الميكانيك التقليدي

الميكانيك التقليدي(الكلاسيكي) او ما يعرف بميكانيك نيوتن هو فرع العلم المبني على قوانين نيوتن بالحركة والنظرية الكهرومغناطيسية لماكسويل لتفسيرالظواهر المتعلقة بالحركة والطاقة استنادا للميكانيك التقليدي يمكن في نفس الوقت تحديد الموقع والزخم للجسم المتحرك، لكن وفقا لمبدأ هاينزبرك للادقة لا يمكن تحديدهما معا في نفس الوقت. افترض الميكانيك التقليدي انبعاث وامتصاص الطاقة يكون بشكل مستمر، لكن حسب التوزيع الطاقي لبلانك فأن انبعاث وامتصاص الطاقة لا يكون بشكل مستمروانما بشكل حزم طاقية محددة تعرف بالكمات. اما اهم الظواهر التي فشل الميكانيك التقليدي في اعطاء اجوبة مقنعة لها هي

1-أشعاع الجسم الاسود.

2-التأثير الكهروضوئي.

3- الاطياف الذرية والجزيئية

4- السعات الحرارية

1-أشعاع الجسم الاسود

في مطلع القرن العشرين نتيجة لظهور المصباح الكهربائي ظهرت حاجة لوضوع قانون يصف الطريقة التي بواسطتها يمكن أن نحصل على اكبر شدة ضوئية للمصباح مقابل اقل قدرة مستهلكة وفي البدء كانت المحاولات الأساسية لحل هذه المسألة مستندة على العلوم الاساسية التي كانت معروفة في ذلك الوقت وهي الميكانيك الكلاسيكي لنيوتن و الميكانيك الأحصائي والنظرية الكهرومغناطسية لماكسويل أضافة الى الثروديناميك وكانت بداية القوانين التجريبية هو قانون ستيفان بولتزمان الذي يربط بين درجة حرارة خويط المصباح مع شدة الطاقة الأشعاعية المنبعثة لوحدة المساحة وينص هذا القانون:

$$W = \sigma T^4 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (1-1)$$

حيث أن :

W تمثل كثافة الطاقة الأشعاعية لوحدة المساحة بوحدة $watt.m^{-2}$

T درجة الحرارة المطلقة بوحدة k

σ ثابت ستيفان بولتزمان وقيمته $56.7 * 10^{-9} watt.m^{-2}.k^{-4}$

س/أحسب كثافة الطاقة الأشعاعية المنبعثة من جسم درجة حرارته 100^0C حسب قانون ستيفان بولتزمان

من الواضح ان هذا القانون يصف الطاقة الأشعاعية المنبعثة بصورة عامة بغض النظر التوزيع الطيفي لها (تبرز اهمية هذا الجانب من معرفة أن الكثير من الأطوال الموجية تعطي تأثير حراري فقط ولا تعطي طاقة ضوئية) لذلك من المهم معرفة توزيع طاقة الطيف على الأطوال الموجية اوترددات للأشعاع المنبعث من الجسم الساخن وقد وجدت حقيقتين تجريبيتين يمكن وصفها بالمخطط الأتي

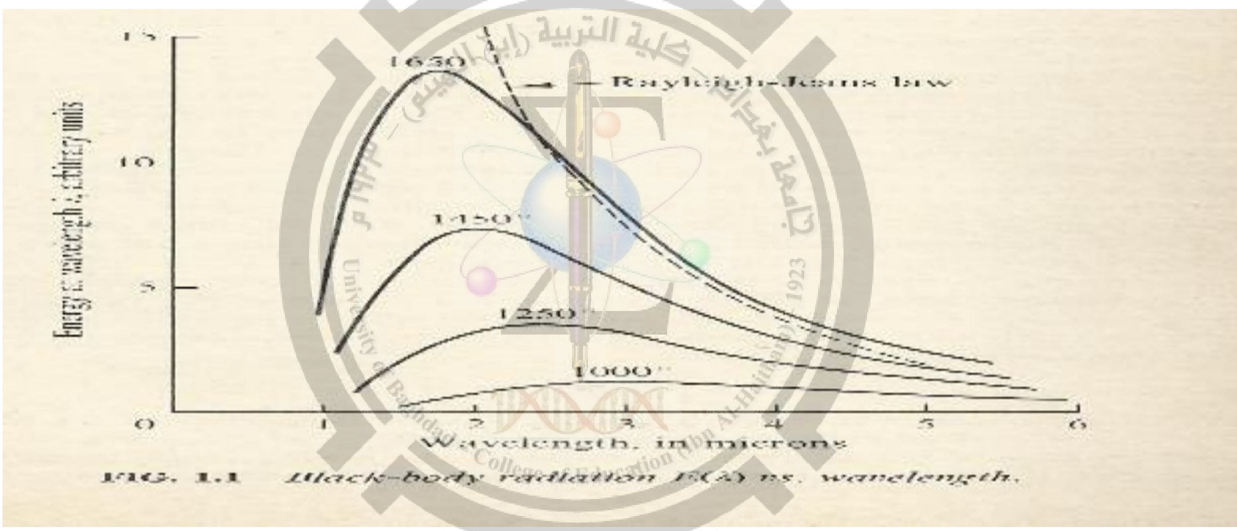


FIG. 1.1 Black-body radiation E(λ) vs. wavelength.

1- تصل كثافة الطاقة الاشعاعية الى نقطة نهاية عظمى عند طول موجي معين (λ_{max})

2- يزاح λ_{max} بأتجاه الطول الموجي الأقصر بزيادة درجة الحرارة

وعملياً فأن الشكل السابق يمكن ملاحظته بصورة واضحة عند تسخين قطعة من الحديد حيث يتحول لونها بعد فترة وجيزة الى اللون الاحمر ومن ثم تتحول الى اللون الابيض مع زيادة شدة الضوء المنبعث. كان Wien اول من حاول ان يضع قانون يتناول هذه الظاهرة ويسمى قانون Wien للازاحة

$$\lambda_{max} . T = constant = 2.898 * 10^{-3}\ m.k \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-1)$$

س) احسب درجة حرارة سطح الشمس أذا علمت أن λ_{max} لطيف الأشعاع الشمسي هو527 nm

بعدها قام رايلي و جينز بوضع معادلة تدمج قانوني ستيفان بولتزمان مع قانون وين للازاحة أستنادا على مبدأ التوزيع المتساوي للطاقة و الذي ينص

$$P(\lambda)\ d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}\ d\lambda \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3-1)$$

اذ $P(\lambda)$ هي كثافة الطاقة الاشعاعية عند الطول الموجي λ، k ثابت بولتزمان ($1.38 * 10^{-23} J.k^{-1}$)

أن قانون التوزيع الطيفي السابق ينطبق مع النتيجة العملية لأشعاع الجسم الأسود في الشكل السابق ضمن الأطوال الموجية الطويلة لاكنه لايفسر حقيقة وجود نقطة نهاية عظمى في الطيف كذلك فانه لا يتطابق اطلاقا في منطقة الاطوال الموجية القصيرة. في عام 1900 افترض بلانك أن الطاقة اللأشعاعية للجسم الأسود لاتبعث ولا تمتص بصورة مستمرة وأنما بحزم سماها كمات الطاقة وأن كل حزمة تكون ذات طاقة محددة تعطى بالعلاقة

$$E = h\nu \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4-1)$$

$$or\ E = h.C/\lambda \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (5-1)$$

حيث أنE طاقة الأشعاع, h ثابت بلانك ($6.63*10^{-34}$ J.sec)، C سرعة الضوء($3*10^{8}$m.sec^{-1})، ν تردد الاشعاع، λ الطول الموجي.

س/ أحسب طاقة الفوتون ذو الطول الموجي 320 nm

عند أشتقاق قانون توزيع الطاقة لكل نمط أهتزازي (حسب الثرموديناميك الأحصائي)حصل بلانك على العلاقة

$$P(\lambda)\ d\lambda = \frac{8\pi hC}{\lambda^5 \left[EXP\left(\frac{hC}{\lambda kT}\right) - 1\right]}\ d\lambda \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (6-1)$$

والذي يتطابق مع النتائج العملية لآشعاع الجسم الأسود وكلأتي :

1- في منطقة الأطوال الموجية القصيرة ذات التردد العالي والطاقة العالية يكون الحد $[EXP\left(\frac{hC}{\lambda kT}\right)-1]$ كبير جدا يقترب من الانهاية لذلك فأن $P(\lambda)$ تؤل الى الصفر بمعنى ان عدد الجسيمات يقترب من الصفر عند زيادة مستوى الطاقة.

2- في منطقة الاطوال الموجية الطويلة (الطاقة الواطئة) يكون $hC/\lambda kT <<< 1$ و بذلك يكون الحد

$$[EXP(hC/\lambda kT)-1] \approx \quad hC/\lambda kT \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (7-1)$$

$\lambda_{max}.T = \frac{hC}{5k} = 1.44 * 10^{-2}\ m.k \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$ (وعند التعويض في المعادلة (1-6) نحصل على $P(\lambda)\ d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}\ d\lambda$ وهي علاقة رايلي جينز المذكورة سابقاَ، كذلك يمكن الحصول على قانون ستيفان بولتزمان من قانون بلانك اعلاه وذلك من خلال اجراء التكامل على مدى كافة الاطوال الموجية $(from\ \lambda = 0\ to\ \lambda = \infty)$

$$W = \int_0^\infty \frac{8\pi hC}{\lambda^5[EXP\left(\frac{hC}{\lambda kT}\right)-1]}\ d\lambda \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (8-1)$$

حيث أن قيمة σ المحسوبة وفق هذه الطريقة تتوافق مع قيمة σ الذكورة في المعادلة التجريبية (1-1) ولغرض أشتقاق قانون وين للأزاحة من قانون بلانك وذلك بجعل $dP(\lambda)/d\lambda$ مساوية للصفر عند قيمة λ_{max} نحصل على

$$P(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hC}{\lambda^5[EXP\left(\frac{hC}{\lambda kT}\right)-1)]}d\lambda \qquad (9-1)$$

وهو تعزيز أضافي لفرضية بلانك.

أن الفرضية البالغة الأهمية والغير متوقعة حول مسألة تكميم الطاقة هي سبب القوة في فرضية بلانك والتي قادت فيما بعد الى أعادة صياغة الفيزياء كعلم اساسي.

س / قارن بين قانون رايلي- جينز $P(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}d\lambda$ و قانون بلانك $P(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hC}{\lambda^5[EXP\left(\frac{hC}{\lambda kT}\right)-1)]}d\lambda$ في تفسير التوزيع الطيفي لاشعاع الجسم الاسود

ج/

	قانون رايلي	قانون بلانك

منطقة الاطوال الموجية الطويلة $\lambda \to \infty$	$p(\lambda)$ قليلة . يتوافق مع التجربة	$p(\lambda)$ قليلة . يتوافق مع التجربة
منطقة الاطوال الموجية القصيرة $\lambda \to 0$	$p(\lambda)$ كبيرة جدا تؤول الى الانهاية. لا يتوافق مع التجربة	$p(\lambda)$ قليلة بسبب وجود الحد الاسي. يتوافق مع التجربة
λ_{max}	لا يتظمن نقطة نهاية عظمى. لا يتوافق مع التجربة	يتظمن وجود نقطة نهاية عظمى
قانون وين	لا يمكن ان نصل الى قانون وين من قانون رايلي	يمكن اشتقاق قانون وين من قانون بلانك
قانون ستيفان	$\int_0^\infty p(\lambda)d\lambda = \infty$ لا نحصل على نتيجة مقبولة عند حساب الشدة الاشعاعية الكلية	$\int_0^\infty p(\lambda)d\lambda = \sigma T^4 = W$ عند حساب الشدة الاشعاعية الكلية نحصل على قانون ستيفان

2-التأثير الكهروضوئي

رغم النجاحات التي تمخضت عن فرضية بلانك حول مفهوم تكميم الطاقة الا أنه لم تقبل هذه الفرضية من أغلب العلماء في ذلك الوقت ومن بينهم بلانك نفسه الى أن تفسير ظاهرة الأنبعاث الكهروضوئي بعد عدة سنوات من قبل اينشتاين بالأستناد الى الفريضة الأساسية لبلانك اعطى دعم اخر لتلك الفرضية .

تحصل ظاهرة التأثير الكهروضوئي نتيجة تشعيع سطح فلز معين بأشعاع ذو طول موجي مناسب ويمكن تلخيص النتائج التجريبية كالأتي :

1-لاتنبعث الألكترونات الضوئية مالم يتجاوز تردد الأشعاع الساقط حداً معين يسمى تردد العتبة وبغض النظر عن شدة الأشعاع الساقط.

2-الطاقة الحركية للألكترونات الضوئية تتناسب طردياَوبصورة خطية مع تردد الأشعاع الساقط ولاتتأثر بشدته.

3-يحصل أنبعاث كهروضوئي مباشر وحتى عن مستويات الشدة الواطئة للطاقة الضوئية اذا تجاوز تردد الضوء حد العتبة ,و يتناسب التيار الكهروضؤي طرديا مع شدة الاشعاع الساقط اذا تجاوز تردد العتبة.

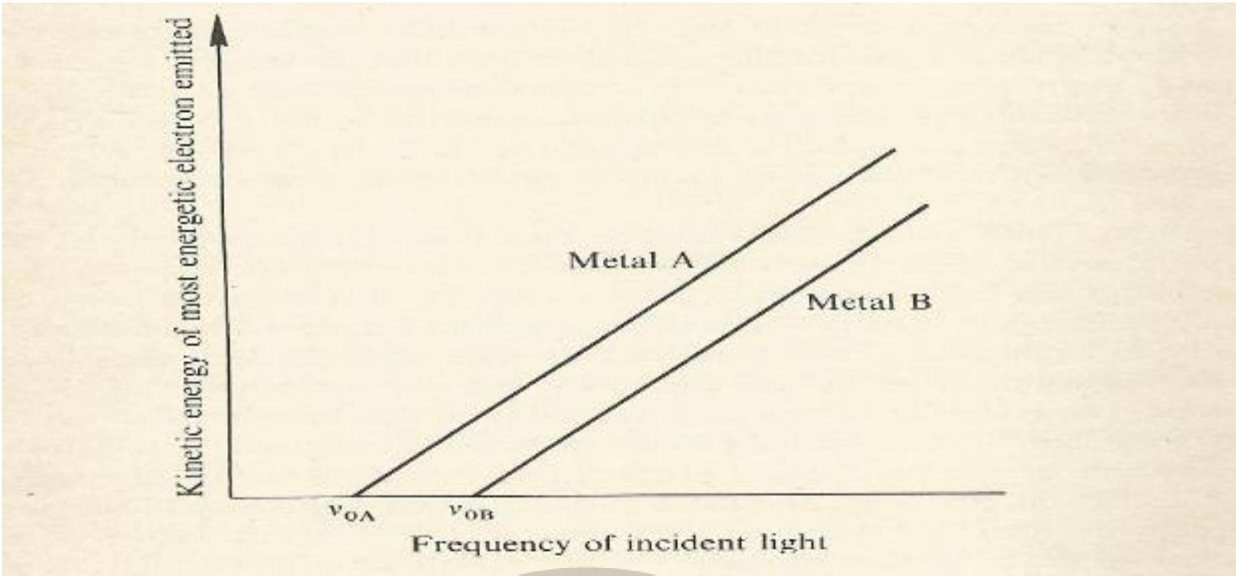


FIG. 1.2 *E_{max} for photoemitted electrons vs. frequency of incident light.*

تفسير انشتاين لهذه الملاحظات يعتمد على أفتراض أن هنالك تصادم يحصل بين الألكترونات داخل الفلز وبين ما يشبه الجسم في الأشعاع الساقط وقد أفترض انشتاين أن شبيه الجسيم هذا المتضمن في الأشعاع هو نفسه كم الطاقة الضوئية المفترض من قبل بلانك في تفسير ظاهرة اشعاع الجسم الأسود وهو مايعرف اليوم بالفوتون حيث تكون طاقة ذلك الفوتون $h\nu$ حسب نظرية بلانك وبفرض أنه يتطلب حد ادنى من الطاقة او الشغل الازم أنجازه لأخراج الفوتون من سطح المعدن ويسمى بدالة الشغل Φ وعليه فأن الطاقة الحركية للألكترون الضوئي المنبعثة تمثل الفرق بين طاقة الفوتون الساقط ودالة الشغل للفلز

$$KE = h\nu - \Phi \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (10-1)$$

س) تبلغ قيمة Φ لفلز للبلاتين J $8*10^{-10}$ هل يستطيع فوتون ذو طول موجي 200 nm ان يسبب تاثير كهروضوئي ؟ اذا كان كذلك احسب الطاقة الحركية للالكترون المنبعث؟

لقد توصل اينشتاين الى ان الضؤ يملك طبيعة ازدواجية حيث يتصرف كموجة كما كان معلوم سابقا وفي احيان اخرى يتصرف كجسيم وحيث ان الفوتون يتحرك بسعة الضؤ فان ذلك يعني ان كتلة سكونه تكون مساوية للصفر حسب مبادئ النسبية الخاصة و بالرجوع الى علاقة تكافؤ الطاقة و الكتلة

$$E = mC^2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. \quad (11-1)$$

و بمساواتها مع علاقة بلانك (1-5) نحصل على

$$mC^2 = hC/\lambda \rightarrow mC = h/\lambda \rightarrow p = h/\lambda \ldots\ldots\ldots\ldots..(12-1)$$

وحيث ان المقدار mC يمتلك وحدات الزخم p لذلك فان الفوتون يمتلك زخما وهذا صفة من صفات الجسيمات بالرغم من ان كتلة سكونه تكون صفر.

