



دانشگاه پیام نور

شیمی کوانتومی

(رشته شیمی)

دکتر قاسم خدادادی

بسم الله الرحمن الرحيم

پیشگفتار ناشر

کتاب‌های دانشگاه پیام نور حسب مورد و با توجه به شرایط مختلف یک درس در یک یا چند رشته دانشگاهی، به صورت کتاب درسی، متن آزمایشگاهی، فرادرسی، و کمک‌درسی چاپ می‌شوند.

کتاب درسی ثمرهٔ کوشش‌های علمی صاحب اثر است که براساس نیازهای درسی دانشجویان و سرفصل‌های مصوب تهیه و پس از داوری علمی، طراحی آموزشی، و ویرایش علمی در گروه‌های علمی و آموزشی، به چاپ می‌رسد. پس از چاپ ویرایش اول اثر، با نظرخواهی‌ها و داوری علمی مجدد و با دریافت نظرهای اصلاحی و متناسب با پیشرفت علوم و فناوری، صاحب اثر در کتاب تجدیدنظر می‌کند و ویرایش جدید کتاب با اعمال ویرایش زبانی و صوری جدید چاپ می‌شود.

متن آزمایشگاهی (م) راهنمایی است که دانشجویان با استفاده از آن و کمک استاد، کارهای عملی و آزمایشگاهی را انجام می‌دهند.

کتاب‌های فرادرسی (ف) و **کمک‌درسی** (ک) به منظور غنی‌تر کردن منابع درسی دانشگاهی تهیه و بر روی لوح فشرده تکثیر می‌شوند و یا در وبگاه دانشگاه قرار می‌گیرند.

مدیریت تولید محتوا و تجهیزات آموزشی

فهرست مطالب

یازده	پیشگفتار
۱	فصل ۱- مکانیک کلاسیک منظومه‌های ذره‌ای
۱	۱. مختصات و درجه‌های آزادی منظومه
۲	سرعت و تکانه ذره
۳	۲. مطالعه دیفرانسیل حرکت (معادله نیوتن)
۴	تکانه زاویه‌ای
۶	کار، انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل
۸	اصل بقای انرژی (پایستگی انرژی)
۹	۳. مکانیک لاگرانژ، هامیلتون و ژاکوبی
۱۰	اصل هامیلتون یا اصل مینیمم یا ماکسیمم بودن عمل
۱۲	مختصات تعمیم‌یافته
۱۳	تابع هامیلتون
۱۹	فصل ۲- پایه‌های مکانیک کوانتومی
۱۹	مقدمه
۲۰	۱. آزمایش دو شکاف
۲۵	۲. رابطه دوبروی
۲۷	۳. اصل عدم قطعیت یا اصل نامعینی
۳۰	تمرین
۳۵	فصل ۳- اصول موضوعه مکانیک کوانتومی
۳۵	۱. تابع موجی یا تابع حالت و اصل موضوع اول
۳۸	شرایط مرزی و نرمالیزه بودن تابع موجی
۴۰	۲. اصل موضوع دوم
۴۵	اپراتور خطی
۴۵	اپراتور هرمیتی

