

מולקולות - מבט לקשר בימי

שאלה:

מבט לקשר
קשר בימי
הולדת
המחנה
ציונים
את השני!
ה-ה משמש
כ"כ"ה" שונים
משה
אנטי-סמית
הציונים

בפנינו בעל הקורס נפתח במטרה הקונטקסט בפני לפנינו באופן סדר
ומדקדקת האוניברסיטה את הכלים האנטי-אויטובוס האומצות נהגש כימאש
למאד מדכנת מולקולריות בען אויבוסלש מולקולריות, צינוריות רמות,
עצם קיש הקשר הבימי, רמות Homo-1 סמטל וכו'...
המאד למדכנת אטומית, בהואיט עספל המדכנת מולקולריות אומ נתקלם
הבעה זה-לרדיות (ובצ"כ אם זה אלקטריות) אשר הופכת לסמכה
היותם.

סוגי נוספת: און
נבואת אבישית הקיש
→

אתם הבאות המככזות שמתארות בהיותם עספל המדכנת מולקולריות
היא הזכרה שהציונים תופשים לכוז. כאשר פסג את אולש היתון נפסג
מתאד הערון ע"י המדבר למדכנת מככז העסה. כאשר אולשמה
זה-ול הנחמ הקורה כי הערון לכוז כמות כימאכז העסה למדכנת
נחמא בקורה במככז הקשר. העסה זו היותם העסה היתון נפסג
האלקטריות הטם משמעותית מעסה הציונים ולפן תגדש מהורה
באופן משמעותית המדכנת הערון ולפן נעל בקורה למאד את תגדש כוילו
היונאסית תסת היספית השכה של הערון היותם.

המאד
המככז
מולקולריות
למככז העסה
לכוז לכוז
את הבחנה
עצמן נעות עס
המאד היתון
אלקטריות
לכוז עס
וקרבות
המולקולריות.

אומד הכימאן בצוק צומע בהיסוסל אתר הקוונטם המפורסמש היותם במטרת
הקונטקסט - קופנה הורן - אולפרייט Bohr-oppenheimer. אס המדכנת
המולקולריות הציונים במככז משמעותית המולקולריות. אולפלו דבור הערון
הקל היותם (המחמאן) ונתם המסות לצול משלוס-סכוז עוצל. עסן קוונט הפרכה בסקלת
הצומע של תגדש האלקטריות והתגדש היותם של הציונים ססיה מככז

אולפרייט -
מאד כככז
הואש
בכרית המהאן.
עסמא
עסמא

העסה של המולקולריות. עסן, נותן עומע בקורה כי כאשר המולקולריות נדש
עספי מתכזו תגדש רבם הטם מנישש כי העלצ הציוני היותם קפוטו ולפן נעל
לפמא את הבחנה המולקולריות בקורה כוילו הציונים עסמא. כחמאש
תמאק כסת עסמא קולריות צינוריות ונקפוט את מיקוש הציונים אזי ככל מתק
בין-לציוני קבוע שבהר המולקולריות יחוש פוטנעל מככזי שום ולפן
פיעון הבחנה המולקולריות היותם שום אומ המושעה המולקולריות תסת שום.

משוואת שרדיונגר אונתה נכתב לפיכך היום:

$$\hat{H}\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Phi(\vec{r}, \vec{R})$$

כאשר פני העל Φ תלויה הן בקואורדינטות הצדדיות \vec{R} והן בקואורדינטות האלקטרוניות \vec{r} .

כעת במטרה קורב בויקואורדינטות אנו משכתבים את פונקציית העל הבולטת באופן הבא ואלו העלית הלליות:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \chi(\vec{R})\Psi_{el}(\vec{r}; \vec{R})$$

$\chi(\vec{R})$ - תלויה הפונקציה הצדדית והוא תלויה בקואורדינטות הצדדיות בלבד.

א- Ψ_{el} תלויה הפני האלקטרונית והוא תלויה הן בקואורדינטות הצדדיות והן בקואורדינטות האלקטרוניות.

לכאורה לא צריע פלוס הצומת טובה זו שכן $\chi(\vec{R}) \neq 1$ אנו תווצרש לבדנה העקביות. אז בסת"ב השמנו Φ נותנת לפיכך כמעט כל פני χ שיתלמה יהי ה- \vec{R} בפני שיתלמה הן ה- \vec{R} והן ה- \vec{r} .