3- الاطياف الذرية و نموذج بور لذرة الهيدروجين

1-3: نظرية الكم والاطباف الذرية

Quantum theory and Atomic spectra

ان الاشعاع المنبعث من الذرات في حالة اثارتها يوفر معلومات قيمة حول طبيعة التركيب الالكتروني للذرات فقد دلت التجارب العملية على ان اطياف الامتصاص او الانبعاث للذرات لايكون مستمرا وانما تتألف من عود من الخطوط الطيفية ذات الترددات المحدودة. خلال السنوات (1910 – 1885) وجد كل من بالمر(Balmer) و ريدبرغ (Rhydberg) و رتز (Ritz) وغيرهم ان العلاقة التجريبية الاتية تفسر تماما الترددات الطيفية لذرة الهيدروجين :

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (13-1)$$

$\bar{\nu}$ العدد الموجي ويمثل مقلوب طول موجة الاشعاع،n، m تمثل بالكلمات الاتية

$$n = 1,2,3,\ldots\ldots \quad , m = 2,3,4,\ldots\ldots$$

R= ثابت ريدبرغ والذي له قيمة ($109677.6\ cm^{-1}$)

المعادلة (1 – 13) اعطت السلال خطوط طيفية مختلفة لطيف ذرة الهيدروجين سلاسل الخطوط هذه سميت بأسم مكتشفها وكلأتي:

سلسلة لايمان $Lyman\ series: \ n = 1, m = 2, 3, 4, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$

سلسلة بالمر $Bulmer\ series: \ n = 2, m = 3, 4, 5 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.$

سلسلة باشن $Paschen\ series: \ n = 3, m = 4, 5 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$

سلسلة براكيت $Brackett\ series:\ n = 4, m = 5,6$ ……………………………

سلسلة بفوند $Pfund\ series:\ n = 5, m = 6,7,8$ ………………………………

تحصل خطوط سلسلة لايمان في منطقة الفوق البنفسجية للطيف بينما سلسلة بالمر والسلاسل البقية تحدث عند المنطقة المرئية .

2-3 نموذج بور

في عام 1913 أستخدم نيلز بور (Niels Bohr) نظرية الكم لتفسير الخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين حيث أعتبر أن الضوء ينبعث من ذرة الهيدروجين فقط عندما يمتلك طاقة $(E = hv)$ وهذا مخالف للأفكار الكلاسيكية أن ذرة H تتهيج فقط حالات طاقة محددة واستند نموذجه على الفرضيات الأتية :

1- أن طاقة الذرة مكماة او محددة $E1Ei$…… أطلق بور عليها تسمية الحالات المستقرة (stationary states)وهي لاتشع أشعاعاً كهرومغناطسياً في هذه الحالات .

2- تبعث الذرة أشعاع عند أنتقالها من حالة مستقرة الى أخرى اوطأ اما عند الانتقال الى حالة طاقة مستقرة اعلى فأنه يحصل أمتصاص طاقة تردد الأشعاع المنبعث او الممتص يتطابق مع العلاقة المعطاة حسب نظرية الكم

$$\Delta E = E2 - E1 = hv \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (14-1)$$

ويربط المعادلتين (1-13)و(1-14) معطياًالعلاقة

$$\Delta E = RhC\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (15-1)$$

طاقات الحالات المستقرة لذرة الهيدروجين تعطى بالعلاقة

$$E = \frac{RhC}{n^2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (16-1)$$

3-تتحرك الألكترونات حول النواة بمدارات دائرية محددة وبزخم زاوي (angular momentum) (mvr) الألكترونات محددة بوحدات $h/2\pi$ أي أن

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (17-1)$$

m كتلة الالكترون ،v سرعته،r نصف قطر المدار وباعادة ترتيب المعادلة اعلاه

$$v^2 = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (18-1)$$

في المدار المستقر فأن القوة الطاردة المركزية مساوية لقوى كولمب للتجاذب بين النواة والألكترون $(\frac{e^2}{r^2})$ حيث أن (e) شحنة بروتون النواة وهي مساوية بالمقدار لشحنة الألكترون

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (19-1)$$

حسب المعادلة (1-18)و(1-19) فأن

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m e^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (20-1)$$

لذرة H فأن نصف قطر المدار الاول يكون عندما (n=1) او

$$r = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2} = a_0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. \quad (21-1)$$

(a_0) نصف قطر المدار الاول لذرة H حسب نظرية الكم و الطاقة الكلية للألكترون هي مجموع الطاقة الكامنة والطاقة الحركية

$$E = T + V = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{r} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (22-1)$$

وبأستخدام المعادلة (1-19) نحصل على

$$E = \frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{r} = \frac{-e^2}{2r} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (23-1)$$

وباستخدام المعادلة (1-20) بالتعويض عن r نحصل على معادلة مستويات الطاقة للحالات المستقرة لذرة الهيدروجين بدلالة أعداد الكم n

$$E_n = \frac{-2\pi^2 me^4}{n^2h^2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (24-1)$$

المعادلة الأخيرة تبين أن الطاقة مكممة وان n هو عدد الكم للألكترون

و يبين الشكل (1.2) مخطط مستويات الطاقة وطيف ذرة الهيدروجين

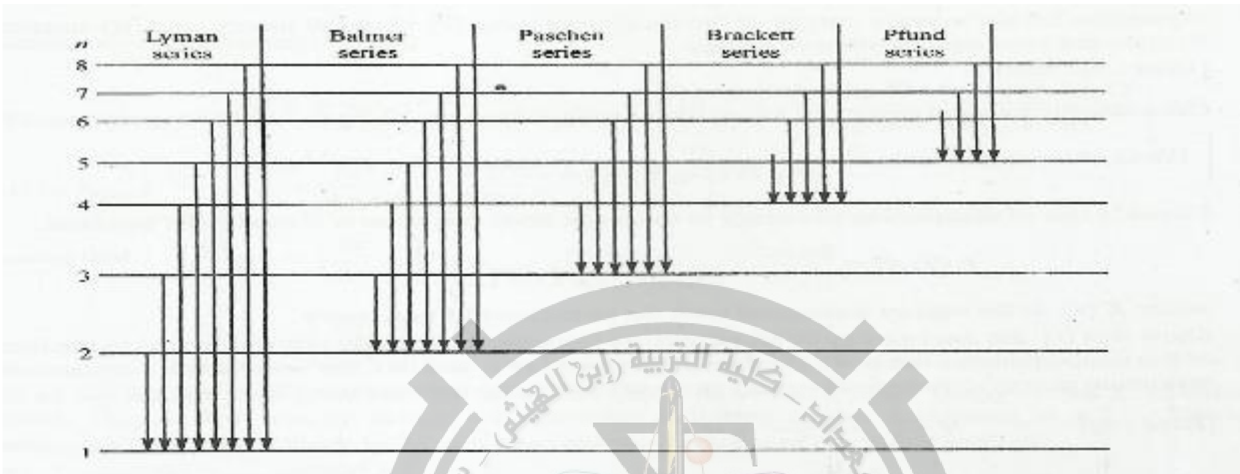


Figure 1.1 : Energy levels and spectrum of hydrogen atom

وطبقا لنظرية بور

$$E = RhC = \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \rightarrow R = \frac{2\pi^2 me^4}{Ch^3}$$

و بالتعويض عن قيم الثوابت في المعادلة اعلاه وجد ان قيمة $R = 109737\ cm^{-1}$ وهي مطابقة بدرجة كبيرة مع النتائج العملية وهذا يعتبر نجاح كبير لنظرية الكم.

لقد بذلت محاولات عديدة خلال السنوات (1913-1925)لتعديل نظرية بور فقد قام كل من ويلسون (Wilson) وسومر فيلد (Sommerfield) بصورة مستقلة بتطوير نظرية بور وذلك بأدخال فكرة المدارات الاهليليجية للالكترونات والتي نجحت بصورة جزئية بتفسير التركيب الدقيق للاطياف الذرية غير أن هذه المحاولات التي تعرف بنظرية الكم القديمة لم تنجح أطلاقاً في تفسير أطياف الذرات التي تحتوي أكثر من الكترون

4- موجات المادة

1-4 الطبيعة المزدوجة للجسيمات وفرضيات دي برولي

توصل الفيزيائي الفرنسي دي برولي (L.deBroglie)الى أكتشاف صلة تشابه بين قوانين البصريات التي تتحكم في أنتشار الضوء وقوانين ديناميكية الاجسام ،جعله يتساءل أن كان بالأمكان تعميم مبدأ الطبيعة المزدوجة للضوء والذي أكتشف من قبل أينشتاين ليشمل حركة جسيمات المادة وبذلك تمكن دي برولي عام (1924) من صياغة مبدئه المشهور الذي ينص على أن اي جسم يتحرك تصاحب حركته موجة ذات طول موجي يتناسب عكسياً مع زخم ذلك الجسيم حسب العلاقة

$$\lambda = \frac{h}{P} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (25-1)$$

يتضح من المعادلة اعلاه أن الالكترون كتلته تساوي $(9.1 * 10^{-31} Kg)$ الذي يتحرك بسرعة $(1 * 10^{6} m.sec^{-1})$ تصاحبه موجة ذات طول موجي

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{6.63 * 10^{-34} J.sec^{-1}}{9.1 * 10^{-31} Kg * 1 * 10^{6} m.sec^{-1}} = 7 * 10^{-10} m = 7A^{0}$$

اما بالنسبة الى للأجسام الكبيرة ،فلو أخذنا جسماً كتلته (1kg)يتحرك بسرعة $(1m.sec^{-1})$ فان قيمة λ تساوي $(6.63*10^{-34}m)$.أن القيمة الضئيلة جداً للطول الموجي في هذه الحالة تدل على ان الطبيعة الكمية لايمكن ملاحظتها بالنسبة لحركة الاجسام الكبيرة، لكن بالنسبة للالكترونات فأن λ لها مقارب للطول الموجي للاشعة السينية (X-ray) فلاغرابة أن نتوقع تشابهاً في أنماط الحيود للالكترونات والاشعة السينية ،اذ اثبت ذلك عملياً دافيدسون (Davidson) جرمر (Germer)عام (1927)وثومسون(Thomson) عام (1928) عندما قاموا بتجارب حول أنماط الحيود لبلورات فلزية بعد قذفها بوابل من الالكترونات.

2-4 قاعدة اللادقة لهايزنبرك

توصل العالم هايزنبرك (1927) الى مبدأ اللادقة لقياس الزخم و الموقع في أن واحد لنتصور أننا أجرينا تجربة لقياس زخم وموقع جسيم ما بصورة أنية ولنتصور أن هذا الجسيم هو الالكترون على سبيل المثال ، لكي تتمكن من قياس الموقع بدقة نحتاج الى مجهر ويتطلب ذلك تسليط ضوء او فوتونات التي تتشتت عند أصطدامها بالجسيم حيث ان مدى المسافة ΔX المتوقع ايجاد الالكترون فيها تتناسب مع الطول الموجي للفوتون المستخدم في تحديد موقع الالكترون، ولكن كلما استعملنا فوتون

ذو طول موجي اقصر لزيادة دقة القياس ازدادت طاقة الفوتون و بالتالي ازداد الزخم المنقول من هذا الفوتون الى الالكترون المراد تحديد موقعه ΔP وهذا يعني زيادة سرعة الالكترون لذا فأن زخم الجسم سيخضع الى شك (اللادقة) قدره $\Delta P = h/ \Delta X$ ان الصيغة العامة لعلاقات اللاتحديد مثال ذلك علاقة اللادقة بين الموقع والزخم الخطي

$$\Delta X . \Delta Px \geq \frac{h}{2\pi} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots.. (26-1)$$

أي لايمكن تحديد موقع جسيم وزخمه بدقة متناهية بصورة أنية ففي حالة تحديد أحدهما وليكن الزخم $\Delta P_x = 0$ فأن التغير بالموقع يساوي $\Delta X = \infty$ كذلك يمكن أيجاد اللادقة لقياس الطاقة والزمن بنفس الطريقة

$$\Delta E . \Delta t \geq \frac{h}{2\pi} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots. (27-1)$$

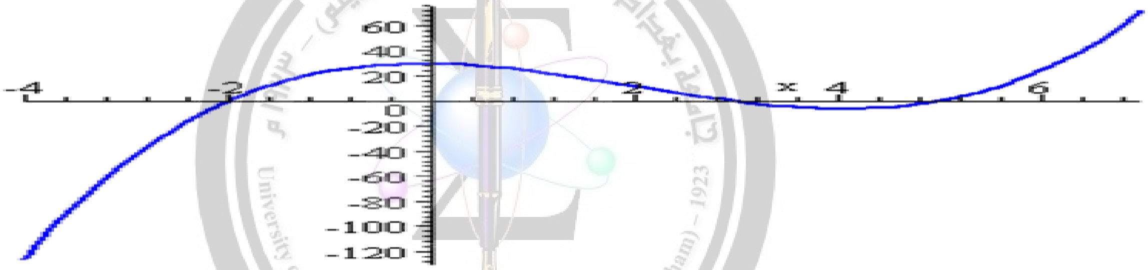
في حالة كون $\Delta t = \infty$ فان $\Delta E = 0$ أي أنه عند تهيج النواة في ما لانهاية من الزمن فأن الطاقة تملك أقل قيمة والتي تعرف بالحالة المستقرة stationary state

الصياغة العامة لنظرية الكم

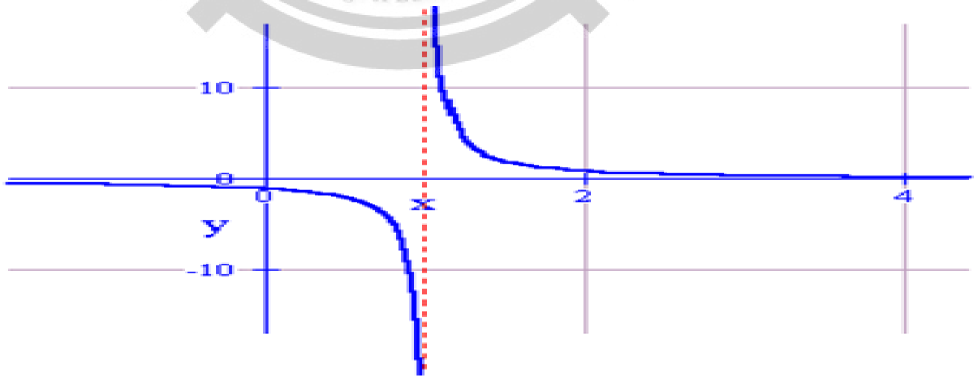
في العام 1925 وضع العالم هاينزبرك ميكانيك الكم بشكل مصفوفات اي فسر حركة الالكترونات و الذرات او الحركة المايكروسكوبية على شكل مصفوفات لذلك سمي ميكانيك المصفوفات. في العام 1926 استخدم الفيزيائي النمساوي شرودنكر الميكانيك الموجي لتفسير حركة الاجسام الصغيرة المايكروسكوبية. ان الافكار الاساسية لميكانيك الكم قد وضعت على شكل فرضيات اساسية postulates .