۴۷	اپراتور انرژی پتانسیل
۴۷	اپراتور انرژی جنبشی
۴۸	اپراتورهای هامیلتونی
۴۹	تابع ویژه و مقدار ویژه یک اپراتور
۵۰	خلاصه مطالب مهم درباره اپراتورها
۵۲	۳. اصل موضوع سوم
۵۶	۴. اصل موضوع چهارم، معادله شرودینگر
۵۷	تجزیه معادله شرودینگر تابع زمان
۵۹	معادله شرودینگر مستقل از زمان
۶۱	تبعیت زمانی حالت‌های ایستا
۶۳	شرایط آغازی چیست؟
۶۳	تمرین
۶۵	فصل ۴- مطالعه چند الگوی کوانتومی ساده
۶۵	۱. ذره آزاد
۶۷	مقدار قابل انتظار P_x
۶۸	رابطه عدم قطعیت
۶۹	بسته موج
۷۰	۲. ذره در جعبه یک‌بعدی
۷۴	نرمال کردن توابع موجی
۷۶	دانسیته احتمال
۷۷	انرژی حالت‌های ایستا
۸۳	۳. ذره در جعبه سه‌بعدی
۸۶	حالت مخصوص
۸۹	نتایج مهم حاصل از الگوی ذره در جعبه سه‌بعدی
۹۲	بازگشت به خواص اپراتورها
۹۲	متعامد کردن توابع ویژه اپراتور $\hat{H}$
۹۵	۴. نوسانگر هارمونیک
۹۸	دیدگاه کوانتومی
۱۰۲	حل معادله دیفرانسیل هرمیت
۱۰۴	توابع ویژه نوسانگر هارمونیک
۱۰۷	حالت‌های نوسانگر هارمونیک
۱۰۸	مقادیر قابل انتظار انرژی، مکان و تکانه
۱۱۱	حرکت ارتعاشی مولکول‌ها
۱۱۱	تجزیه حرکت مولکول
۱۱۵	تقریب هارمونیک و حدود آن
۱۱۸	۵. چرخنده صلب
۱۲۲	ترازهای انرژی
۱۲۳	نرمال کردن تابع موجی
۱۲۴	حرکت چرخشی مولکول دواتمی در صفحه ثابت
۱۲۷	تکانه زاویه‌ای چرخنده صلب در صفحه
۱۳۴	فصل ۵- حرکت در فضای سه‌بعدی

۱۳۴	۱. تکانه زاویه‌ای
۱۳۴	۲. اپراتورهای وابسته به تکانه زاویه‌ای
۱۳۶	مفهوم فیزیکی جابه‌جاپذیری اپراتورها
۱۳۸	۳. عبارت $\hat{L}_z, \hat{L}^2$ در مختصات قطبی (کروی)
۱۴۱	۴. توابع ویژه و مقادیر ویژه اپراتور L^2
۱۴۳	حل معادله حاوی θ - معادله لژاندر
۱۵۲	پیدایش حالت‌های هم‌تراز
۱۵۳	مولکول خطی در تقریب چرخنده صلب

۱۵۵	فصل ۶- اتم هیدروژن
۱۵۵	۱. هامیلتونی سیستم دو ذره‌ای
۱۶۱	۲. جستجوی تابع $R(r)$
۱۶۴	چندجمله‌ای‌های لاگر
۱۶۶	۳. حالت‌های کوانتومی و انرژی‌های الکترونی اتم تک‌الکترونی
۱۶۹	۴. نامگذاری حالت‌های کوانتومی اتم تک‌الکترونی
۱۷۱	۵. طرز نمایش و تعبیر فیزیکی اوربیتال‌های اتمی
۱۷۳	رسم تغییرات تابع توزیع شعاعی
۱۷۳	رسم تغییرات ψ و $ \psi ^2$ به ازای r و ϕ و θ ثابت
۱۷۶	سطوح تک‌دانسیته
۱۸۱	۶. ترازهای انرژی و طیف نشری اتم هیدروژن
۱۸۵	۷. اسپین الکترون
۱۹۰	رابطه بین تکانه زاویه اسپین و ممان مغناطیسی
۱۹۲	۸. نظریه اسپین. ماتریس‌های پائولی
۱۹۵	توابع اسپین
۱۹۵	توابع ویژه اپراتور $\hat{S}_z$
۱۹۶	تابع موجی کامل وابسته به الکترون یا اسپینوربیتال

۱۹۹	فصل ۷- اتم‌های چندالکترونی
۱۹۹	مقدمه
۲۰۰	روش‌های تقریبی
۲۰۰	روش تغییر پارامترها
۲۰۶	روش محاسبه اختلال
۲۰۸	اختلال مرتبه اول
۲۱۰	۲. معادله شرودینگر برای اتم چند الکترونی
۲۱۲	مدل ذره مستقل
۲۱۳	اتم هلیوم
۲۱۶	تقریب اسلیتر
۲۱۷	حالت اصلی اتم هلیوم با روش اختلال
۲۱۹	۳. تمیزناپذیری ذره‌ها و اصل طرد پائولی
۲۲۰	کاربرد اصل پائولی در اتم هلیوم
۲۲۲	حالت برانگیخته اتم هلیوم