אולם כפי שאנו מקורב, צדקה יפוצת סקלת הזמנע בין התווצר הצדדית לתוצר האלקטרונית, מיקום הצדדיות אנו משמע צימני הקורה בויק-

אופנהייטר שכן מיקום צב קטאו ורען פני העל האלקטרונית תלויה ה- \vec{R} יק פיעטרת - יואו מיקום תתב צורה שונה עבור כל- \vec{R} נתון אך לא באופן צימנתי כי אנו

באופן פיעטרו (המשוואה תופת האלקטרונית בהוספת \vec{R} קטאו) שכן סימנה זג - $\Psi_{el}(\vec{r}; \vec{R})$. \vec{R} נכנס כפרמטר למשוואת האלקטרונית הצדדית \vec{r} הוא משמע צימנתי עבורו

אנו פורסע את המשוואה הצדדית - משוואת שרדיונגר הסטנדרטית האלקטרונית

כעת אנו הצדדיות קטאוש אנו וכולש, עבור הגדה האלקטרונית, ארופס את ישועת האנפיה, הקושת שרש כלום את $\hat{T}_N(\vec{R})$ ולתצדדי המילטונאן האלקטרונית שהוא כלל האברים פרי לאנפעה הקושת של הצדדיות:

$$\hat{H}_{el} = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{nn} = \hat{H}_{el}(\vec{r}; \vec{R})$$

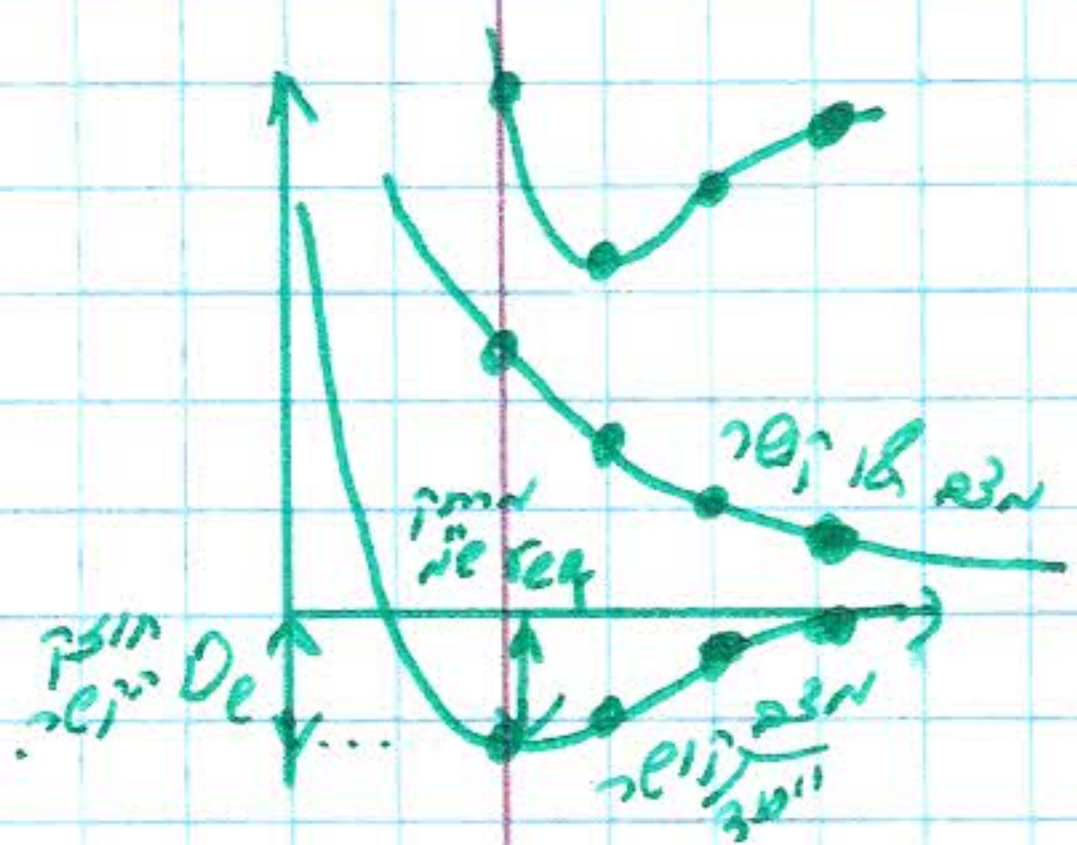
\hat{V}_{nn} נהפאו ה- \vec{R} וה- \hat{V}_{ee} קבוע!