الفرضية الاولى: دالة الحالة الكمية للنظام

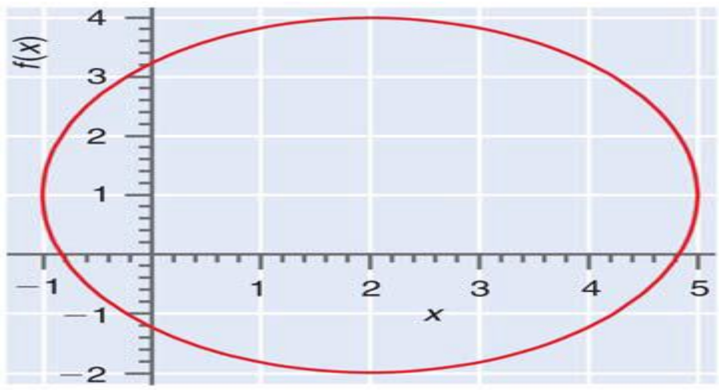
الفرضية الاولى: توصف حالة النظام بواسطة دالة للاحداثيات و الزمن تسمى هذه الدالة بدالة حالة النظام $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ و تحتوي هذه الدالة على كافة المعلومات التي يمكن تحصيلها من النظام ومن صفات هذه الدالة ان تكون مقبولة فيزيائيا والتي من شروطها ان تكون الدالة مستمرة وكذلك مشتقتها الاولى مستمرة ووحيدة القيمة كما ان مربعها قابل للتكامل و المقصود بكون ان مربع الدالة قابل للتكامل هو $\int |\Psi|^2 d\tau \neq \infty$ حيث ان $d\tau = dxdydz$ و يسمى بعنصر الحجم التفاضلي.



الدالة $f(x) = x^3 - 6x^2 - x + 30$ دالة مستمرة ومقبولة فيزيائيا

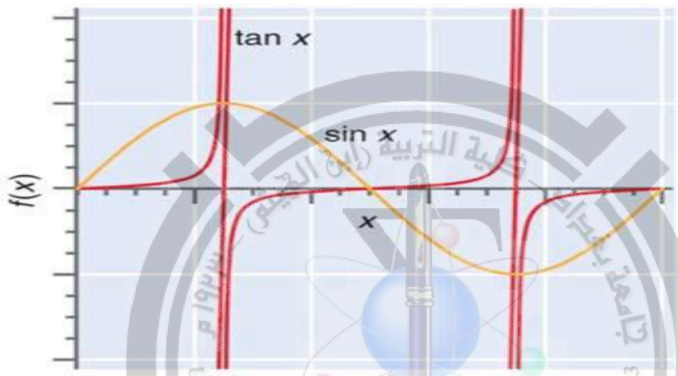


الدالة $f(x) = \frac{1}{1-x}$ غير مستمرة عند $x = 1$ وغير مقبولة فيزيائيا



(a)

الدالة $(f(x)-1)^2+(x-2)^2=9$ غير مقبولة فيزيائيا لانها غير احادية القيمة



الدالة $sin(x)$ دالة مقبولة لانها لا تؤول الى الانهاية بينما $tan(x)$ غير مقبولة لانها تؤول الى المالانهاية

ان الحالة القياسية للتكامل اعلاه هو عندما يكون

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1-2)$$

ويقال عندها ان الدالة سوية او معايرة normalized اما عندما تكون قيمة التكامل

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-2)$$

فيقال ان الدالة متعامدة orthogonal و هذا يحصل بصورة عامة تكون دوال الموجة مختلفة و من الواضح ان الحالة القياسية للدالة المقبولة فيزيائيا هي تلك التي تحقق الشرط

$$\int |\Psi_n \Psi_m| d\tau = \delta_{nm} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3-2)$$

ان الرمز δ_{nm} يلفظ دلتا كرونيكر و ياخذ قيمة 0 عندما $n \neq m$ وتكون قيمته 1 عندما $n =$ m اما عندما يكون

$$\int |\Psi|^2 d\tau = k \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(4-2)$$

حيث ان k عدد حقيقي فتكون Ψ عندها مقبولة فيزيائيا و لكن غير معايرة، و لغرض معايرة الدالة الموجية الغير معايرة نقسم المعادلة على k فينتج

$$\frac{\int |\Psi|^2 d\tau}{k} = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(5-2)$$

و بذلك حصلنا على دالة جديدة هي $\overline{\Psi} = \frac{\Psi}{\sqrt{k}}$ ومن الواضح من هذه المعادلة انه يمكن حساب ثابت المعايرة N من خلال العلاقة

$$N = \frac{1}{\sqrt{k}} = \frac{1}{\sqrt{\int |\Psi|^2 d\tau}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(6-2)$$

ومن ثم بضرب Ψ مع N نحصل على دالة موجية معايرة

مثال: هل ان الدالة e^{3x} دالة مقبولة فيزيائيا واذا كانت كذلك هل هي دالة معايرة او متعامدة ام غير معايرة ثم اوجد ثابت المعايرة اذا لم تكن معايرة

ج/

اخذت حدود التكامل هذه لعدم تحديد حدود في السؤال $\int |\Psi|^2 d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} (e^{3x})^2 dx$

$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{6x} dx = \frac{1}{6}\int_{-\infty}^{\infty} e^{6x} * 6dx = \frac{1}{6}[e^{6x}]_{-\infty}^{\infty} = \frac{1}{6}(e^{\infty} - e^{-\infty})$

$\frac{1}{6}(\infty - 0) = \infty$

اذا تكون هذه الدالة غير مقبولة فيزيائيا

و الان اذا غيرنا حدود التكامل (منطقة تواجد الدالة) و فرضنا ان التكامل يقع في المنطقة $0 \le x \le 1$ يكون الحل

$$\frac{1}{6}\int_0^1 e^{6x} * 6dx = \frac{1}{6}\ [e^{6x}]_0^1 = \frac{1}{6}(e^6 - e^0) = \frac{1}{6}(e^6 - 1) = 67.1$$

في هذه الحالة تكون هذه الدالة مقبولة فيزيائيا و لكن غير معايرة و لغرض ايجاد ثابت المعايرة نطبق القانون

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_0^1 |\Psi|^2\, dx}} = \frac{1}{\sqrt{67.1}} = 0.122$$

و بذلك تكون الدالة الجديدة $\bar{\Psi} = 0.122 * e^{3x}$ دالة معايرة قيمة المربع المطلق لتكاملها ضمن الفترة $0 \le x \le 1$ مساوي للواحد.

من المعروف ان الدوال التي تتراوح قيمتها بين الصفر و الواحد الصحيح هي دوال تحمل معنى احتمالي لذلك فان التكامل $\int |\Psi|^2 d\tau$ يحمل معنى احتمالية تواجد النظام ضمن حالة معينة مثل احتماية وجود الالكترون في منطقة معينة و التكامل $\int \Psi_n \Psi_m d\tau$ له معنى احتمالية انتقال النظام ضمن الحالتين n و m مثل احتمالية الانتقال الطيفي من الحالة الارضية الى الحالة المثارة و بما ان قيمة التكامل ككل تعطي معنى احتمالي وان $d\tau$ تمثل عنصر الحجم التفاضلي لذلك فان مربع دالة الموجة اي ($|\Psi|^2$ او $\Psi_n \Psi_m$) تعطي معنى كثافة الاحتمالية وان حاصل ضرب كثافة الاحتمالية في عنصر الحجم يعطي دالة الاحتمالية مثلما ان ضرب الكثافة الكتلية في الحجم يعطي الكتلة وضرب الكثافة الوزنية في الحجم يعطي الوزن فان ضرب كثافة الاحتمالية في عنصر الحجم تعطي الاحتمالية وان اجراء عملية التكامل بعدها يعمل على جمع الاحتماليات على طول مدى التكامل.

في حالات معينة تحتوي دالة الموجة على مقدار مركب (جزء تخيلي يتضمن العدد $i = \sqrt{-1}$ في هذه الحالة يكون التربيع المباشر لدالة الموجة لغرض الحصول على الاحتمالية و كثافتها سوف يعطي مقدار معقد لا يحمل اي معنى فيزيائي لذا فللحصول على المربع المطلق لدالة الموجة المعقدة يتم من خلال ضربها في مرافقها و الذي نحصل عليه من قلب اشارة كل حد يتضمن i اذ ان اي عدد مركب ذو الصيغة العامة $Z = a + ib$ عندما يضرب في مرافقه و الذي تكون صيغته $Z^* = a - ib$ تحصل عملية الضرب كالاتي

$$|ZZ^*| = (a + ib) * (a - ib) = a^2 + iab - iab - i^2 b^2$$

$$|ZZ^*| = a^2 + b^2$$

و بالتالي تتبقى الكميات الحقيقية و التي تعطي معنى فيزيائي.

مثال: هل ان الدالة e^{ix} مقبولة فيزيائيا ضمن المدى $0 \le x \le 1$ و اذا كانت كذلك هل هي معايرة ام متعامدة واذا لم تكن معايرة اوجد ثابت المعايرة و الدالة المعايرة

ج/

$$\int_0^1 \Psi^* \Psi dx = \int_0^1 e^{-ix} e^{ix} dx = \int_0^1 e^0 dx = \int_0^1 dx = [x]_0^1 = (1 - 0) = 1$$

تكون الدالة e^{ix} مقبولة فيزيائيا ومعايرة ضمن حدود التكامل.

الفرضية الثانية : المؤثرات

الفرضية الثانية :لكل متغير ديناميكي (ملحوظ فيزيائي كلاسيكي)يوجد مؤثر مناظر له في الميكانيك الكمي
فمثلا يتم الحصول على مؤثر الزخم للنظام بمقارنة التعبير الكلاسيكي للطاقة الحركية المتضمن حد الزخم بالمؤثر الكمي لها فنحصل على

$$\frac{1}{2m}\left[P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right] = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]$$

$$\therefore \hat{T} = \frac{-h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 \rightarrow \hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$\therefore P_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \widehat{P_x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

ومثلها مركبات الزخم الخطي $(\widehat{P_y}, \widehat{P_z})$

وكلمة مؤثر من الناحية الرياضية تماثل فعل الامر من ناحية اللغة اذا رمزنا الى مؤثر اشتقاق الدالة $f(x) = 2x^2 - 3x$ بالنسبة الى x بالرمز $\widehat{D_x}$ فيكون

$$\widehat{D_x} f(x) = \widehat{D_x}(2x^2 - 3x) = 4x - 3$$

كذلك اذا رمزنا الى مؤثر الجذر التربيعي بالرمز $(\hat{S})$ فأن تأثيره على العدد 64 مثلا يكون

$$\hat{S}64 = 8$$

وبصورة عامة كل العمليات الرياضية مثل حاصل الضرب والقسمة والجمع والطرح والتفاضل والتكامل يمكن تحويلها الى الصيغة المؤثرات ولأن المؤثرات ليست كميات جبرية اعتيادية لذلك فأن تغيير ترتيب المؤثرات قد يؤدي الى عدم حصولنا على نفس الناتج في الحالة الاولى وتسمى هذه الصيغة التبادلية وتمثل رياضياَ كالأتي: اذا كان لدينا مؤثرين $(\hat{A}, \hat{B})$ فأن تبادليتهما تحسب من العلاقة

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

فاذا كان الناتج 0 فالمؤثران $(\hat{A}, \hat{B})$ متبادلان

مثال/ احسب تبادلية المؤثرين $\left[\hat{x}, \frac{d}{dx}\right]$

ج/ $\hat{x}$ مؤثر بمعنى اضرب في x

$\frac{d}{dx}$ مؤثر بمعنى اشتق بالنسبة الى x

$$\left[\hat{x},\frac{d}{dx}\right]f = x.\frac{d}{dx}(f) - \frac{d}{dx}(x.f) = x.\frac{df}{dx} - x.\frac{df}{dx} - f = -f$$

$$\therefore \left[\hat{x},\frac{d}{dx}\right]f = -f \rightarrow \left[\hat{x},\frac{d}{dx}\right] = -1$$

يكون المؤثران $\left[\hat{x},\frac{d}{dx}\right]$ غير متبادلان و قيمة قوس التبادلية =1-

القوانين العامة لتبادلية المؤثرات

1- $[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$
2- $[\hat{A},\hat{A}] = -[\hat{A},\hat{A}] = 0$
3- $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$
4- $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}]$
5- $\left[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]\right] + \left[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]\right] + \left[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]\right] = 0$
6- $[\hat{A},\hat{B}]^{\dagger} = [\hat{A}^{\dagger},\hat{B}^{\dagger}]$

بالنسبة لمؤثرات الزخم و الموقع

1- $[\hat{q_i},\hat{q_j}] = 0$
2- $[\hat{p_j},\hat{p_k}] = 0$
3- $[\hat{q_j},\hat{p_k}] = i\hbar\delta_{jk}$

بواسطة مؤثرات الموقع $(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$ و مؤثرات الزخم الخطي يمكن اشتقاق المؤثرات الكمية من خلال كتابة التعبير الكلاسيكي للملحوظ الفيزيائي بتعابير (الزخم و الموقع) ومن ثم استبدالها بمؤثرات الميكانيك الكمي

مثال/ اكتب التعبير الكمي للزخم الزاوي على المحور z علما ان تعبيره الكلاسيكي يعطى بالمعادلة

$$L_z = xP_y - yP_x$$

ج/

$$\widehat{L_z} = \hat{x}\widehat{P_y} - \hat{y}\widehat{P_x}$$

$$\widehat{L_z} = \hat{x} * -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} - \hat{y} * -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

س/

$$L_x = yP_z - zP_y$$

$L_y = xP_z - zP_x$

هنالك صفتان للمؤثرات الكمية هي الخطية و الهرمينية

1- الخطية يقال عن مؤثر انه خطي اذاحقق شرطان الاول يكتب

$$\hat{A}(f_1 + f_2) = \hat{A}f_1 + \hat{A}f_2$$

بمعنى ان تاثير المؤثر على دالة حاصل جمع دالتين يساوي مجموع التاثير على كل دالة منهما فمثلا المؤثر التفاضلي هو مؤثر خطي لانه يتوزع على دالة مجموع دالتين

$$\frac{d}{dx}(f_1 + f_2) = \frac{d}{dx}f_1 + \frac{d}{dx}f_2$$

و مثله مؤثرات التكامل و حاصل الضرب.....