۲۲۳	توابع موجی برای سیستم‌های چندالکترونی
۲۲۵	۴. حالت‌های کوانتومی اتم یا جمله‌های طیفی
۲۲۶	روش راسل – ساندروز
۲۳۱	انرژی‌های نسبی حالت‌های کوانتومی اتم
۲۳۲	قاعده اول هوند
۲۳۲	قاعده دوم هوند
۲۳۲	قاعده سوم هوند
۲۳۴	۵. روش هارتری – فوک یا روش میدان خودسازی (SCF)
۲۳۸	قضیه کوپمان
۲۳۹	اوربیتال‌های اسلیتر
۲۴۲	تمرین

فصل ۸- ساختار الکترونی مولکول‌های دواتمی

۲۴۵	مقدمه
۲۴۵	۱. تقریب بورن اپنهایمر- مولکول H_2
۲۴۶	۲. حل تقریبی معادله الکترونی مولکول- روش MO – LCAO
۲۵۱	یون مولکول H_2^+
۲۵۲	محاسبه HAA و HAB
۲۵۷	تغییرات چگالی توزیع بار برحسب فاصله دو هسته
۲۵۹	۳. تقارن اوربیتال‌ها
۲۶۰	انرژی حاصل از روش LCAO با توابع ψ_+ و ψ_- و قضیه ویرال
۲۶۳	۴. طبقه‌بندی حالت‌های مولکولی
۲۶۴	۵. مولکول هیدروژن
۲۶۶	۶. مولکول‌های دواتمی هم‌هسته
۲۷۴	نمودار همبستگی
۲۷۴	نمودار تراز انرژی اوربیتال‌های مولکولی
۲۷۸	نقش اوربیتال‌های درونی
۲۸۳	۷. مولکول‌های دو اتمی ناهم‌هسته
۲۸۵	مقایسه نتایج تجربی با محاسبه نظری رانسیل
۲۸۷	مراجع فصل ۸
۲۹۰	

فصل ۹- نظریه اوربیتال مولکولی هوکل

۲۹۱	۱. تقریب هوکل
۲۹۱	۲. بوتادین
۲۹۱	نمودار تراز انرژی و آرایش الکترون‌های π
۲۹۷	محاسبه ضرایب C_1
۲۹۸	۳. بنزن
۳۰۰	محاسبه عددی
۳۰۲	تعیین انرژی اوربیتال‌های مولکولی
۳۰۴	اصل فرانک – کوندون
۳۰۵	قضیه کوپمان
۳۰۷	

۳۱۱	۵. پایه‌های طیف‌بینی مولکولی
۳۱۱	۵-۱ روابط اینشتاین
۳۱۶	رابطه ضریب جذب اینشتاین یا ضریب جذب تجربی
۳۲۰	۵-۲ احتمال جهش از دیدگاه کوانتومی
۳۲۱	۵-۳ قواعد انتخابی در جهش‌های الکترونی
۳۲۷	تمرین
۲۳۱	پیوست الف- سیستم مختصات خمیده متعامد
۲۳۵	پیوست ب- ماتریس وابسته به اپراتور
۲۳۹	پیوست ج- حالت‌های الکترونی اتم‌های چندالکترونی (جمله‌های طیفی)
۳۴۷	پیوست د- اثر اسپین- اوربیت
۳۵۱	پیوست ه- ثابت‌های فیزیکی

پیشگفتار

این کتاب برای استفاده دانشجویان دوره کارشناسی شیمی در چارچوب برنامه درس شیمی کوانتومی آن دوره نگاشته شده است. فصل اول آن مروری است بر اصول و معادلات مهم مکانیک کلاسیک که بدون علم بر آن‌ها درک عمیق و پایدار اصول و روابط مکانیک کوانتومی نیز حاصل نمی‌شود. فصل دوم خواننده را با چهره دوگانه ذرات ماده و پایه‌های فیزیکی اندیشه‌های کوانتومی آشنا می‌سازد، بی‌آنکه سیر تاریخی آن اندیشه‌ها بپردازد. فصل‌های بعدی منطبق با برنامه متداول درس شیمی کوانتومی در مراکز علمی معتبر تدوین شده است، جز اینکه در فصل‌های ۳، ۴ و ۵ کوشیده‌ایم که مطالب بازتر و با شرح و توضیح بیشتری ارائه شود. در پایان فصل نهم، مبانی طیف‌بینی، مبحثی که با دیگر مباحث شیمی کوانتومی ارتباط تنگاتنگی دارد به نگارش درآمده است و کتاب با چند پیوست، به‌منظور تکمیل برخی مطالب متن اصلی به پایان می‌رسد.