כעת נכתב לפיכך משוואת שרדיונגר מתקבת עבור המילטונאן קבוע \hat{H}_{el}

$$\hat{H}_{el}\Psi_{el}(\vec{r}; \vec{R}) = E_{el}(\vec{R})\Psi_{el}(\vec{r}; \vec{R})$$

משוואת שרדיונגר האלקטרונית:

15 המשוואה
התבצרת ההוד
ספר אלקטרוני
מלקואורו.

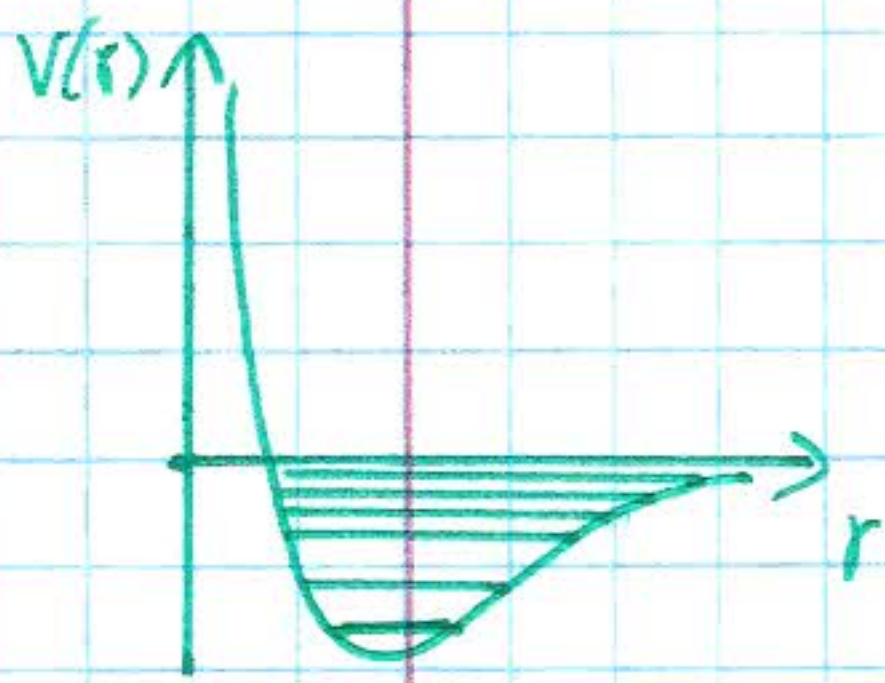


אם נשנה לצומחא של מולקולה 3-טומונית אזי,
 צורה של מולקולה צדונית הוא נפתר את משוואת שרדונגר
 הווקטורית נקבל את כל רמות האנרגיה האלקטרונית
 מולקולריות בצורה לפיכך רופש הרמת פיקובלע זכור

אנחנו המיון. כשמתברר את כל התקנות פסיכטית רמת הייסוד בכל אותה מן המיתקנים
 מקבלים את מסת הפוטנציאל של מעב הייסוד. באופן צורה ניתן להכביע את
 מסת הפוטנציאל של המעב המזכור הטושון וכו'...

מזהים אלקטרונים ממורים ז"י מזהים הון הרמת השנית הזרע שצדונית מולקולריות
 ממאיות כמנועה אוסצילטות עם פני מסת פוטנציאל קומפוזיטיון. סמוך לאננימים
 של מסת קושר הפוטנציאל ניתן הקרובה להיכתב כפוטנציאל הרמות ואז המנועה
 הנוכחיות נותנת ~~אננימים~~ ז"י פני המל של אוסצילטור הרמות והרמות הווקטוריות

היינה המל פטל $E_n = \frac{h^2 k^2}{2m}$ כאשר k - מספר הווקטורית כק $k = \frac{2\pi}{a}$
 a - המעב המפוטנציאל, a - קוטר הקופל שנקבע מתק הדיומיות של הפוטנציאל:



חשוב לצביר שצבו ימאר מקורה שמתקבל מתוך קורה
 הון האופנהיימ אופש המפס הפציה של המנועה
 הווקטורית והתמנעה הרדיונית (ווקטוריות והטכניות).

