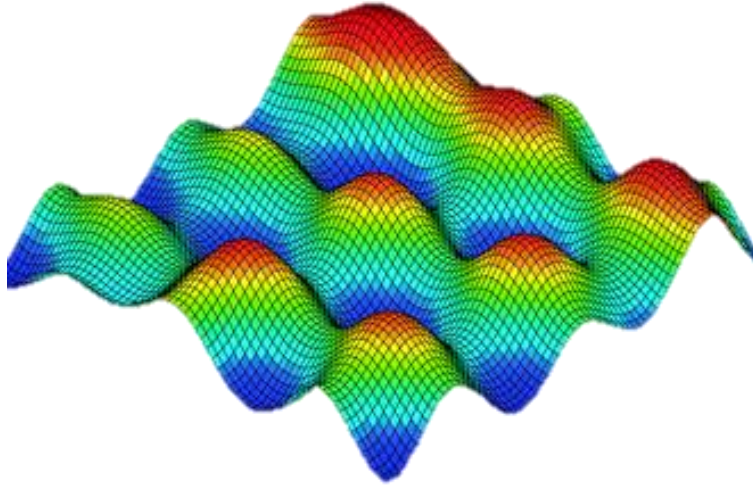
بررسی مواد در شرایط غیرعادی (اعماق زمین)



	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)



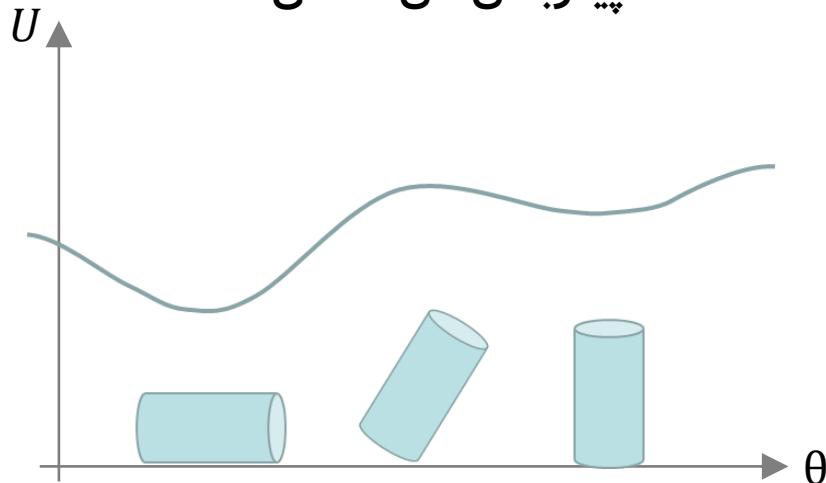


- ساختارهای مختلف یک ماده
- طیف ارتعاشی مواد
- خواص ترمودینامیکی مواد
- خواص شیمیایی

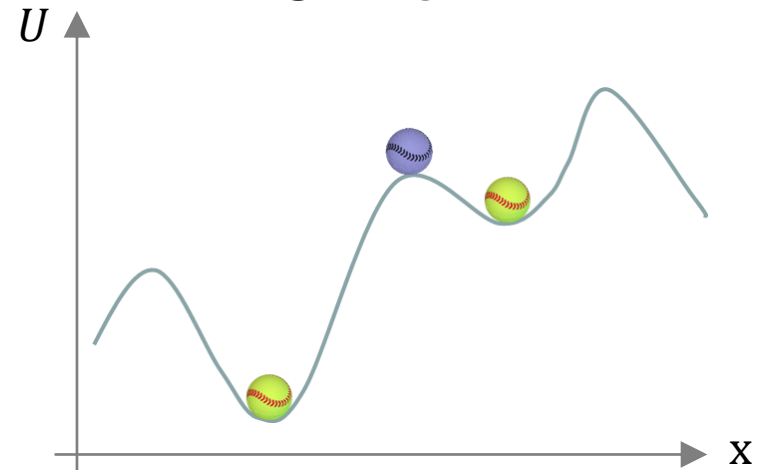
$$\left(\sum_{\alpha} \frac{-\nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \sum_{\alpha > \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} + E_n(\mathbf{R}_{\alpha}) \right) \Psi_I(\mathbf{R}_{\alpha}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(\mathbf{R}_{\alpha})$$