بينما مؤثر الجذر التربيعي $\hat{S}$ لا يحقق هذا الشرط

$$\hat{S}(9 + 16) \neq \hat{S}9 + \hat{S}16$$

$$\hat{S}25 \neq \hat{S}9 + \hat{S}16$$

$$5 \neq 3 + 4 \rightarrow 5 \neq 7$$

اما الشرط الثاني لكي يكون المؤثر خطي فهو

$$\hat{A}(kf) = k\hat{A}f$$

حيث ان k هو عدد ثابت

مثال/ 1)

$$\frac{d^2}{dx^2}(5f) = 5\frac{d^2 f}{dx^2}$$

المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ يحقق الشرط الثاني

2) المؤثر $(5+)$ (اجمع مع 5) ،الثابت=2 ،الدالة =6

$$5 + (2 * f) \neq 2 * (5 + f)$$

$$5 + (2 * 6) \neq 2 * (5 + 6)$$

2- الهرمينية وشرطها هو

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 \, d\tau = \int (\hat{A}\Psi_1)^* \Psi_2 \, d\tau$$

رمز المؤثر	المؤثر	الملحوظ الفيزيائي
$\widehat{p_{q_i}}$	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$	الزخم
$\hat{T}$	$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2$	الطاقة الحركية
$\hat{q_i}$	q_i	الموقع

الطاقة الكامنة	V	$\hat{V}$
الطاقة الكلية	$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$	$\hat{H}$
الزخم الزاوي (x)	$-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$	$\widehat{L_x}$
الزخم الزاوي (y)	$-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)$	$\widehat{L_y}$
الزخم الزاوي (z)	$-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$	$\widehat{L_z}$

س/ اثبت ان

$$[\widehat{L_x}, \widehat{L_y}] = -i\hbar\widehat{L_z}$$

$$[\widehat{L_x}, \widehat{L_y}] = \widehat{L_x}\widehat{L_y} - \widehat{L_y}\widehat{L_x} \ldots\ldots\ldots\ldots (1-3)$$

و قد تعلمنا سابقا ان

$$\widehat{L_x} = \hat{y}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_y} \;\&\; \widehat{L_y} = \hat{x}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_x} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-3)$$

نعوض $(2-3)$ في $(1-3)$

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} - \widehat{L_y}\widehat{L_x} = (\hat{y}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_y})(\hat{x}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_x}) - (\hat{x}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_x})(\hat{y}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_y}) \ldots\ldots (3-3)$$

عند فتح الاقواس في المعادلة يجب مراعاة الترتيب لاننا هنا نتعامل مع مؤثرات وليست حدود جبرية اعتيادية لذلك يكون الحد الاول من المعادلة

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} = \hat{y}\widehat{P_z}(\hat{x}\widehat{P_z}) - \hat{y}\widehat{P_z}(\hat{z}\widehat{P_x}) - \hat{z}\widehat{P_y}(\hat{x}\widehat{P_z}) + \hat{z}\widehat{P_y}(\hat{z}\widehat{P_x}) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4-3)$$

و الحد الثاني

$$\widehat{L_y}\widehat{L_x} = \hat{x}\widehat{P_z}(\hat{y}\widehat{P_z}) - \hat{x}\widehat{P_z}(\hat{z}\widehat{P_y}) - \hat{z}\widehat{P_x}(\hat{y}\widehat{P_z}) + \hat{z}\widehat{P_x}(\hat{z}\widehat{P_y}) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (5-3)$$

وضعت اقواس هنا بعد مؤثرات الزخم لان مؤثرات الزخم هي تفاضلية بالاساس لذلك فان المقادير الموجودة بين الاقواس تفتح على اساس الاول في مشتقة الثاني زائدا الثاني في مشتقة الاول

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} = \hat{y}\hat{x}\widehat{P_z}\widehat{P_z} + \hat{y}\widehat{P_z}\widehat{P_z}\hat{x} - \hat{y}\hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_x} - \hat{y}\widehat{P_x}\widehat{P_z}\hat{z} - \hat{z}\hat{x}\widehat{P_y}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_y}\hat{x} + \hat{z}\hat{z}\widehat{P_y}\widehat{P_x} + \hat{z}\widehat{P_x}\widehat{P_y}\hat{z}. (6-3)$$

$$\widehat{L_y}\widehat{L_x} = \hat{x}\hat{y}\widehat{P_z}\widehat{P_z} + \hat{x}\widehat{P_z}\widehat{P_z}\hat{y} - \hat{x}\hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_y} - \hat{x}\widehat{P_y}\widehat{P_z}\hat{z} - \hat{z}\hat{y}\widehat{P_x}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_x}\hat{y} + \hat{z}\hat{z}\widehat{P_x}\widehat{P_y} + \hat{z}\widehat{P_y}\widehat{P_x}\hat{z}. (7-3)$$

حسب العلاقة

$$\widehat{P_{q_i}}\widehat{q_j} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}(q_j) = -i\hbar\delta_{ij} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(8-3)$$

حيث ان δ_{ij} تكون صفر عندما $(i \neq j)$ وتكون واحد عندما $(i = j)$ اي ان نتيجة تاثير مؤثر الزخم على الموقع هي صفر اذا كانت الاحداثيات مختلفة وتكون $-i\hbar$ اذا كانت الاحداثيات متشابهة فنحصل على

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} = \hat{y}\hat{x}\widehat{P_z}\widehat{P_z} + \hat{y}\widehat{P_z} * (0) - \hat{y}\hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_x} - \hat{y}\widehat{P_x} * (-i\hbar) - \hat{z}\hat{x}\widehat{P_y}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_z} * (0) + \hat{z}\hat{z}\widehat{P_y}\widehat{P_x} + \hat{z}\widehat{P_x} * (0) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(9-3)$$

$$\widehat{L_y}\widehat{L_x} = \hat{x}\hat{y}\widehat{P_z}\widehat{P_z} + \hat{x}\widehat{P_z} * (0) - \hat{x}\hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_y} - \hat{x}\widehat{P_y} * (-i\hbar) - \hat{z}\hat{y}\widehat{P_x}\widehat{P_z} - \hat{z}\widehat{P_z} * (0) + \hat{z}\hat{z}\widehat{P_x}\widehat{P_y} + \hat{z}\widehat{P_y} * (0) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (10-3)$$

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} = \hat{y}\hat{x}\widehat{P_z}\widehat{P_z} - \hat{y}\hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_x} - (-i\hbar) * \hat{y}\widehat{P_x} - \hat{z}\hat{x}\widehat{P_y}\widehat{P_z} + \hat{z}\hat{z}\widehat{P_y}\widehat{P_x} \ldots\ldots\ldots.(11-3)$$

$$\widehat{L_y}\widehat{L_x} = \hat{x}\hat{y}\widehat{P_z}\widehat{P_z} - \hat{x}\hat{z}\widehat{P_z}\widehat{P_y} - (-i\hbar) * \hat{x}\widehat{P_y} - \hat{z}\hat{y}\widehat{P_x}\widehat{P_z} + \hat{z}\hat{z}\widehat{P_x}\widehat{P_y} \ldots\ldots\ldots.(12-3)$$

وحيث ان مؤثرات الموقع هي مؤثرات ضرب لذلك فهي مؤثرات ابدالية اي$0 = [\widehat{q_i}, \widehat{q_j}]$ $\widehat{q_i}\widehat{q_j} = \widehat{q_j}\widehat{q_i}$ or لذلك يمكن تبديل مواقع مؤثرات الموقع دون تاثير و بحذف رمز المؤثر عن مؤثرات الموقع نحصل على

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} = xy\widehat{P_z}\widehat{P_z} - yz\widehat{P_z}\widehat{P_x} - (-i\hbar) * y\widehat{P_x} - xz\widehat{P_y}\widehat{P_z} + z^2\widehat{P_y}\widehat{P_x} \ldots\ldots\ldots.(13-3)$$

$$\widehat{L_y}\widehat{L_x} = xy\widehat{P_z}\widehat{P_z} - xz\widehat{P_z}\widehat{P_y} - (-i\hbar) * x\widehat{P_y} - yz\widehat{P_x}\widehat{P_z} + z^2\widehat{P_x}\widehat{P_y} \ldots\ldots\ldots.(14-3)$$

بطرح معادلة $(14-3)$ من $(13-3)$ نحصل على

$$\widehat{L_x}\widehat{L_y} - \widehat{L_y}\widehat{L_x} = [\widehat{L_x}, \widehat{L_y}]$$

$$= xy[\widehat{P_z}, \widehat{P_z}] - yz[\widehat{P_z}, \widehat{P_x}] - (-i\hbar)(y\widehat{P_x} - x\widehat{P_x}) - xz[\widehat{P_y}, \widehat{P_z}] + z^2[\widehat{P_y}, \widehat{P_x}].(15-3)$$

وحيث ان كافة اقواس التبادلية لمؤثرات الزخم تكون صفر حسب ما ذكر اعلاه يكون

$$[\widehat{L_x}, \widehat{L_y}] = (-i\hbar)(y\widehat{P_x} - x\widehat{P_z}) = (-i\hbar)\left(y * -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - x * -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)..(16-3)$$

$$[\widehat{L_x}, \widehat{L_y}] = (-i\hbar)(-i\hbar)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = (-i\hbar)\widehat{L_z} \ldots\ldots(17-3)$$

الفرضية الثالثة: القيمة الذاتية والدالة الذاتية

تناولنا في المحاضرتين السابقتين الفرضيتين الاولى والثانية في الميكانيك الكمي حيث اختصت الفرضية الاولى بدالة الحالة الكمية للنظام وحالاتها وضروفها اما الفرضية الثانية فتناولت المؤثرات وصفاتها وكونها تعبر عن الملحوظات الفيزيائية الاعتيادية بتعبير الميكانيك الكمي ولكن كيفية عمل تلك المؤثرات على دوال الحالة الكمية وكيفية استخراج المعلومات الفيزيائية للنظام من خلال المؤثرات والدوال هو موضوع هذه الفرضية والتي تنص:

تستخلص القيمة العددية (القيمة الذاتية) لاي ملحوظ فيزيائي من خلال التأثير بواسطة المؤثر الكمي للمتغير الديناميكي على دالة الحالة الكمية وان ناتج العملية ككل يكون عدد ثابت يسمى القيمة الذاتية لذلك المؤثر مضروب في نفس الدالة والتي سيصبح اسمها الدالة الذاتية لذلك المؤثر ويمثل هذا الشرط بالعلاقة

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. (1-4)$$

مثال: هل ان الدالة e^{3-2x}() دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d}{dx}$

الجواب/

$$\frac{d}{dx}(e^{3-2x}) = -2 * e^{3-2x}$$

∴ الدالة (e^{3-2x}) دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d}{dx}$ وقيمتها الذاتية=2-

مثال: هل ان الدالة $\sin(2\pi\nu t)$ دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d}{dt}$

$$\frac{d}{dt}(\sin(2\pi\nu t)) = 2\pi\nu * \cos(2\pi\nu t)$$

∴ الدالة $\sin(2\pi\nu t$) غير ذاتية للمؤثر $\frac{d}{dx}$ لان نتيجة التأثير غيرت شكل الدالة الاصلي وحولته من $sin(2\pi\nu t)$ الى $cos(2\pi\nu t)$

مثال: هل ان الدالة في المثال السابق دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d^2}{dt^2}$

$$\frac{d}{dt}(\sin(2\pi\nu t)) = 2\pi\nu * \cos(2\pi\nu t)$$

$$\frac{d^2}{dt^2}(\sin(2\pi\nu t)) = -4\pi^2\nu^2\sin(2\pi\nu t)$$

∴ الدالة $\sin(2\pi\nu t)$ دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d^2}{dt^2}$ وقيمتها الذاتية $-4\pi^2\nu^2$

مثال/ جد القيمة الذاتية لمؤثر الطاقة الحركية للألكترون في بعدين الذي دالة موجته $\Phi = Ae^{2x+3y}$

$$\hat{T}\Phi = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)Ae^{2x+3y}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(Ae^{2x+3y}) = 2 * Ae^{2x+3y} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}(Ae^{2x+3y}) = 4 * Ae^{2x+3y}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}(Ae^{2x+3y}) = 3 * Ae^{2x+3y} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2}(Ae^{2x+3y}) = 9 * Ae^{2x+3y}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)Ae^{2x+3y} = \frac{-\hbar^2}{2m}(4+9)Ae^{2x+3y} = \frac{-13\hbar^2}{2m} * Ae^{2x+3y}$$

اذا القيمة الذاتية $\frac{-13\hbar^2}{2m}$

س/ ما القيمة الذاتية لمؤثر الزخم الخطي في بعد واحد اذا كانت الدالة الذاتية للنظام $\Phi = Ae^{-ikx}$ حيث ان k عدد ثابت

$$\widehat{P_x}\Phi = -i\hbar\frac{d}{dx}\left(Ae^{-ikx}\right)$$

$$= -i\hbar * -iK * Ae^{-ikx} = -k\hbar Ae^{-ikx}$$

اذا القيمة الذاتية $-k\hbar$

مثال:جد القيمة الذاتية للطاقة الحركية لألكترون دالة الموجة $\emptyset = 5\,sin(\frac{2\pi x}{L})$ في بعد واحد

الجواب /مؤثر الطاقة الحركية في بعد واحد هو $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

$$\hat{T}_x\emptyset = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(5\,sin(\frac{2\pi x}{L}))$$

$$\frac{d}{dx}(5\,sin(\frac{2\pi x}{L})) = \frac{2\pi}{L} * 5\,cos(\frac{2\pi x}{L})$$

$$\frac{d^2}{dx^2}(5\,sin(\frac{2\pi x}{L})) = \frac{-4\pi^2}{L^2} * 5\,sin(\frac{2\pi x}{L})$$

$$\therefore \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(5\,sin(\frac{2\pi x}{L})) = \frac{-\hbar^2}{2m} * \frac{-4\pi^2}{L^2} * (5\,sin(\frac{2\pi x}{L}))$$

$$= \frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2} = \frac{h^2}{2mL^2}$$

س/ ما القيمة الذاتية لمؤثر الزخم الخطي اذا كانت الدالة الذاتية للنظام Ae^{2x}

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}(Ae^{2x}) = -i\,\hbar * 2 * Ae^{2x}$$

القيمة الذاتية $-2i\hbar$

الاتحاد الخطي: هنالك نوعان من الدوال موجودة في الميكانيك الكمي الاول هو دوال بسيطة مثل التي تم التطرق اليها سابقا ، اما الاخر فهي دوال مركبة من عملية اتحاد خطي لمجموعة من الدوال البسيطة و تكون هذه المجموعة متناسقة مع نفسها ومتعامدة مع باقي الدوال البسيطة الاخرى اي تحقق الشرط

$$\int \phi_n \phi_m d\tau = \delta_{nm} \quad or \quad A^{\dagger}B = \delta_{nm}$$

حيث تسمى مجموعة الدوال التي تحقق الشرط مجموعة الدوال الاساس و يكتب الاتحاد الخطي على شكل

$$\Psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \cdots \ldots$$

حيث ان c_1, c_2 هي اعداد ثابتة اما ϕ_1, ϕ_2 فاما ان تكون دوال بسيطة (اسية ، مثلثية ، جبرية) و هي دوال لا تحقق شرطي التناسق و التعامد لذلك فهي في الاصل عبارة عن دوال مركبة من اتحاد خطي لمجموعة من الدوال الاساس.

نتيجة 1: القيمة الذاتية للمؤثر الهرميتي مقدار حقيقي للدالة المعايرة

س/ اثبت ان القيمة الذاتية للمؤثر الهرميتي مقدار حقيقي للدالة المعايرة

$$\hat{A}\Psi_1 = a_1\Psi_1$$

$$\int \Psi_1^* \hat{A}\Psi_1\, d\tau = \int (A\Psi_1)^* \Psi_1\, d\tau$$

$$\int \Psi_1^*\, a_1\, \Psi_1 d\tau = \int (a_1\Psi_1)^* \Psi_1 d\tau$$

$$a_1 \int \Psi_1^* \Psi_1\, d\tau = a_1^* \int \Psi_1^* \Psi_1\, d\tau$$

$$a_1 \int \Psi_1^* \Psi_1\, d\tau - a_1^* \int \Psi_1^* \Psi_1\, d\tau = 0$$

$$(a_1^* - a_1) \int \Psi_1^* \Psi_1\, d\tau = 0$$

ولأن التكامل $\int \Psi_1^* \Psi_1\, d\tau = 1$ حسب الفرض

$$\therefore\ (a_1^* - a_1) = 0 \implies a_1^* = a_1$$

نتيجة 2: الدوال الذاتية المختلفة للعامل الهرميتي نفسه تكون متعامدة

س/اثبت ان الدوال الذاتية المختلفة للعامل الهرميتي نفسه تكون متعامدة

$$\hat{A}\Psi_1 = a_1\Psi_1$$

$$\hat{A}\Psi_2 = a_2\Psi_2$$

$$\int \Psi_1^* \hat{A}\Psi_2 d\tau = \int (a_1\Psi_1) * \Psi_2 d\tau$$

$$a_2 \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau = a_1^* \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau$$

$$a_2 \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau = a_1 \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau$$

$$(a_2 - a_1) \int \Psi_1^* \Psi_1 d\tau = 0$$

ولأننا افترضنا الدوال الذاتية مختلفة لذلك تكون قيمتها الذاتية مختلفة

$$a_2 - a_1 \neq 0$$

$$\therefore \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau = 0$$

نتيجة 3: لكل مؤثرين متبادلين يتشاركان تلقائيا مجموعة الدوال الذاتية نفسها.

مثال : اثبت انه لكل مؤثرين متبادلين يتشاركان تلقائيا مجموعة الدوال الذاتية نفسها

الجواب/ ليكن $\hat{A}$ مؤثر خطي على الدالة Ψ قيمته الذاتية a وهو يتبادل مع المؤثر الخطي $\hat{B}$ لذا يكون

$$\hat{A}\Psi = a * \Psi$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

$$\therefore (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi = 0$$

$$\hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi = 0$$

$\hat{A}\hat{B}\Psi - a\hat{B}\Psi = 0$ $\qquad$ $\hat{B}$ مؤثر خطي

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi) = a(\hat{B}\Psi)$$

يمكن اعتبار ان $(\hat{B}\Psi)$ هو دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ ولها نفس القيمة الذاتية a وهذا ممكن فقط اذا كانت الدالة $\hat{B}\Psi$ متناسبة مع Ψ في عدد ثابت اي ان

$$\hat{B}\Psi = b\Psi$$

لذلك فأن Ψ هي دالة ذاتية أيضا للمؤثر $\hat{B}$ وقيمتها الذاتية b.