شیمی کوانتومی به گفته آیرینگ، و به معنای اخص، چیزی نیست جز کاربرد مکانیک کوانتومی در مسائل شیمیایی، و همواره به انبوهی از محاسبات دور و دراز ریاضی منجر می‌شود. اما هدف در اینجا ارائه اصول و روش‌های عمومی است که چنان محاسبات بر پایه آن‌ها آغاز و به پایان برده می‌شود، و در این محدوده نگارنده کوشیده است که تکیه بر جنبه‌های فیزیکی باشد و هر بار داده‌های تجربی را به یاری گرفته است. در ضمن بحث برخی نکات مهم و قضایا، و حتی عبارت‌ها عمداً تکرار شده تا

بہتر بہ خاطر سپردہ شود۔ فرمول نویسی نیز بہ سبک صریح و روشن شرو دینگر است و نیازی بہ انتخاب شیوہای دیگر حس نشدہ است۔

از اولیای محترم دانشگاه پیام نور کہ این فرصت را بہ من دادہ اند تا شمہای از مطالبی را کہ در مدت قریب بہ پنجہ سال مورد علاقہ و مطالعہ ام بودہ است با دانشجویان عزیز و اہل علم در میان بگذارم، بسیار سپاسگزارم۔ از ہمکاران ارجمند دانشکدہ علوم آن دانشگاه خصوصاً از آقای دکتر میرشکرای کہ در تمام مراحل تألیف این کتاب بندہ را یاری کردہ اند، و بخش تدوین، بہویژہ سرکار خانم قدیم خانہ کہ در انتشار این اثر سہم بسزایی داشتہ و در راہ تصحیح نسخہ رایانہای آن زحمت فراوانی کشیدہ اند، کمال امتنان را دارم، امیدوارم خوانندگان محترم نیز بہ غلطہای چاپی کہ بہ رغم اہتمام زیاد در تصحیح، ممکن است برجای مانده باشد و بہ دیگر کاستیہای موجود، بزرگوارانہ و با نظر اغماضش بنگرند۔

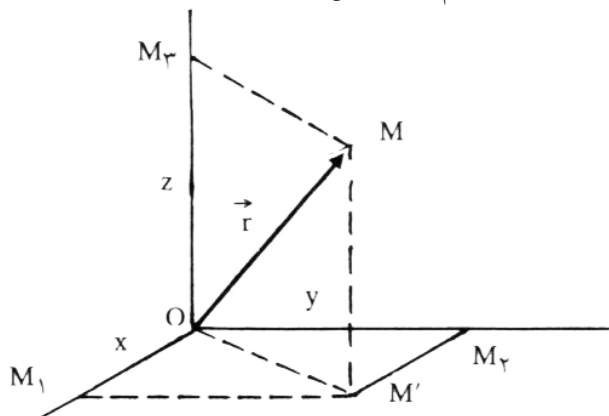
قاسم خدادادی۔ آبان ۱۳۷۶

فصل ۱

مکانیک کلاسیک منظومه‌های ذره‌ای

۱. مختصات و درجه‌های آزادی منظومه

مکانیک کلاسیک بر پایه فرض همگن بودن فضا و زمان، و با هدف مطالعهٔ نظام‌مند حرکت اجسام مادی تدوین شده است؛ و با به معادله گذاشتن حرکت یک نقطهٔ مادی آغاز می‌شود. حرکت باید نسبت به یک چارچوب معین که آن را ثابت فرض می‌کنند مطالعه شود. بدین منظور یک نقطهٔ مبدأ و سه محور گذرنده از آن انتخاب می‌شود که فضای حرکت را مشخص می‌کند و آن را در یک چارچوب مرجع (رفرنسیل) می‌نامند. با این انتخاب وضع نقطهٔ مادی M در فضا به وسیله بردار $\vec{OM}$ که بردار موضعی M نام دارد، یا تصاویر آن بر روی سه محور توصیف می‌شود. هرگاه سه محور انتخابی دوجه‌دو عمود بر هم باشند تصاویر بردار $\vec{OM}$ نسبت به آن‌ها را x, y, z نوشته و مختصات دکارتی می‌نامیم و گوئیم که هر نقطه مادی سه درجهٔ آزادی دارد. بردار موضعی را از این پس با نماد $\vec{r}$ نشان خواهیم داد (شکل ۱).