هسته‌ها

پیکربندی‌های تعادلی

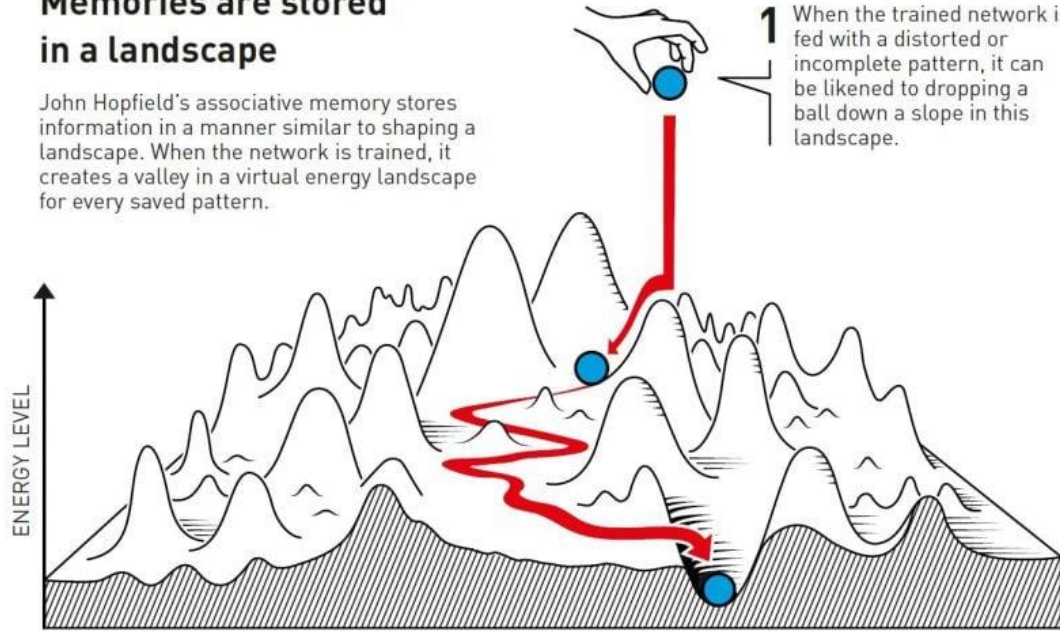


مکان‌های تعادلی



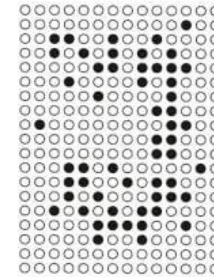
Memories are stored in a landscape

John Hopfield's associative memory stores information in a manner similar to shaping a landscape. When the network is trained, it creates a valley in a virtual energy landscape for every saved pattern.

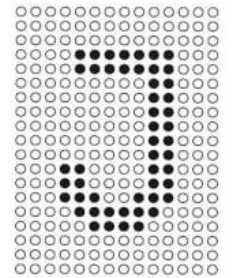


1 When the trained network is fed with a distorted or incomplete pattern, it can be likened to dropping a ball down a slope in this landscape.

INPUT PATTERN



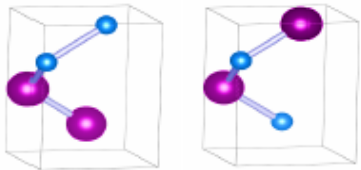
SAVED PATTERN



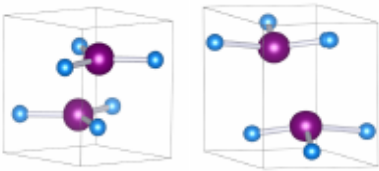
2 The ball rolls until it reaches a place where it is surrounded by uphill. In the same way, the network makes its way towards lower energy and finds the closest saved pattern.