نتيجة 4: القيمة الذاتية للطاقة المنحلة لأتحاد خطي من الدوال الذاتية لمؤثر كمي متساوية.

س/اثبت ان القيمة الذاتية للطاقة المنحلة لأتحاد خطي من الدوال الذاتية لمؤثر كمي متساوية

ملاحظة: القيمة الذاتية المنحلة معناها ان القيمة الذاتية لحاصل تأثير مؤثر معين على دالة ذاتية تساوي قيمة ذاتية لدالة اخرى مؤثر عليها نفس المتغير

الحل / نفرض ان الأتحاد الخطي لدالتي الموجة $\emptyset_1$, $\emptyset_2$ هو Ψ

$$\Psi = c_1\emptyset_1 + c_2\ \emptyset_2$$

نفرض ان المؤثر $\hat{H}$ (المؤثر الهاملتوني)

$$\hat{H}\emptyset_1 = E\ \emptyset_1 \quad and \quad \hat{H}\emptyset_2 = E\ \emptyset_2 \ \Rightarrow\ \hat{H}\Psi = \hat{H}(c_1\emptyset_1 + c_2\ \emptyset_2)$$

$$\hat{H}\Psi = c_1\hat{H}\emptyset_1 + c_2\hat{H}\emptyset_2 \qquad (\text{مؤثر خطي})$$

$$\hat{H}\Psi = c_1E\emptyset_1 + c_2E\emptyset_2$$

$$\hat{H}\Psi = E * (c_1\emptyset_1 + c_2\ \emptyset_2)\ \Rightarrow\ \therefore \hat{H}\Psi = E\Psi$$

نتيجة 5: دالة الاتحاد الخطي لاتحقق معادلة القيمة الذاتية اذا كانت القيم الذاتية للدوال الاساس مختلفة

س/ اثبت ان دالة الاتحاد الخطي لاتحقق معادلة القيمة الذاتية اذا كانت القيم الذاتية للدوال الاساس مختلفة لنفس المؤثر / نفرض ان الأتحاد الخطي لدالتي الموجة $\emptyset_1$, $\emptyset_2$ هو Ψ

$$\Psi = c_1\emptyset_1 + c_2\ \emptyset_2$$

نفرض ان المؤثر $\hat{A}$

$$\hat{A}\emptyset_1 = a_1\ \emptyset_1 \quad and \quad \hat{A}\emptyset_2 = a_2\ \emptyset_2 \ \Rightarrow\ \hat{A}\Psi = \hat{A}(c_1\emptyset_1 + c_2\ \emptyset_2)$$

$$\hat{A}\Psi = c_1\hat{H}\emptyset_1 + c_2\hat{H}\emptyset_2 \qquad (\text{مؤثر خطي})$$

$$\hat{A}\Psi = c_1a_1\emptyset_1 + c_2a_1\emptyset_2 \ \Rightarrow\ \hat{A}\Psi = a_1c_1\emptyset_1 + a_2c_1\ \emptyset_2$$

الفرضية الرابعة (معدل القيمة او القيمة المتوقعة)

تعطى القيمة المتوقعة للمتغير الديناميكي $\hat{M}$ بواسطة العلاقة

$$<\hat{M}> = \frac{\int \Psi^* \hat{M} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1-5)$$

وتأخذ العلاقة الشكل

$$<\hat{M}> = \int \Psi^* \hat{M} \Psi d\tau \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-5)$$

اذا كانت الدالة Ψ معايرة , تساوى القيمة المتوقعة للمتغير الديناميكي مع قيمته الذاتية اذا كانت الدالة Ψ دالة ذاتية للمؤثر $\hat{M}$

$$<\hat{M}> = \frac{\int \Psi^* \hat{M} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

اي اذا كان $\hat{M}\Psi = m\Psi$

$$<\hat{M}> = \frac{m\int \Psi^* \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \Rightarrow <\hat{M}> = m \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3-5)$$

اذا يكون من الواضح انه حسب المعادلة (7-1) فأننا يمكننا الحصول على قيمة عددية للمؤثر $\hat{M}$ حتى لو كانت الدالة Ψ دالة غير ذاتية للمؤثر $<\hat{M}>$

مثال/ ما القيمة العددية لمؤثر الزخم الخطي على المحور x والتي يمكن الحصول عليها من الدالة الحالة $\Psi = 2\, sin(\frac{2\pi x}{L})$ في الفترة من $0 \le X \le L$

الجواب/ من الواضح ان الدالة Ψ دالة غير ذاتية للمؤثر $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ بسبب

$$\hat{P}_x \Psi = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(2 \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right) = -i\hbar 2\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) * \frac{2\pi}{L} = \frac{-2i\pi\hbar}{L}\; 2cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$$

أي أنه الدالة $2\sin(\frac{2\pi x}{L})$ تغير شكلها وتحولت الى $2\cos(\frac{2\pi x}{L})$ بعد تأثير المؤثر $-i\hbar\frac{d}{dx}$ عليها لذلك لايمكن الحصول على دالة ذاتية لهذه الدالة لمؤثر $\hat{P}_x$ وبدلا عنها سنحاول الحصول على معدل القيمة او القيمة المتوقعة

$$<\hat{P}_x> = \frac{\int \Psi^* \hat{P}_x \Psi\, d\tau}{\int \Psi^* \Psi\, d\tau} = <\hat{P}_x> = \frac{\int_0^L 2\, sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) * -i\hbar \frac{d}{dx}[2\, sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)]dx}{\int_0^L 4 sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right)dx}$$

تكامل البسط

$$\int_0^L 2\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) * -i\hbar \frac{d}{dx}[2\sin(\frac{2\pi x}{L})]dx = \int_0^L 2\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) * -i\hbar\, d(2\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right))$$

$$= -i\hbar \int_0^L 2\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) * \ d(2\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)) = -i\hbar \int_0^L \Psi \ d\Psi \ = -i\hbar * \frac{\Psi^2}{2}]_0^L$$

$$= -i\hbar \frac{4sin^2(\frac{2\pi x}{L})}{2}]_0^L \ = (-2i\hbar)\left[sin^2\left(\frac{2\pi L}{L}\right) - sin^2(0)\right] = -2i\hbar * 0 = 0$$

تكامل المقام

$$\int_0^L \Psi^* \ \Psi \, dx \ = \int_0^L 4\, sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx \Longrightarrow 4\int_0^L sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx$$

$$= 4\int_0^L \frac{1}{2}(1 - \cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right))dx \ = 2\int_0^L dx - 2\int_0^L \cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right) dx$$

$$= 2(L-0) - \frac{2*L}{4\pi}\int_0^L \cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right) * \frac{4\pi \, dx}{L} = 2L - \frac{L}{2\pi} - \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)]_0^L$$

$$= 2L + \frac{L}{2\pi}(\sin\left(\frac{4\pi L}{L}\right) - \sin(0)) \ = 2L + \frac{L}{2\pi} * 0 = 2L$$

∴ يكون التكامل

$$<\widehat{P_x}> = \frac{\int_0^L \Psi^* \widehat{P_x} \Psi dx}{\int |\Psi|^2 dx} = \frac{0}{2L} = 0$$

س/ أعد حل السؤال السابق لمؤثر الطاقة الحركية في بعد واحدعلى نفس الدالة

$$\hat{T}\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(2sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)) \Rightarrow \ T\hat{}\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} * 2\frac{d^2}{dx^2}(sin(\frac{2\pi x}{L}))$$

$$\hat{T}\Psi = \frac{-\hbar^2}{m}\frac{d}{dx}[* \frac{2\pi}{L}cos(\frac{2\pi x}{L})] \ \Rightarrow \hat{T}\Psi = \frac{-\hbar^2}{m} * \frac{-4\pi^2}{L} sin(\frac{2\pi x}{L})$$

$$\hat{T}\,[2sin(\frac{2\pi x}{L})] = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL} 2sin(\frac{2\pi x}{L})$$

نلاحظ ان الدالةΨ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{T}$ لذلك يكون التكامل

$$\langle\hat{T}\rangle = \frac{\int_0^L \Psi^* \hat{T}\Psi dx}{\int_0^L \Psi^* \, \Psi dx} \Longrightarrow \langle\hat{T}\rangle = \frac{\frac{4\pi^2\hbar^2}{mL}\int_0^L \Psi^*\Psi dx}{\int_0^L \Psi^*\Psi dx} \Longrightarrow \therefore \langle\hat{T}\rangle = \frac{4\pi^2\hbar^2}{mL}$$

نلاحظ انه بالرغم من ان معدل القيمة او القيمة المتوقعة لمؤثر الزخم كانت 0 الى ان القيمة المتوقعة لمؤثر الطاقة الحركية ساوت المقدار $\frac{4\pi^2\hbar^2}{mL}$ ويجب الانتباه هنا ان القيمة المتوقعة لاتعطي القيمة الحقيقية للدالة وانما تعطي احتمالية وبالتالي فأن معنى القيمة المتوقعة للزخم هو تساوي احتمالية توجه الجسم نحو اليسر او نحو اليمين على طول المحور x ان النتيجة العامة لحاصل تأثير مؤثر على دالة حالة بأتحاد خطي لمجموعة من الدوال الاساس لايكون دالة ذاتية مالم تكون القيمة الذاتية للدوال الاساس منحلة اي ان

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Phi_i$$

$$\widehat{M}\Phi_i = m_i c_i \Phi_i = c_i m_i \Phi_i$$

$$\therefore \widehat{M}\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \widehat{M}\Phi_i = \sum_{i=1}^{n} m_i c_i \Phi_i$$

اذا كانت القيم الذاتية منحلة فأن

$$m_1 = m_2 = m_3 = m_i = m_n = m$$

$$\therefore M\hat{}\Psi = m\sum_{i=1}^{n} c_i \Phi_i \Rightarrow \widehat{M}\Psi = m * \Psi$$

وبذلك تكون معدل القيمة للمؤثر هي الطريقة التي يمكن بواسطتها أستخلاص المعلومات من دالة الأتحاد الخطي Ψ ذات القيم الذاتية غير المتساوية (غير المنحلة)

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} c_i \Phi_i$$

$$\widehat{M}\Psi = \widehat{M}\sum_{i=1}^{3} c_i \Phi_i \Rightarrow \sum_{i=1}^{3} c_i m \Phi_i$$

$$\widehat{M}\Psi = \sum_{n=1}^{n} m_i c_i \Phi_i$$

$$\therefore \langle \widehat{M} \rangle = \frac{\int \Psi^* \widehat{M}\Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

<u>البسط</u>

$$\int \Psi^* \widehat{M}\, \Psi d\tau = \int (\textstyle\sum_{i=1}^{3} c_i \Phi_i)^* \widehat{M} (\sum_{i=1}^{3} c_i \Phi_i)\, d\tau$$

$$= \int (\textstyle\sum_{i=1}^{3} c_i^* \Phi_i^* \sum_{i=1}^{3} m_i c_i \Phi_i)\, d\tau$$

$$= \int (c_1^*\Phi_1^* + c_2^*\Phi_2^* + c_3^*\Phi_3^*)(m_1 c_1 \Phi_1 + m_2 c_2 \Phi_2 + m_3 c_3 \Phi_3) d\tau$$

$$= \int m_1 c_1^* c_1 \Phi_1^* \Phi_1 d\tau + \int m_2 c_1^* c_2 \Phi_1^* \Phi_2 d\tau + \int m_3 c_1^* c_3 \Phi_1^* \Phi_3 d\tau$$

$$+ \int m_1 c_2^* c_1 \Phi_2^* \Phi_1 d\tau + \int m_2 c_2^* c_2 \Phi_2^* \Phi_2 d\tau + \int m_3 c_2^* c_3 \Phi_2^* \Phi_3 d\tau$$

$$+\int m_1 c_3^* c_1 \Phi_3^* \Phi_1 \, d\tau + \int m_2 c_3^* c_2 \Phi_3^* \Phi_2 \, d\tau + \int m_3 c_3^* c_3 \Phi_3^* \Phi_3 \, d\tau$$

$$= m_1 c_1^* c_1 \int \Phi_1^* \Phi_1 \, d\tau + m_2 c_1^* c_2 \int \Phi_1^* \Phi_2 \, d\tau + m_3 c_1^* c_3 \int \Phi_1^* \Phi_3 \, d\tau$$

$$+ m_1 c_2^* c_1 \int \Phi_2^* \Phi_1 \, d\tau + m_2 c_2^* c_2 \int \Phi_2^* \Phi_2 \, d\tau + m_3 c_2^* c_3 \int \Phi_3^* \Phi_3 \, d\tau$$

$$+ m_1 c_3^* c_1 \int \Phi_3^* \Phi_1 \, d\tau + m_2 c_3^* c_2 \int \Phi_3^* \Phi_2 \, d\tau + m_3 c_3^* c_3 \int \Phi_3^* \Phi_3 \, d\tau$$

وحسب قاعدة المعايرة-التعامد orthonormalization

$$\int \Phi_n^* \Phi_m d\tau = \delta_{nm}$$

$$\therefore \int \Psi^* \widehat{M} \Psi d\tau = m_1 c_1^* c_1 * 1 + m_2 c_1^* c_2 * 0 + m_3 c_1^* c_3 * 0$$

$$+ m_1 c_2^* c_1 * 0 + m_2 c_2^* c_2 * 1 + m_3 c_2^* c_3 * 0$$

$$+ m_1 c_3^* c_1 * 0 + m_2 c_3^* c_2 * 0 + m_3 c_3^* c_3 * 1$$

$$\int \Psi^* \widehat{M} \Psi d\tau = m_1 c_1^* c_1 + m_2 c_2^* c_2 + m_3 c_3^* c_3$$

تك مل المقام

$$\int \Psi^* \Psi d\tau = \int (c_1^* \Phi_1^* + c_2^* \Phi_2^* + c_3^* \Phi_3^*)(c_1 \Phi_1 + c_2 \Phi_2 + c_3 \Phi_3) d\tau$$

$$\rightrightarrows \int \Psi^* \Psi d\tau = c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3$$

$$\therefore \langle \widehat{M} \rangle = \frac{\int \Psi^* \widehat{M} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} = \frac{m_1 c_1^* c_1 + m_2 c_2^* c_2 + m_3 c_3^* c_3}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3}$$

و هنا يتضح المفهوم الاحتمالي لمربع دالة الموجة حيث ان الاحتمالية الجزئية i تكون $\boldsymbol{P_i = c_i^* c_i}$ للدالة المتناسقة و تكون $\boldsymbol{P_i = \frac{c_i^* c_i}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3}}$ للدالة غير المتناسقة

$$\langle \widehat{M} \rangle = \frac{\int \Psi^* \widehat{M} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} = P_1 m_1 + P_2 m_2 + P_3 m_3 \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots (4-5)$$

يستخدم القانون اعلاه لحساب القيمة المتوقعة لمؤثر يعمل على دالة اتحاد خطي تكون القيم الذاتية للدوال الاساس التي تكونها غير متساوية.