מחשבת פונקציות גליות במרחב תלת-ממדי

נכות כעת באופן מתמטי כי הבע משוואת שרדונגר המעובה למשוואה ווקטורית
 (למשוואה צדונית) (אותה טרס כאינו) הויה תפסה וכו' המפסל המקורה אותה המנועה
 זמקלה הויה המוסס כולל בתחתיו המל כמפסל.

כפי שצבר הצברת משוואת שרדונגר המעובה הויה:

$$\hat{H} \Phi(\vec{r}, \vec{R}) = E \Phi(\vec{r}, \vec{R})$$

ורמאנו:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \chi(\vec{r}) \psi_{ee}(\vec{r}, \vec{R})$$

כעת

$$\hat{H} = \hat{H}_{ee} + \hat{T}_N$$

אופן:

$$(\hat{H}_{ee} + \hat{T}_N) \chi \psi_{ee} = E \chi \psi_{ee}$$

כיון ש- \hat{H}_{el} איז אנטל נגזרות פו \vec{R} נקטל כ"י:

* $\hat{H}_{el} \chi \psi_{el} = \chi \hat{H}_{el} \psi_{el} = \chi E_{el}(\vec{R}) \psi_{el} = E_{el}(\vec{R}) \chi \psi_{el}$

כער נעבונג האוהר:

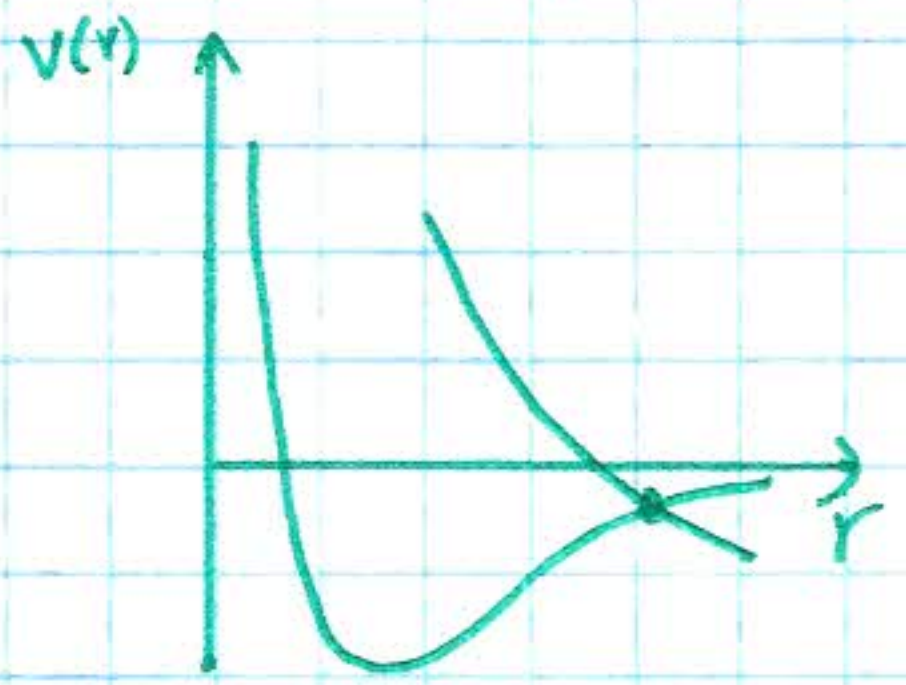
$\hat{T}_N [\chi \psi_{el}] = (\hat{T}_N \chi) \psi_{el} + \chi (\hat{T}_N \psi_{el}) + 2 \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial \chi}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial \psi_{el}}{\partial \vec{r}_i}$

$\hat{T}_N \psi_{el} \approx 0$; $\frac{\partial \psi_{el}}{\partial \vec{r}_i} \approx 0$ האמאכט קורנע בונן אונטריינט נחת כ"י

כק ע:

* $\hat{T}_N [\chi \psi_{el}] \approx (\hat{T}_N \chi) \psi_{el}$
נייט \vec{R}

אנדער אונטערס כ"י האלטן פו העל האלקטרונע הקואורדינאטע הערזיניווע הינו תלשה. קורנע צב נסבד כאס-אקורבוס לעקורנע הען עקוואט פוטנטיאל תוצות האות אור השניה:



המשפ שכתב כאסר האדרכת העקובת לעקובת
הי העקוואט תוצות האות אור השניה האדרכת צמחה
"עמנוך" על אויכו עקוואט להמיוק אמצ. אסג הוא עוקבת

אדקוואט אונטער לעאכרת אזי העל שמי קונוט בפול העל לען ψ_{el} תמה תלנויה חזק
ה- \vec{R} ואמנים קאטעס ה- \vec{R} יניבו שמיים עקוואט ה- ψ_{el} כק פלא נאכ
להצגות אור האוקרעס שמיאמ כקאטעס.
כער נעבונג האוהר האשוות ערנוער האמארה:

$\left\{ [E_{el}(\vec{R}) + \hat{T}_N] \chi(\vec{R}) \right\} | \psi_{el}(\vec{r}, \vec{R}) \rangle = E \chi(\vec{R}) | \psi_{el}(\vec{r}, \vec{R}) \rangle$
כ"י ע"י $\chi(\vec{R})$

כער נעבונג אור $\langle \psi_{el}(\vec{r}, \vec{R}) |$ כאסר נעבונג אונטריינט ע"י הקואורדינאטע האלקטרונע
ע"י ע:

$\langle \psi_{el} | [E_{el}(\vec{R}) + \hat{T}_N] \chi(\vec{R}) | \psi_{el} \rangle = \langle \psi_{el} | E \chi(\vec{R}) | \psi_{el} \rangle$

אקספארה שמוקדעס סה "סעכס" תלנויה קק- \vec{R} בערע שמיאמ ערנויה האונצות
ע \vec{r} לען יס ינאסר קצבית שמיאמ אונטערס האונגן האוהר:

$[E_{el}(\vec{R}) + \hat{T}_N] \chi(\vec{R}) \langle \psi_{el} | \psi_{el} \rangle = E \chi(\vec{R}) \langle \psi_{el} | \psi_{el} \rangle$
1 1

הערה:
אין שמיאמ אונטערס
העל העל כאסר
ע"י ע

אקובלנט את המשוואה הרדיואלית:

$$[\hat{T}_N + E_{el}(\vec{R})] \chi(\vec{R}) = E \chi(\vec{R})$$

$$\hat{H}_{el} \Psi_{el}(\vec{r}; \vec{R}) = E_{el}(\vec{R}) \Psi_{el}(\vec{r}; \vec{R})$$

וזכר שאת נכנס סובל את המשוואה האלקטרונית:

- ולכן תתן קורב בוק-אופנהיים פתרון משוואת שדה אלקטרוני באופן הבא:
- כתוב את המשוואה האלקטרונית עבור אולם של קונפיגורציה רדיואלית \vec{R} לכתוב משתת פוטנציאל אלקטרוני $E_{el}(\vec{R})$ (אולם של משתת פוטנציאל אלקטרוני של המערכת). המשוואה האלקטרונית פתרון המשוואה ומכאן את ה"קונפיגורציה" של האלקטרונית.
 - הצב את משתת הפוטנציאל האלקטרוני המשוואה הרדיואלית של המערכת כפוטנציאל לתמונה הרדיואלית אשר פתרון ייתן את ה"קונפיגורציה" של צורת המערכת הרדיואלית (הקטנה, והגדולה ואינרציה של המערכת למערכת מככ העשרה).

סיון המשוואה סובל המערכת הרדיואלית מנוכח סקאל פורמליזם המשוואה פתרון המשוואה הרדיואלית "נדרש" על ידי משתת הפוטנציאל האלקטרוני הקורב בוק-אופנהיים.

אשר כן, הודעת בצורה משוואת את סבוכות הגדולה של המשוואה המערכת $3N+3M$ ציבור תופש לפי משוואת המערכת $3N$ צ"ח והערה בעלת $3M$ צ"ח.

מדינה ואולם אמנאל אק ורק המשוואה האלקטרונית בעלת $3M$ צ"ח. המולקולות המשוואה בה נאלץ היום המולקולות H_2^+ ממש נלמד עקרונות במבטל הגדולה היום בעדה רמת-אופות (2 ציבורים ו-1 קורב) אק טיון שמו מקפואם את המדומש הגדולה הופפת עבודה חד-צורת והטוב בעלת פתרון אנליטי (יש עבור קואורדינטות אנליטיות). אנו לא נלמד את הפתרון האנליטי אלא נלמד עקרונות עקרוני פתרון הגדולה המולקולות.