عملگرهای تولید ساختار

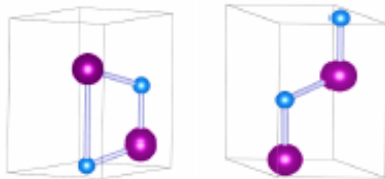
جایگشت



جهش نرم



وراثت



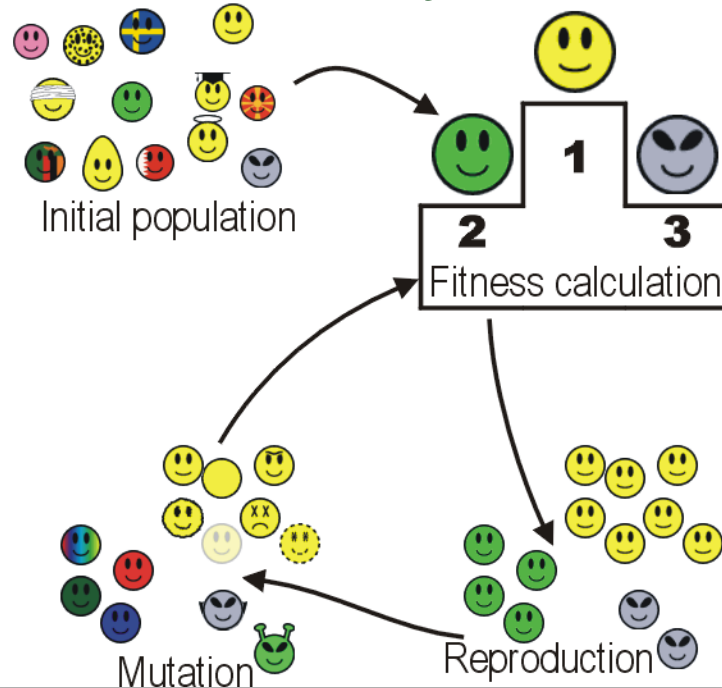
(ب) - والد

(الف) - والد



شکل ۶.۲ - فرزند

Evolutionary search

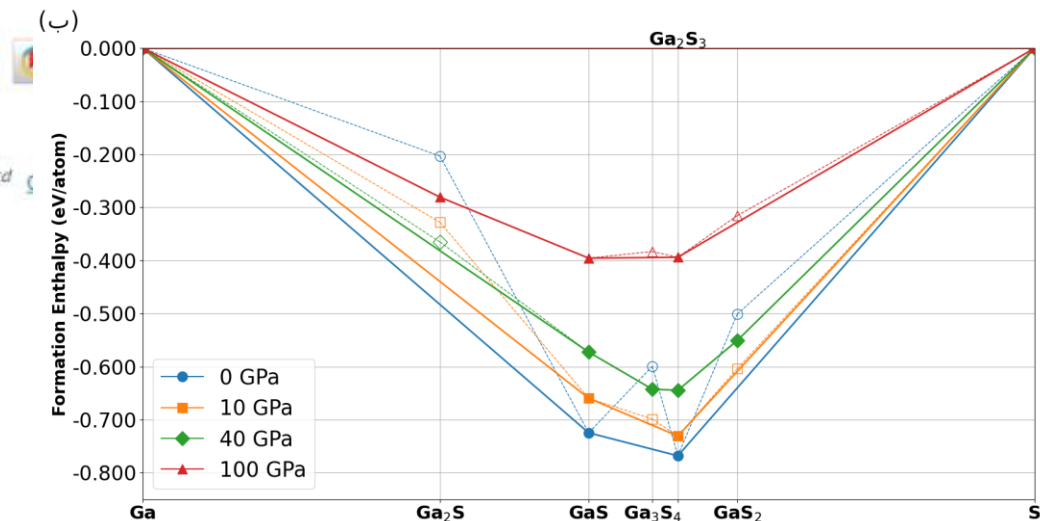




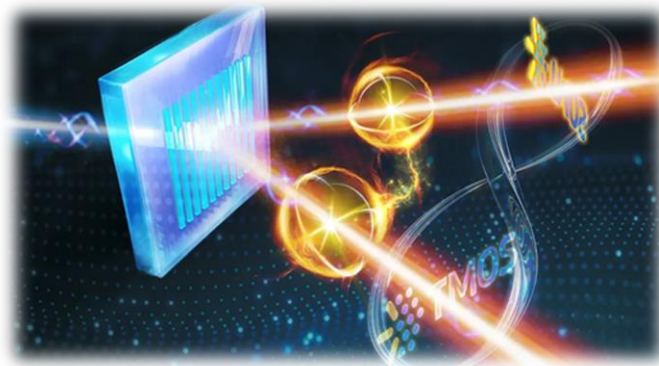
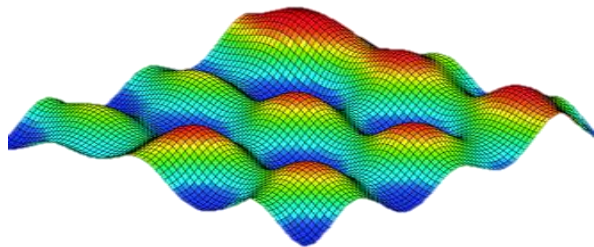
From the journal:
Physical Chemistry Chemical Physics

Prediction of novel gallium–sulfur compositions under pressure†

Reza Shahsavari,^{ab} Sylvain Pitié,^a Somayeh Faraji,^{ib} Lewis J. Conway,^{cd} S. Javad Hashemifar,^e Alireza Shahidi^b and Gilles Frapper^{ib} *^a



کوانتم: فرمانروای جهان ناشناخته‌ها



$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{c} \text{die 1} \\ \text{die 2} \end{array} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{c} \text{die 1} \\ \text{die 2} \end{array} \right\rangle$$