و عندما تكون الدالة Ψ معايرة يكون حاصل الجمع في المقام 1 اي 100% وبهذا تكون P_i جزء الاحتمالية التي تحمله الدالة الاساس Φ_i ضمن دالة الموجة الكلية لذلك فمن الافضل معايرة الدالة Ψ قبل ايجاد الاحتماليات الجزئية

س/ احسب احتماليات القياس P_1, P_2, P_3 للدالة Ψ المعرفة كاتحاد خطي للدوال الاساس Φ_i كالاتي

$$\Psi = \Phi_1 + 25i\Phi_2 + 2.4\Phi_3$$

ج/ ايجاد ثابت التناسق N

$$\int \Psi^* \Psi d\tau = \int (\Phi_1 + 25i\Phi_2 + 2.4\Phi_3)^* (\Phi_1 + 25i\Phi_2 + 2.4\Phi_3) d\tau$$

$$= \int (\Phi_1^* - 25i\Phi_2^* + 2.4\Phi_3^*)(\Phi_1 + 25i\Phi_2 + 2.4\Phi_3) d\tau$$

$$= \int \Phi_1^* \Phi_1 \, d\tau - (25)^2 i^2 \int \Phi_2^* \Phi_2 \, d\tau + (2.4)^2 \int \Phi_3^* \Phi_3 \, d\tau$$

$$= 1 + 625 + 5.76 = 631.76$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int \Psi^* \Psi d\tau}} = \frac{1}{\sqrt{631.76}} \Longrightarrow \bar{\Psi} = N\Psi = \frac{1}{\sqrt{631.76}} (\Phi_1 + 25i\Phi_2 + 2.4\Phi_3)$$

$$P_1 = N^2 c_1^* c_1 = \frac{1}{631.76} * 1 * 1 = \frac{1}{631.76}$$

$$P_2 = N^2 c_2^* c_2 = \frac{1}{631.76} * (-25i * 25i) = \frac{625}{631.76}$$

$$P_3 = N^2 c_3^* c_3 = \frac{1}{631.76} * (2.4 * 2.4) = \frac{5.76}{631.76}$$

حل اخر

$$P_1 = \frac{c_1^* c_1}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3} = P_1 = \frac{1*1}{1*1 + (-25i)(+25i) + 2.4*2.4} = P_1 = \frac{1}{1+625+5.76} = \frac{1}{631.76}$$

$$P_2 = \frac{c_2^* c_2}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3} = P_2 = \frac{(-25i)(+25i)}{1*1 + (-25i)(+25i) + 2.4*2.4} = P_2 = \frac{625}{1+625+5.76} = \frac{625}{631.76}$$

$$P_3 = \frac{c_3^* c_3}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3} = P_3 = \frac{2.4*2.4}{1*1 + (-25i)(+25i) + 2.4*2.4} = P_3 = \frac{5.76}{1+625+5.76} = \frac{5.76}{631.76}$$

و عند جمع الاحتماليات للدالة المعايرة

$$P_1 + P_2 + P_3 = \frac{1}{631.76} + \frac{625}{631.76} + \frac{5.76}{631.76} = \frac{631.76}{631.76} = 1$$

س/ احسب القيمة المتوقعة لمؤثر الزخم الخطي في بعد واحد على دالة الاتحاد الخطي المكونة من الدوال

$$\phi_1 = e^{-ix}, \phi_2 = e^{-2ix}, \phi_3 = e^{-i3x}$$

ج/ ان الدوال اعلاه هي دوال ذاتية لمؤثر الزخم الخطي و قيمها الذاتية هي $(-\hbar\ , -2\hbar\ , -3\hbar)$ على التوالي و هي قيم ذاتية مختلفة لذلك حسب (النتيجة 2) في المحاضرة 6 تكون هذه الدوال متعامدة مع بعضها و في الوقت نفسه هي دوال متناسقة مع نفسها الا انه حسب (النتيجة 5) في المحاضرة 6 تكون دالة الاتحاد الخطي لهذه الدوال غير ذاتية دالة الاتحاد الخطي لها للا تحقق معادلة القيمة الذاتية لذلك تحسب القيمة المتوقعة من المعادلة $(7-4)$

$$\langle\widehat{p_x}\rangle = \frac{\int \Psi^* \widehat{p_x} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} = P_1 m_1 + P_2 m_2 + P_3 m_3$$

$$\langle\widehat{p_x}\rangle = \frac{c_1^* c_1}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3} * m_1 + \frac{c_2^* c_2}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3} * m_2 + \frac{c_3^* c_3}{c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3} * m_3$$

$$\langle\widehat{p_x}\rangle = \frac{1*1}{1*1+1*1+1*1}(-\hbar) + \frac{1*1}{1*1+1*1+1*1}(-2\hbar) + \frac{1*1}{1*1+1*1+1*1}(-3\hbar)$$

$$\langle\widehat{p_x}\rangle = \frac{1}{3}(-\hbar) + \frac{1}{3}(-2\hbar) + \frac{1}{3}(-3\hbar) = \frac{-6}{3}(\hbar) = -2\hbar$$

الفرضية الخامسة: الحالات الكمية المستقرة

الفرضية الخامسة: ان الفرضيات الاربعة التي مرت علينا سابقا يمكن تطبيقها بصورة جيدة مع الحالات الكمية المستقرة اي الحالات التي لاتتغير مع مرور الزمن الى ان الحالات المتغيرة توصف بالفرضية الخامسة والتي تنص على :ان التطور الزمني للحالة الكمية الغير مشوشة تعطى بمعادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (1-6)$$

حيث ان $\hat{H}$ هو المؤثر الهاملتوني للنظام الذي يصف الطاقة الكلية للنظام هنا يجب الانتباه الى ان Ψ يجب ان تكون دالة للاحداثيات والزمن $\Psi(q_i,t)$ كما ذكرنا في الفرضية الاولى وحيث اننا كتقريب اولي نكون مهتمين بالحالات المستقرة للنظام فالسؤال هنا كيف يمكننا تحويل المعادلة (6-1) والتي هي معتمدة على الزمن الى المعادلة غير معتمدة على الزمن يمكن استخدامها للحالات المستقرة بما ان المؤثر الهاملتوني هو مؤثر الطاقة الكلية للنظام لذلك فأن القيمة العددية لهذه الطاقة تمثل القيمة الذاتية للمؤثر الهاملتوني وتخضع لمعادلة القيمة الذاتية

$$\hat{H}\Psi(q_i,t) = E * \Psi(q_i,t) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-6)$$

والان نفرض ان الدالة $\Psi(q_i,t)$ هي حاصل ضرب دالتين احدهما دالة للاحداثيات فقط $\psi(q_i)$ ولاخرى دالة للزمن فقط $f(t)$

$$\Psi(q_i,t) = \psi(q_i) * f(t) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (3-6)$$

نعوض المعادلتين اعلاه في المعادلة (6-1) لنحصل على

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\psi(q_i) * f(t)] = E * \psi(q_i) * f(t) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (4-6)$$

ولأن المؤثر $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ هو مؤثر يعمل على دوال الزمن فقط فأنه يترك الدالة $\psi(q_i)$ بدون تغير

$$\psi(q_i) * i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[f(t)] = E * \psi(q_i) * f(t) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots .. (5-6)$$

وعند قسمة المعادلة (6-5) على حاصل ضرب الدالتين $\psi(q_i) * f(t)$ ينتج

$$\frac{i\hbar}{f(t)} * \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E$$

نلاحظ هنا امكانية تحويل التفاضل الجزئي الى تفاضل كلي لأن *f(t)* هي دالة للزمن فقط

$$\frac{i\hbar}{f(t)} * \frac{df(t)}{dt} = E \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (6-6)$$

يمكن حل المعادلة التفاضلية من خلال فصل المتغيرات فتكون

$$\int \frac{df(t)}{f(t)} = \frac{-iE}{\hbar}\int dt \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (7-6)$$

$$lnf(t) = \frac{-iE}{\hbar}t + \bar{c} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (8-6)$$

$$f(t) = e^{\bar{c} - \frac{iE}{\hbar}t} = e^{\bar{c}} * e^{\frac{-iE}{\hbar}t} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (9-6)$$

وبما ان $C = e^{\bar{c}}$ اي ان الدالة الاسية لمقدار ثابت هي ثابت ايضا

$$\therefore f(t) = Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (10-6)$$

لذلك عند التعامل مع الحالات المستقرة نستخدم المؤثر الهاملتوني غير المعتمد على الزمن

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (11-6)$$

حيث ان $\hat{H}, \hat{V}$ لاتحتوي على الزمن و ان المؤثر (6-11) عندما يؤثر على دالة الموجة الكلية $\Psi(q_i, t)$ والتي افترضت انها حاصل ضرب الدالتين $\psi(q_i) * f(t)$ وبالتعويض عن $f(t)$ بالمعادلة (6-10) نحصل على

$$\hat{H}[\psi(q_i) * f(t)] = E * \psi(q_i) * f(t)$$

$$(\hat{T} + \hat{V})\left[\psi(q_i) * Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t}\right] = E * \psi(q_i) * Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t} \ldots\ldots\ldots (12-6)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right]\left[\psi(q_i) * Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t}\right] = E * \psi(q_i) * Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t} \ldots (13-6)$$

وحيث ان المؤثرات الموجودة في المعادلة غير معتمدة على الزمن فأن $ce^{\frac{-iE}{\hbar}t}$ تبقى بدون تأثير

$$Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t} * \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right]\psi(q_i) = E * \psi(q_i) * Ce^{\frac{-iE}{\hbar}t} \ldots\ldots (14-6)$$

وبأختصار Ce^{-iEt} من الطرفين نحصل على

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right]\psi(q_i) = E * \psi(q_i) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. (15-6)$$

والتي هي نفس معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن والتي حصلنا عليها في الفرضية الاولى

تمثيل ديراك للميكانيك الكمي

ان الصيغة الرياضية للميكانيك الكمي التي مرت سابقا تعرف بأنها الصيغة الموجية للميكانيك الكمي او صياغة شرودنكر للميكانيك الكم وتشير الى وصف الأحتماليات الكمية كتكاملات لمربع دالة الموجة والى المؤثرات كعوامل رياضية

حيث تبدو صيغة ديراك كتعميم لنضرية القيمة المتوقعة حيث يلفظ الجزء $< \phi_n|$ (برا) و الجزء $|\phi_m >$ (كيت) وبذلك يمكن تمثيل التكامل

$$\int \phi_n^* \phi_m dt = <\phi_n|\phi_m> \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (16-6)$$

ويلفظ براكيت الحالة n, m ويمكن كتابته أختصارا $\langle n|m\rangle$ وبذلك تكتب معادلة القيمة الذاتية حسب تعبير ديراك.

يمكن ايجاز تعابير الميكانيك الكمي حسب الصياغات الثلاثة من خلال الجدول

ت	الصيغة	الموجي	المصفوفي	ديراك
1	دالة موجة	ψ	$\boldsymbol{\psi}_{(n\times1)}$ (مصفوفة عامود)	$\|\psi >$ (كيت)
2	مرافق الدالة	ψ^*	$\boldsymbol{\psi}^{\dagger}{}_{(1\times n)}$ (مصفوفة سطر)	$< \psi\|$ (برا)
3	مربع التكامل	$\int \psi^* \psi \, d\tau$	$\boldsymbol{\psi}^{\dagger}\boldsymbol{\psi}$	$\langle\psi\|\psi\rangle$

4	N	$N = \frac{1}{\sqrt{\int \psi^* \psi \, d\tau}}$	$N = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\psi}^\dagger \boldsymbol{\psi}}}$	$N = \frac{1}{\langle \psi \vert \psi \rangle}$
5	الاتحاد الخطي	$\psi = \sum c_i \phi_i$	$\boldsymbol{\psi} = \sum c_i \boldsymbol{\phi}_i$	$\vert \psi >= \sum c_i \, \vert i >$
6	δ_{nm}	$\int \phi_n^* \phi_m d\tau$	$\boldsymbol{\phi}_n^\dagger \boldsymbol{\phi}_m$	$\langle n \vert m \rangle$
7	المؤثر	$\hat{A}$	$\widehat{\boldsymbol{A}}_{(n\times n)}$ (مصفوفة مربعة)	$\hat{A}$
8	معادلة القيمة الذاتية	$\hat{A}\psi = a * \psi$	$\widehat{\boldsymbol{A}}_{(n\times n)} \boldsymbol{\psi}_{(\mathrm{n}\times 1)} = a * \boldsymbol{\psi}_{(\mathrm{n}\times 1)}$	$\hat{A} \vert \psi >= a * \vert \psi >$
9	معادلة القيمة المتوقعة	$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau}{\int \psi^* \psi \, d\tau}$	$\langle \widehat{\boldsymbol{A}} \rangle = \frac{\boldsymbol{\psi}^\dagger \widehat{\mathbf{A}} \boldsymbol{\psi}}{\boldsymbol{\psi}^\dagger \boldsymbol{\psi}}$	$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi \vert \hat{A} \vert \psi \rangle}{\langle \psi \vert \psi \rangle}$

مثلا يمكن حساب معاملات الدوال الاساس في دالة الاتحاد الخطي حسب الطريقة الموجية من خلال ضرب الدالة الاساس المراد ايجاد ثابتها بدالة الاتحاد الخطي ومن ثم اخذ التكامل فنحصل على

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} C_i \phi_i$$

$$\int \phi_k^* \Psi d\tau = \int \phi_k^* \sum_{i=1}^{n} C_i \phi_i \, d\tau = C_k \delta_{ki} = C_k \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (17-6)$$

وبصيغة ديراك

$$|\psi >= \sum c_i \, |i >$$

$$\langle k | \Psi \rangle = \langle k | \sum_{i=1}^{n} C_i | i \rangle = C_k \langle k | i \rangle = C_k \delta_{ki} = C_k \ldots\ldots\ldots\ldots (18-6)$$

اما فائدة هذه الطريقة فتتضح عند اعادة كتابة دالة الاتحاد الخطي مع تعويض المعامل C_k في المعادلة اعلاه فنحصل على

$$|\Psi> = \sum_{i=1}^{n} c_i\, |i> = \sum_{i=1}^{n}\langle i|\Psi\rangle * |i> \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (19-6)$$

$$|\Psi> = \sum_{i=1}^{n}|i> * <i\ \ |\Psi>\ \ or\ \sum_{i=1}^{n}|i> * <i\ \ |\Psi> = 1 *\ |\Psi> \ldots (20-6)$$

حيث نرى ان المعادلة $(20-6)$ كما لو كانت معادلة قيمة ذاتية حيث ان دالة الموجة $|\Psi>$ عادت كما كانت و يمكن اعتبار ان $\sum_{i=1}^{n}|i><i\,|$ عمل كمؤثر على الدالة و قيمته الذاتية هي واحد ان هذا المؤثر يكافئ المصفوفة الواحدية لانها تعمل على اعادة $|\Psi>$ الى نفسها مضروبة بواحد.

مثال/ اثبت ان القيمة الذاتية لمؤثر هرميتي تكون حقيقية دائما علما ان دالة الحالة تكون معايرة حسب صيغة ديراك

$$\int \phi_k^* \hat{A} \phi_k \, d\tau = \int (A\phi_k)^* \, \phi_k d\tau$$

$$= \langle k|\hat{A}|k\rangle = \langle \hat{A}|k|k\rangle$$

$$\langle k|a_k|k\rangle = \langle a_k^*|k|k\rangle$$

$$a_k\langle k|k\rangle = a_k^*\langle k|k\rangle$$

ولأن الدالة معايرة تكون

$$\langle k|k\rangle = 1$$

لذلك

$$a_k = a_k^*$$

مثال/ اثبت ان الدوال الذاتية المختلفة للعامل الهرميتي نفسه تكون متعامدة اذا كانت قيما ذاتية مختلفة حسب صيغة ديراك

$$\int \phi_n^* \hat{A} \phi_m \, dt = \int \left(\hat{A}\phi_n\right)^* \phi_m dt$$

$$= \langle n|\hat{A}|m\rangle = \langle \hat{A}|n|m\rangle$$

$$\langle n|a_m|m\rangle = \langle a_n^*|n|m\rangle$$

$$a_m\langle n|m\rangle = a_n^*\langle n|m\rangle$$

ولأن المؤثر هرميتي

$$a_m\langle n|m\rangle = a_n\langle n|m\rangle$$

$$a_m\langle n|m\rangle - a_n\langle n|m\rangle = 0$$

$$(a_m - a_n)\ \langle n|m\rangle = 0$$

وحسب الفرض $a_n \neq a_m$

لذلك يكون

$$a_m - a_n \neq 0$$

$$\therefore\ \langle n|m\rangle = 0$$

معادلة شرودنكر

كما ذكرنا سابقا في المحاضرة الاولى ان ديبرولي افترض ان الاجسام المادية تمتلك صفة موجية اضافة الى صفاتها الجسيمية الاصلية ويمكن حساب الطول الموجي للموجة المادية المصاحبة لحركة الجسيم من القانون

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{m\mathrm{v}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \ (1)$$

و لغرض صياغة علاقة ذات مفهوم اشمل يمكن منها الحصول على مختلف المعلومات المتعلقة بديناميكية النظام يجب دمج الفرضية الاساسية لدبرولي في معادلة موجية عامة يمكن اخذها من القوانين المعروفة في ذلك الوقت عن الحركة الموجية للموائع وهي

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = \frac{1}{\mathrm{v}^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \ (2)$$

وهي معادلة عامة تبين تغير سعة الموجة ϕ بالنسبة لتغير موقع الجسيم في الفضاء ثلاثي البعد و تغير الزمن عندما تكون سرعة انتقال الموجة v و يمكن كتابتها بصورة مختصرة بالشكل

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{\mathrm{v}^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \ (3)$$

حيث ان ∇^2 يساوي $\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ و يسمى بعامل لابلاس ان ϕ و التي تعبر عن سعة الموجة تتغير تغيرا دوريا بالنسبة الى الزمن t ويمكن الحصول على مثل هكذا سلوك من الناحية الرياضية بافتراض ان ϕ هي دالة مثلثية (sin او cos او اتحاد خطي بينهما) بالنسبة للزمن

$$\phi = A\sin(2\pi\nu t) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \ (4)$$

حيث ان A هو ثابت يتناسب مع ارتفاع الموجة ، ν تردد الموجة.