شکل ۱. چهارچوب مرجع، بردار موضعی و مختصات دکارتی نقطه M

بنا به نوع مسئله‌ای که در پیش است، الکترون، اتم، مولکول، اجسام معمولی و حتی اجرام کیهانی را نقطه مادی فرض می‌کنند، اما در اینجا موضوع بحث حرکت ذره‌ها و منظومه‌های متشکل از چند ذره خواهد بود. پس هر ذره در چارچوب مکانیک کلاسیک سه درجه آزادی دارد. اگر منظومه‌ای از N ذره تشکیل شده باشد، مانند مولکول که در نگاه اول از چند اتم تشکیل شده است، وضع آن در فضا با $3N$ مختصات دکارتی z_i, y_i, x_i (با $i=1,2,\dots,N$) مشخص و توصیف می‌شود. البته به جای مختصات دکارتی، مختصات دیگری هم برای ذره، یا ذرات می‌توان انتخاب کرد ولی به هر حال یک چارچوب مرجع ثابت باید در نظر گرفت و حرکت را نسبت به آن مطالعه کرد.

سرعت و تکانه ذره

هر ذره M ضمن حرکت در فضا تغییر جا می‌دهد و مختصات آن z, y, x بر حسب زمان t تغییر می‌کند. زمان در تقریب مکانیک نیوتونی متغیر مستقل محسوب می‌شود. سه تابع $z(t), y(t), x(t)$ منحنی‌ای را در فضای سه بعدی نمایش می‌دهند که مسیر ذره است.

سرعت ذره، بنا به تعریف، کمیتی است برداری که معمولاً با نماد $\vec{v}$ نشان داده می‌شود، و مؤلفه‌های آن v_z, v_y, v_x با روابط $v_z = \frac{dz}{dt} = \dot{z}$ ؛ $v_y = \frac{dy}{dt} = \dot{y}$ ؛ $v_x = \frac{dx}{dt} = \dot{x}$ و $v_z = \frac{dz}{dt} = \dot{z}$ معین می‌شود. پس سرعت ذره و مؤلفه‌های آن به نوبه خود تابعی از زمانند و جز در موارد استثنایی ثابت نمی‌مانند. سه رابطه بالا را در یک رابطه برداری می‌توان خلاصه کرد.

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} \quad (1-1)$$

به عبارت دیگر بردار سرعت، بنا به تعریف، مشتق نسبت به زمان بردار موضعی ذره است. تکانه خطی، یا به طور خلاصه تکانه ذره کمیتی است برداری همراستا با بردار سرعت و برابر با $m\vec{v}$ ، که در آن m جرم ذره است. پس مؤلفه‌های تکانه mv_x, mv_y

و $m\mathbf{v}_Z$ نوشته می‌شود. در تقریب نیوتنی m ثابت فرض می‌شود، اما فراموش کرد که بنا به یکی از نتایج اصلی نظریه نسبیت خاص، جرم با سرعت تغییر می‌کند و جز در مواردی که سرعت ذره بسیار کوچک‌تر از سرعت نور (امواج الکترومغناطیسی) در خلاء، c ، باشد نمی‌توان آن را ثابت دانست.^۱ این شرط در تمام حرکتهای معمولی و در بیشتر مسائلی که در قلمرو اتم و مولکول (نه ذره‌های بنیادی) مطالعه می‌شود صدق می‌کند.

۲. معادله دیفرانسیل حرکت (معادله نیوتن)

هرگاه $\vec{F}$ نیرو یا برآیند نیروهایی باشد که به ذره وارد می‌شود، بنا به اصل اساسی مکانیک کلاسیک داریم

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}) = \vec{F} \quad (2-1)$$

معمولاً بردار تکانه را با نماد $\vec{p}$ نشان می‌دهند. پس معادله برداری (۲-۱) معرف سه رابطه دیفرانسیل بین مؤلفه‌های تکانه از یک طرف و مؤلفه‌های نیرو از طرف دیگر است که نوشته می‌شوند:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}p_x &= F_x \\ \frac{d}{dt}p_y &= F_y \\ \frac{d}{dt}p_z &= F_z \end{aligned} \quad (3-1)$$

بدین ترتیب سه معادله دیفرانسیل مرتبه دوم نسبت به x, y, z و p_x, p_y, p_z برحسب t داریم. اگر مقادیر این کمیت‌ها را در لحظه $t=0$ (آغاز حرکت) داشته باشیم، جواب‌های کاملاً معینی به دست می‌آوریم که مسیر ذره و تکانه (یا سرعت) آن را در لحظه t دیگر حرکت معلوم می‌سازد. مقادیر مختصات را در لحظه $t=0$ شرایط آغازی می‌نامند.

تکانه زاویه‌ای

می‌دانیم گشتاور یک بردار $\vec{AB}$ نسبت به یک نقطه O حاصلضرب برداری $\vec{OA}$ در $\vec{AB}$ است^۱ (شکل ۲-۱)، حال اگر گشتاور دو طرف معادله (۲-۱) را نسبت به مرکز چارچوب مرجع، O بنویسیم، خواهیم داشت:

$$\vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F}$$

با توجه به خواص مشتق و حاصلضرب برداری می‌توان نوشت:

$$\frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}) = \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p}$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \text{ و از اینجا } \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p} = \vec{v} \times m\vec{v} = 0 \text{ و بنابراین}$$

$$\frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}) = \vec{r} \times \vec{F} \quad (۴-۱)$$

کمیت داخل دو کمان را **تکانه زاویه‌ای** می‌نامند که گشتاور تکانه نسبت به مبدأ مختصات، O ، است. و رابطه (۴-۱) یکی از روابط مهم مکانیک است، و بیان این مطلب است که مشتق تکانه زاویه نسبت به زمان، در هر لحظه، برابر است با گشتاور نیروی وارده بر ذره. تکانه زاویه‌ای را در اینجا با نماد $\vec{L}$ نشان خواهیم داد.

مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای - چون بنا به تعریف $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ ، مؤلفه‌های $\vec{L}$

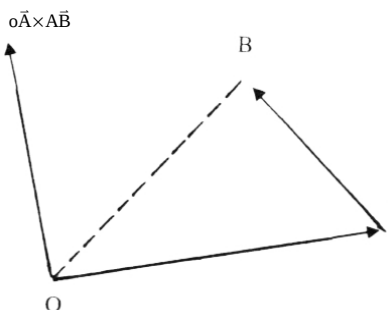
عبارت‌های زیر را دارد:

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y \\ L_y &= zp_x - xp_z \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \quad (۵-۱)$$

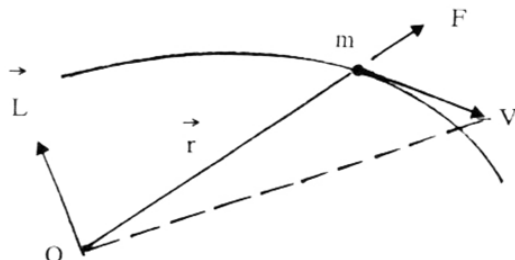
۱. رجوع به تعریف حاصلضرب برداری

مثال) حرکت تحت تأثیر نیروی مرکزی

هرگاه مرکز جاذبه یا دافعه را مرکز مختصات بگیریم، راستای $\vec{F}$ از آن مرکز، نقطه O می‌گذرد و گشتاور آن نسبت به O صفر است: $\vec{r} \times \vec{F} = 0$ زیرا که $\vec{F}$ و $\vec{r}$ در یک راستایند. از این جا $\frac{dL}{dt} = 0$ و این رابطه ایجاب می‌کند که $\vec{L}$ بردار ثابتی باشد.



شکل ۱-۲. $|\vec{oA} \times \vec{oB}| = AB \cdot oA \sin \alpha$ که در آن θ زاویه بین $\vec{oA}$ و $\vec{oB}$ است



شکل ۱-۳. گشتاور نیروی مرکزی نسبت به مرکز صفر است و L اندازه ثابتی دارد و عمود بر صفحه مدار است.