لغرض دمج المعادلات (3)و(4) يجب تفاضل المعادلة الاخيرة مرتين بالنسبة الى الزمن

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = A\cos(2\pi\nu t) * 2\pi\nu$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = -A\sin(2\pi\nu t) * 2\pi\nu * 2\pi\nu$$

$$\therefore\ \frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = -4\pi^2\nu^2\, A\sin(2\pi\nu t) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \ (5)$$

و بمقارنة هذه المعادلة مع المعادلة $(4-4)$ نحصل على

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi^2 \nu^2 \phi \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (6)$$

لقد حصلنا على المعادلة $(4-6)$ عندما افترضنا ان ϕهي دالة جيب بالنسبة الى الزمن ويمكن الحصول على نفس النتيجة اذا افترضنا ان ϕ هي دالة جيب تمام او دالة اتحاد خطي لدالتي الجيب والجيب تمام

$$\phi = Asin(2\pi \nu t) + Bcos(2\pi \nu t)$$

حيث ان A,B ثوابت و الان نعوض المعادلة $(4-6)$ في المعادلة $(4-3)$ فنحصل على

$$\nabla^2 \emptyset = \frac{1}{\mathrm{v}^2} * -4\pi^2 \nu^2 \emptyset \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (7)$$

ان الغرض الاساسي من هذا الاشتقاق هو دمج معادلة دبرولي مع معادلة قياسية للحركة الموجية مثل معادلة $(4-7)$ و بسبب كون معادلة دبرولي $(4-1)$ تتضمن الطول الموجي لذلك فمن المناسب استبدال كميات السرعة v و التردد ν الموجودة في المعادلة $(4-7)$ بالكمية λ من خلال العلاقات

$$\mathrm{v} = \lambda * \nu$$

$$\therefore\ \lambda = \frac{\mathrm{v}}{\nu}\ \Rightarrow \frac{1}{\lambda^2} = \frac{\nu^2}{\mathrm{v}^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (8)$$

نعوض معادلة (8) في المعادلة (7) فنحصل على

$$\nabla^2 \emptyset = \frac{-4\pi^2}{\lambda^2} \phi \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (9)$$

و الان نستطيع تعويض علاقة دبرولي (1) في المعادلة(9) بعد تحويلها للشكل $\frac{1}{\lambda^2} = \frac{P^2}{h^2}$

$$\nabla^2 \emptyset = \frac{-4\pi^2 P^2}{h^2}\ \phi \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (10)$$

من وجهة نظر كيمياء الكم فان الكميات ذات الاهمية من ناحية القياسات التجريبية هي كميات الطاقة و بما ان الزخم يرتبط مع الطاقة الحركية بالعلاقة $T = \frac{P^2}{2m}$ فان المعادلة $(4-10)$ تصبح

$$\nabla^2 \emptyset = \frac{-8\pi^2 mT}{h^2}\ \phi \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (11)$$

اذا عدنا الى وجهة النظر التجريبية فان ما يهم في الانتقالات الطيفية مثلا هو الطاقة الكلية للفوتون الساقط E و حد الجهد(الطاقة الكامنة) للمنظومة المدروسة ومن العلاقة $E = T + V$ نحصل على $T = E - V$ ونعوضها في المعادلة (11) فتصبح

$$\nabla^2 \emptyset + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\phi = 0 \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (12)$$

ان المعادلة اعلاه تعطي وصف شامل لسلوك النظام من خلال دالة الموجة ϕويمكن من خلالها استخلاص كل المعلومات المتعلقة بالنظام لذلك فهي دالة حالة وليست دالة موجة فقط فيكون من المناسب تغيير رمز الدالة لتبيان الحالة العمومية لها و اتفق على الرمز Ψ فتكون المعادلة (13) بالشكل

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\Psi = 0 \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (13)$$

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة شرودنكر الغير معتمدة على الزمن لغياب الحد التفاضلي المعتمد على الزمن .

المحاضرة الثامنة

تطبيقات الميكانيك الكمي

هناك 3 انواع من الحركة بصورة عامة هي الحركة الانتقالية والحركة الأهتزازية والحركة الدورانية وحسب طرق الميكانيك الكمي يتم تكميم كل نمط حركة لوحده

1- الحركة الانتقالية

أ-الجسم الحر

في البداية نضع صيغة القيمة الذاتية لمؤثر الطاقة الكلية للنظام حسب عدد المحاور التي يتحرك بها الجسم حسب معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

$$\hat{H}\Psi_{(x,y,z)} = E * \Psi_{(x,y,z,)} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right]\Psi_{(x,y,z,)} = E * \Psi_{(x,y,z,)} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2)$$

وبما ان الجسم حر فأن الجهد الذي يتحرك به يكون صفر يعني الطاقة الكامنة صفر

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E * \Psi \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3)$$

هذه المعادلة بثلاث متغيرات لحلها يجزء حد الطاقة الكلية للنظام حيث تكون الطاقة الكلية هي مجموع الطاقة الكلية على المحاور الثلاثة كما ان دالة الموجة على ثلاث محاور تمثل حاصل ضرب دالة الموجة على كل محور

$$\begin{Bmatrix} E = E_x + E_y + E_z \\ \Psi_{(x,y,z)} = \psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} \end{Bmatrix} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4)$$

نعوض(4)في المعادلة (3)

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} = \left(E_x + E_y + E_z\right) * \psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} \ldots\ldots (5)$$

وهنا فأن المؤثر $\frac{\partial^2}{\partial qi^2}$ سوف يؤثر على كل دالة خاصة به ويترك باقي الدوال فنحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\psi_{(y)} * \psi_{(z)} \frac{\partial^2 \psi_{(x)}}{\partial x^2} + \psi_{(x)} * \psi_{(z)} \frac{\partial^2 \psi_{(y)}}{\partial y^2} + \psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \frac{\partial^2 \psi_{(z)}}{\partial z^2}\right]$$

$$= \left(E_x + E_y + E_z\right)\psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} \ldots\ldots\ldots.(6)$$

وكما مر سابقا في معادلة شرودنكر الزمنية نفصل كل متغير لوحدة بقسمة المعادلة على حاصل ضرب الدوال $\psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)}$ فيكون

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{\partial^2 \psi_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi_{(y)}}\frac{\partial^2 \psi_{(y)}}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi_{(z)}}\frac{\partial^2 \psi_{(z)}}{\partial z^2}\right] = E_x + E_y + E_z \ldots\ldots.(7)$$

بعد فصل المتغيرات نستطيع ان نحول التفاضلات الجزئية الى تفاضلات تامة

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} + \frac{1}{\psi_{(y)}}\frac{d^2 \psi_{(y)}}{dy^2} + \frac{1}{\psi_{(z)}}\frac{d^2 \psi_{(z)}}{dz^2}\right] = E_x + E_y + E_z \ldots\ldots.(8)$$

والان يتم حل معادلة كل متغير لوحدها فتجزأالمعادلة (8)الى ثلاث معادلات واحدة لكل متغير فنأخذ حالة المتغير x على سبيل المثال

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} = E_x \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(9)$$

$$\frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2}\psi_{(x)} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots..(10)$$

نحول الكمية $\frac{2mE_x}{\hbar^2}$ الثابتة الى مربع كمية ثابتة اخرى نفرضها α^2 فتكون المعادلة

$$\frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} + \alpha^2 \psi_{(x)} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots.(11)$$

نرمز لمؤثر التفاضل على المحور $\left(\frac{d}{dx}\right)$ بالرمز المؤثري $\widehat{D_x}$ فتصبح المعادلة

$$\widehat{D_x^2}\,\psi_{(x)} + \alpha^2 \psi_{(x)} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(12)$$

$$\left(\widehat{D_x^2} + \alpha^2\right)\psi_{(x)} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(13)$$

نلاحظ ان قوس التأثير يمكن تجزئته بتحويله الى قوس فرق بين مربعين

$$(D_x^2 + \alpha^2)\psi_{(x)} = (D_x^2 - i^2\alpha^2)\psi_{(x)} = (D_x - i\alpha)(D_x + i\alpha)\psi_{(x)} = 0 \ldots(14)$$

يمكن حل المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية اعلاه بواسطة الحل العام

$$\psi_{(x)} = C_1 e^{i\propto x} + C_2 e^{-i\propto x} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(15)$$

نلاحظ ان الأس في الحد الأول يمثل حل القوس الأول وكذلك الأس في الحد الثاني يمثل حل القوس الثاني بينما تكون C_1 وC_2 هي ثوابت التكامل للمعادلة من الدرجة الثانية وبأعادة α الى صيغته الأصلية

$$\psi_{(x)} = C_1 e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + C_2 e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(16)$$

عند حساب ثوابت التكامل C_1 وC_2 يجب ان تعرف على سلوك الدالة في المناطق الحدودية وحيث ان الجسم حر لذلك فهو حر الحركة في المنطقة من $-\infty \le x \le +\infty$ حيث اذا عوضنا $-\infty$ في المعادلة (16) يكون الحد الأول صفر والثاني لانهائي وكذلك اذا عوضنا $+\infty$ يكون الحد الثاني =صفر والاول لانهائي وبذلك فأن قيمة التكامل

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{(x)}^{\;*}\,\psi_{(x)}\,dx = \infty \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(17)$$

اي ان المعادلة غير مقبولة فيزيائيا و لا يمكن تعين ثابت معايرة للدالة الموجية ان النتيجة اعلاه تقرر ان حالة الجسم الحر حالة غير واقعية اذ لا يمكن ان يوجد جسم لا يتداخل مع الجسمات الأخرى او مع محيطه.

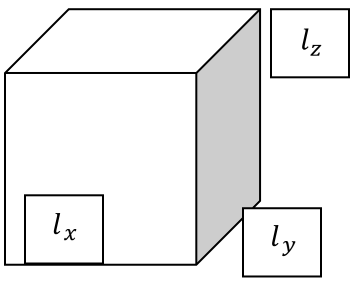
ب- حالة جسم في صندوق

بدلاًمن ان نفرض ان الجسم حر في كل الفضاء نفرض ان الجسم حر في منطقة محدودة من الفضاء

$0 < x < l_x$

$0 < y < l_y$

$0 < z < l_z$



اي ان الجسم موجود في مكعب تكون الطاقة الكامنة (الجهد) للجسم في هذا المكعب =0 ولكن الطاقة الكامنة للجسم خارج المكعب تكون لانهائية لذلك يجب ان نبحث مسألة وجود الجسم خارج الصندوق وداخله ففي خارج الصندوق يكون الحل

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(x,y,z)} + V * \Psi_{(x,y,z)} = E * \Psi_{(x,y,z)} \dots\dots\dots\dots(18)$$

وحيث ان V=∞ خارج الصندوق

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(x,y,z)} + \infty * \Psi_{(x,y,z)} = E * \Psi_{(x,y,z)} \dots\dots\dots\dots\dots(19)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(x,y,z)} = (E-\infty) * \Psi_{(x,y,z)} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots(20)$$

$$\therefore \nabla^2\Psi_{(x,y,z)} = \frac{2m}{\hbar^2}(\infty - E) * \Psi_{(x,y,z)} \dots\dots\dots\dots\dots(21)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Psi_{(x,y,z)}} * \nabla^2\Psi_{(x,y,z)} = \infty \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots(22)$$

لذلك

$$\therefore \Psi_{(x,y,z)} = 0 \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots(23)$$

اي ان احتمالية وجود الجسم خارج الصندوق تكون 0 اما داخل الصندوق فيكون الحل مشابه لحالة الجسم الحر حتى نصل الى المعادلة (16) اي

$$\psi_{(x)} = C_1 e^{i\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}x} + C_2 e^{-i\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}x}$$

والأن لحساب الثوابت التكامل نطبق الشروط الحدودية وهي

$$\psi_{(x)} = 0 \quad if\ x = 0 \ \ \& \ \psi_{(x)} = 0\ if\ x = l_x$$

كما رأينا في عند حل معادلة $\psi_{(x)}$ خارج الصندوق

$$0 = C_1 e^{+i\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}*0} + C_2 e^{-i\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}*0} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots(23)$$

$$\Rightarrow C_1 + C_2 = 0 \Rightarrow C_1 = -C_2 \leftrightarrow C_1 = -C_2 \dots\dots\dots\dots\dots\dots(24)$$

نعوض(24)في(16) فنحصل على

$$\psi(x) = C_1\left[e^{i\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}x} - e^{-i\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}x}\right] \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (25)$$

وبأستخدام المتطابقات

$$e^{iz} = cos(z) + i * sin(z)$$
$$e^{-iz} = cos(z) - i * sin(z)$$
$$cos(z) = \frac{1}{2}\left(e^{iz} + e^{-iz}\right) \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (26)$$
$$sin(z) = \frac{1}{2i}\left(e^{iz} - e^{-iz}\right)$$

يكون لدينا

$$2i * sin(z) = \left(e^{iz} - e^{-iz}\right) \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots.. (27)$$

نعوض (27) في (25)

$$\psi(x) = C_1 * 2i * \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}x\right) \dots\dots\dots\dots\dots.. (28)$$

ليكن حاصل ضرب الثوابت $2i * C_1$ الثابت A_x فتصبح المعادلة

$$\psi(x) = A_x * \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}x\right) \dots\dots\dots\dots\dots.. (29)$$

و الان نعوض بالشرط الحدودي الثاني $\psi(x) = 0 \; if \; x = l_x$

$$0 = A_x * \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}l_x\right) \dots\dots\dots\dots\dots.. (30)$$

تكون هذه المعادلة صحيحة اي تاخذ قيمة الصفر عندما تساوي الزاوية (المقدار بين الاقواس في المعادلة) احد مضاعفات π اي

$$\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}l_x = n\pi \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (31)$$

$$\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar} = \frac{n_x\pi}{l_x} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (32)$$

$$E_{nx} = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml_x^2} = \frac{n_x^2 h^2}{8ml_x^2} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (33)$$

و صلنا الى المعادلة اعلاه البالغة الاهمية و التي تمثل القيمة الذاتية للطاقة الكلية في بعد واحد حيث تستعمل في ايجاد طاقة الجسم المكممة في البعد x لكل مستوى من مستويات الطاقة او لايجاد الطاقة الازمة للانتقال بين المستويات و هنا يجب الانتباه الى اننا غيرنا الرمز من E_x الى الرمز E_{nx} للدلالة على ان الطاقة مكممة.