پس وقتی نیروی وارد به ذره از نوع نیروی مرکزی باشد، تکانه زاویه‌ای نسبت به مرکز نیرو یکی از ثابت‌های حرکت است. به همین ترتیب می‌توان ثابت کرد که اگر نیروی برآیند وارد به سیستم یک محور معین، مثلاً یکی از محورهای مختصات را قطع کند، مؤلفه تکانه زاویه‌ای در راستای آن محور در ضمن حرکت ثابت می‌ماند. این قضایا در مکانیک اتم اهمیت زیادی دارند.

کار، انرژی جنبشی و پتانسیل

مفاهیم نیرو و کار در واقع از زندگانی روزانه الهام شده و در علم مکانیک به صورت دقیق تری وارد و تعریف شده است. حرکت ذره M را تحت تأثیر نیروی $\vec{F}$ در مسیری مانند C در نظر بگیریم. بین دو لحظهٔ بینهایت نزدیک به هم t و $t + dt$ ذره جابه جایی بینهایت کوچک $d\vec{r}$ را پیدا می کند. اگر طول کمان پیموده شده dr باشد، بنا به تعریف کاری که نیرو در این تغییر مکان انجام می دهد مساوی است با حاصلضرب نرده ای دو بردار $\vec{F}$ و $d\vec{r}$ یعنی:

$$dW = \vec{F} \cdot d\vec{r} = F \cdot dr \cdot \cos \theta$$

که در آن θ زاویه بین دو بردار را نشان می دهد و $F \cos \theta$ مؤلفه نیرو در راستای مماس بر مسیر است. حال اگر ذره از نقطه A تا نقطه B برود، کار با انتگرال بر روی منحنی AB بیان می شود:

$$W = \int_A^B F \cdot \cos \theta dr \quad (6-1)$$

با استفاده از عبارت تحلیلی حاصلضرب نرده ای خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} W &= \int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z dz) \\ &= \int_A^B \sum F_i dx_i \quad ; x_i = x, y, z \end{aligned} \quad (7-1)$$

انرژی جنبشی

برای وارد کردن و یافتن عبارت انرژی جنبشی در مباحث مقدماتی حرکت راستخط را مثال می آورند؛ اما با توجه به فرمول (۷-۱) نیز به سهولت همان عبارت به دست می آید، داریم:

$$\begin{aligned} W &= \int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z dz) \\ &= \int_A^B (F_x v_x dt + F_y v_y dt + F_z v_z dt) \end{aligned}$$

و چون $F_x = m \frac{dv_x}{dt}$... پس $F_x v_x dt = v_x dv_x$ و دو رابطه مشابه دیگر، که می دهد:

$$W = \int_A^B (v_x dv_x + v_y dv_y + v_z dv_z) \\ = \left[\frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \right]_A^B$$

یا

$$W = \frac{1}{2} m v_B^2 - \frac{1}{2} m v_A^2$$

که در آن v سرعت عددی (قدر مطلق سرعت) ذره را نشان می‌دهد. پس کار انجام شده بین دو نقطه A و B از مسیر حرکت همواره برابر است با تغییرات کمیت $\frac{1}{2} m v^2$ از نقطه A تا نقطه B ، این کمیت را انرژی جنبشی ذره می‌نامند. در متون مکانیک کلاسیک آن را بیشتر با نماد T و در متون فیزیک و شیمی گرایش دارند که با نماد E_k (گاهی KE) نشان دهند. ما در این فصل نماد T را به کار خواهیم برد. بدیهی است که به‌طور کلی T تابعی است از $\dot{x}$ ، $\dot{y}$ ، $\dot{z}$ (و زمان) و یکی از توابع مهم است. عطف به تعریف تکانه، می‌توان نوشت:

$$T = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad (۸-۱)$$

انرژی پتانسیل

از آنچه تا به حال گفته شد درمی‌یابیم که در صورتی معادلات دیفرانسیل حرکت، در هر مورد به‌خصوصی به صراحت معلوم می‌شود که، نیرو یا نیروهای وارد به ذره یا به منظومه‌ای از ذرات، معلوم باشد. یک مورد مهم وقتی است که بتوان تابعی یافت مانند $V(x, y, z)$ ، فقط تابعی از مختصات و آن چنان‌که روابط زیر برقرار باشد:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V \quad (۹-۱)$$

یا

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}, \quad F_z = -\frac{\partial V}{\partial z}$$

در این حالت گویند که نیرو از یک پتانسیل مشتق است.