و الان لايجاد الثابت A_x نعوض المعادلة (32) في المعادلة (29)

$$\psi(x) = A_x * \sin\left(\frac{n_x \pi}{l_x} x\right) \dots\dots\dots\dots\dots\dots..(34)$$

و من ثم نطبق شرط التناسق(المعايرة) لايجاد A

$$\int_0^{l_x} \psi^*(x) * \psi(x) dx = \int_0^{l_x} |\psi|^2 dx = 1$$

$$\int_0^{l_x} A_x^2 sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{l_x}\right) dx = 1 \Longrightarrow A_x^2 \int_0^{l_x} sin^2\left(\frac{n_x \pi}{l_x} x\right) dx = 1$$

$$A_x^2 \int_0^{l_x} \frac{1}{2}\left[1 - cos\left(\frac{2n_x \pi}{l_x} x\right)\right] dx = 1$$

$$\frac{A_x^2}{2} \int_0^{l_x} dx - \frac{A_x^2}{2} \int_0^{l_x} cos\left(\frac{2n_x \pi}{l_x} x\right) dx = 1$$

$$\frac{A_x^2}{2}(l_x - 0) - \frac{A_x^2}{2} * \frac{l_x}{2n_x \pi} \int_0^{l_x} cos\left(\frac{2n_x \pi}{l_x} x\right) * \frac{2n_x \pi}{l_x} dx = 1$$

$$\frac{A_x^2 l_x}{2} - \frac{A_x^2}{4} \frac{l_x}{n_x \pi}\left[sin\left(\frac{2n_x \pi}{l_x} l_x\right) - sin\left(\frac{2n_x \pi}{l_x} * 0\right)\right] = 1$$

$$\frac{A_x^2 l_x}{2} - \frac{A_x^2}{4} \frac{l_x}{n_x \pi}[0 - 0] = 1 \Longrightarrow \frac{A_x^2 l_x}{2} = 1 \Longrightarrow A_x = \sqrt{\frac{2}{l_x}} \dots.(35)$$

نعوض المعادلة (35) في المعادلة (34)

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l_x}} * \sin\left(\frac{n_x \pi}{l_x} x\right) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots .. (36)$$

و بهذا حصلنا على معادلة الدالة الذاتية في بعد واحد (x) لحالة الجسم في صندوق المعرفة بثابت المعايرة $A_x = \sqrt{\frac{2}{l_x}}$.

في حالة الابعاد الاخرى يكون الحل مشابه مع استبدال الاحداثي (x) بالاحداثي (y) مرة و (z) مرة اخرى فنحصل على

$$\psi(y) = \sqrt{\frac{2}{l_y}} * \sin\left(\frac{n_y \pi}{l_y} y\right) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots .. (37)$$

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{2}{l_z}} * \sin\left(\frac{n_z \pi}{l_z} z\right) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots .. (38)$$

و بذلك تكون دالة الموجة الكلية

$$\Psi(x,y,z) = \psi(x) * \psi(y) * \psi(z) \Longrightarrow$$

$$\Psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{2}{l_x}} * \sin\left(\frac{n_x \pi}{l_x} x\right) * \sqrt{\frac{2}{l_y}} * \sin\left(\frac{n_y \pi}{l_y} y\right) * \sqrt{\frac{2}{l_z}} * \sin\left(\frac{n_z \pi}{l_z} z\right) .. (39)$$

كما تكون معادلة تكميم الطاقة على المحاور (y) و (z)

$$E_{ny} = \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml_y^2} = \frac{n_y^2 h^2}{8ml_y^2} \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots (40)$$

$$E_{nz} = \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml_z^2} = \frac{n_z^2 h^2}{8ml_z^2} \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots (41)$$

و تكون المعادلة الكلية لتكميم الطاقة على المحاور الثلاثة كالاتي

$$E_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{n_x^2}{l_x^2} + \frac{n_y^2}{l_y^2} + \frac{n_z^2}{l_z^2}\right] \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots (42)$$

تطبيقات مسألة الجسيم في الصندوق

أ- **الحالات المتعلقة بمعادلة القيمة الذاتية للطاقة** : في المحاضرة السابقة وصلنا الى المعادلة

$$E_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{n_x^2}{lx^2} + \frac{n_y^2}{ly^2} + \frac{n_z^2}{lz^2}\right] \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ldots\ldots (1-10)$$

اذا كان الحيز الذي يتواجد في الجسيم مكعب اي ان اضلاعه متساوية $(lx = ly = lz = l)$ تكون المعادلة بالشكل

$$E_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8ml^2}\left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right] \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-10)$$

حيث ذكرنا ان الرموز nx, ny, nz هي اعداد صحيحة موجبة ولكن لا يمكن ان تكون صفر بسب ان دالة الموجة الكلية داخل الصندوق معادلة (39-9) سوف تكون صفر و هذا لا يتوافق مع الفرض بأن دالة الموجة تكون ذات قيمة داخل الصندوق وتكون صفر خارجه لذلك فأن اوطأمستوى من الطاقة لحالة الجسيم في صندوق تتحقق عند ما تكون $nx = ny = nz = 1$ وسنطلق عليها الحالة E_{111}

$$E_{111} = \frac{\hbar^2}{8m^2}(1+1+1) = 3\frac{h^2}{8ml^2}$$

ان المستوى الثاني من الطاقة يتحقق عند ما يأخذ أحد الأعداد الكمية قيمة 2 وهي

$$E_{112} = \frac{\hbar^2}{8m^2}(1+1+4) = 6\frac{h^2}{8ml^2}$$

$$E_{121} = \frac{\hbar^2}{8m^2}(1+4+1) = 6\frac{h^2}{8ml^2}$$

$$E_{211} = \frac{\hbar^2}{8m^2}(4+1+1) = 6\frac{h^2}{8ml^2}$$

نلاحظ ان $E_{211} = E_{121} = E_{112}$ ونعرف هذه الحالة بالانحلالية اي تساوي القيمة الذاتية للطاقة لحالات كمية مختلفة (اي لدوال ذاتية مختلفة) و نظراً لوجود ثلاث حالات كمية لها الطاقة نفسها تسمى هذه الحالة بمستوى الطاقة ثلاثي الانحلال وبالمثل فأن مستوى الطاقة التالي

$$E_{122} = E_{212} = E_{221} = 9\frac{h^2}{8ml^2}$$

هو ثلاثي الأنحلال أيضاً

المستوي التالي يتمثل بدخول العدد الكمي 3 مع بقاء اثنان من الاعداد الكمية الاخرى 1 وهو مستوي ثلاثي الانحلال ايضا

$$E_{311} = E_{131} = E_{113} = 11\,\frac{h^2}{8ml^2}$$

اما المستويE_{222} فهو احادي الأنحلال

$$E_{222} = 12\,\frac{h^2}{8ml^2}$$

س/ احسب عدد انحلالية المستوي (123)وطاقته

ج/ يمكن ايجاد عدد حلات الأنحلالية بأيجاد عدد التبادليات للأعداد(123) وهي

(321) ، (312) ، (231) ، (213) ، (132) ، (123) و نرى ان عددها =6 اي ان هذا المستوي هو سداسي الأنحلالية وطاقته تساوي

$$E_{123} = \frac{h^2}{8ml^2}(1^2 + 2^2 + 3^2) = \frac{14h^2}{8ml^2}$$

جدول (10-1) حالات الطاقة للاعداد الكمية الثلاث الاولى لمسالة جسيم في صندوق مكعب متساوي الاضلاع

حالة الطاقة	كمية الطاقة$[\frac{h^2}{8ml^2}]$	الانحلالية
E_{111}	3	احادي
$E_{112}, E_{211}, E_{121}$	6	ثلاثي
$, E_{212}, E_{221} E_{122}$	9	ثلاثي
$, E_{131}, E_{311} E_{113}$	11	ثلاثي
E_{222}	12	احادي
$, E_{132}, E_{213}, E_{231}, E_{312}, E_{321} E_{123}$	14	سداسي
$, E_{232}, E_{322} E_{223}$	17	ثلاثي
$, E_{332}, E_{323} E_{233}$	22	ثلاثي
E_{333}	27	احادي

س/احسب الطاقة الازمة للأنتقال بين مستويين متجاورين لحالة الجسيم في صندوق ذو بعد واحد

ج/ مستوى الطاقة الأوطأفي بعد واحد يكون

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ml^2}$$

مستوى الطاقة الاعلى في بعد واحد

$$E_{n+1} = \frac{(n+1)^2 h^2}{8ml^2}$$

الطاقة الازمة للأنتقال تمثل فرق الطاقة بين المستويين الأعلى والأدنى

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n$$

$$\Delta E = \frac{(n+1)^2 h^2}{8ml^2} - \frac{n^2 h^2}{8ml^2} = \frac{h^2}{8ml^2}\left[(n+1)^2 - n^2\right]$$

$$\Delta E = \frac{h^2}{8ml^2}\left[n^2 + 2n + 1 - n\right] \Longrightarrow \Delta E = \frac{h^2(2n+1)}{8ml^2}$$

حيث تؤخذ n للمدار الأوطأ دائماً

س/ صندوق احادي البعد طوله 5nm يتحرك فيه جسيم كتلته $1 * 10^{-20} kg$ أحسب الطاقة الازمة لأنتقال هذا الجسيم من المستوي الطاقة الثاني الى الثالث

$$\Delta E = \frac{h^2(2*2+1)}{8ml^2} = \frac{5h^2}{8ml^2}$$

$$\Delta E = \frac{5(6.63*10^{-34})^2}{8*1*10^{-20}*25*10^{-18}} = 1.099 * 10^{-20} J$$

س/ احسب الطول الموجي للفوتون الازم لأنتقال الكترون في صندق احادي البعد طوله 1nm من المستوي n=1 الى n=2

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{h^2(2n+1)}{8ml^2} \Longrightarrow \frac{c}{\lambda} = \frac{h(2n+1)}{8ml^2}$$

$$\frac{1*10^8}{\lambda} = \frac{(2*1+1)*6.63*10^{-34}}{8*9*10^{-31}*1*10^{-18}} \Longrightarrow \lambda = 361 * 10^{-9} m = 361\ nm$$

س/ احسب تردد الفوتون الازم لانتقال الالكترون من مستوى الطاقة الاول الى المستوى الرابع في السؤال السابق

$E_1 = \frac{1^2 * h^2}{8ml^2} = \frac{h^2}{8ml^2}$ (لحساب طاقة الالكترون في المدار الاول)

$E_4 = \frac{4^2 * h^2}{8ml^2} = \frac{16h^2}{8ml^2}$ (لحساب طاقة الالكترون في المدار الرابع)

$$\Delta E_{1\to4} = h\nu = E_4 - E_1 = \frac{h^2}{8ml^2}(16-1)$$

$$h\nu = \frac{15h^2}{8ml^2} \Longrightarrow \nu = \frac{15h}{8ml^2}$$

$$\nu = \frac{15 * 6.63 * 10^{-34}}{8 * 9 * 10^{-31} * 1 * 10^{-18}} = 1.381 * 10^{15} Hz$$

س/ أحسب طاقة المستوي الأرضي لجسيم كتلته $1 * 10^{-30} kg$ موجود في صندوق جهد طول ضلعه 10nm في الحالات التالية a– احادي البعد b– ثنائي البعد c– ثلاثي البعد

$$a)\ E_{nx} = \frac{h^2}{8ml^2}(n_x^2) = \frac{h^2}{8ml^2} * (1^2) = \frac{h^2}{8ml^2} = \frac{(6.63*10^{-34})^2}{8*1*10^{-30}*100*10^{-18}} = 5.495 * 10^{-22} J$$

$$b)\ E_{nx,ny} = \frac{h^2}{8ml^2}(n_x^2 + n_y^2) = \frac{h^2}{8ml^2} * (1^2 + 1^2) = \frac{2h^2}{8ml^2} = 10.99 * 10^{-22} J$$

$$c)\ E_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8ml^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{h^2}{8ml^2} * (1^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{3h^2}{8ml^2} = 1.648 * 10^{-21} J$$

ب- الحالات المتعلقة بالدالة الذاتية

س/ جد الدالة الذاتية للمستوي الأرضي لجسيم في صندوق طول أضلاعه متساوي $l_x = l_y = l_z = l$

ج/يكون المستوي أرضي عندما $n_x = n_y = n_z = 1$

$$\Psi_{(x,y,z)} = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\frac{1*\pi}{l}x) \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\frac{1*\pi}{l}y) \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{1*\pi}{l}z\right)$$

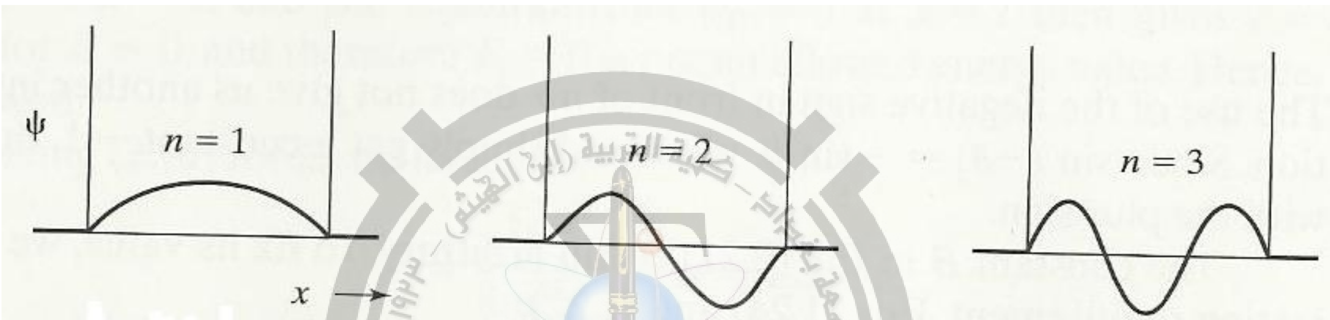
$$\Psi_{(x,y,z)} = (\frac{2}{l})^{3/2} \sin(\frac{\pi x}{l}) \sin(\frac{\pi y}{l}) \sin(\frac{\pi z}{l})$$

س/ جد الدوال الذاتية لجسيم في صندوق ذو بعد واحد للحالات الكمية الثلاث الاولى ثم مثلها بيانياً

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{2}{l}} * \sin\left(\frac{1*\pi}{l}x\right) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{\pi x}{l})$$

$$\Psi_2 = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{2\pi x}{l})$$

$$\Psi_3 = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{3\pi x}{l})$$



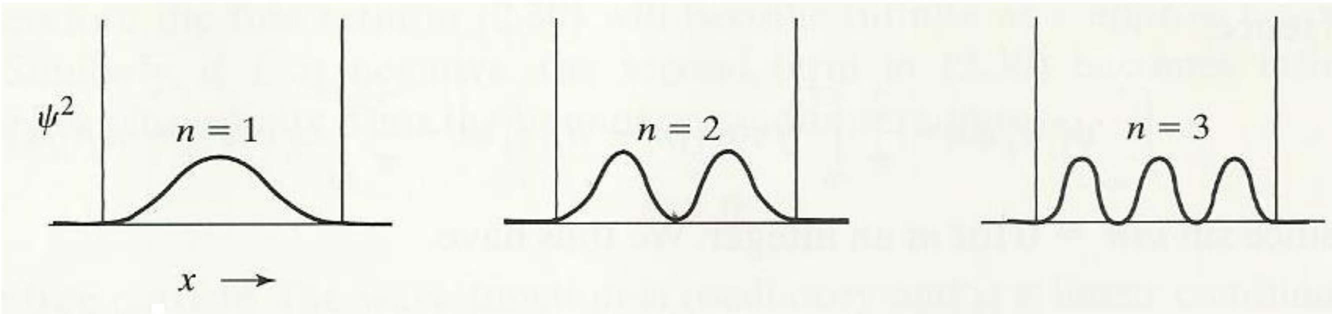
Graphs of ψ for the three lowest-energy particle-in-a-box states.

س/ مثل كثافة الأحتمالية $|\Psi|^2$ للدوال في السؤال السابق بيانيا

$$|\Psi_1|^2 = \frac{2}{l}\sin^2(\frac{\pi x}{l})$$

$$|\Psi_2|^2 = \frac{2}{l}\sin^2(\frac{2\pi x}{l})$$

$$|\Psi_3|^2 = \frac{2}{l}\sin^2(\frac{3\pi x}{l})$$



Graphs of $|\psi|^2$ for the lowest particle-in-a-box states.

بالرغم من ان دالة الموجة في السؤال السابق أخذت قيم سالبة الا اننا نلاحظ ان قيمة كثافة الأحتمالية كانت موجبة دائماً

س/ أحسب أحتمالية أيجاد جسيم في النصف الأول من الصندوق أحادي البعد في مستوى الطاقة الأرضي

$$|\Psi_1^2| = \frac{2}{l}\sin^2(\frac{\pi x}{l})$$

$$P = \int_0^{l/2} |\Psi_1^2| dx$$

$$P = \int_0^{l/2} \frac{2}{l}\sin^2(\frac{\pi x}{l}) dx$$

$$P = \frac{2}{l}\int_0^{\frac{l}{2}} \frac{1}{2}(1 - cos\left(\frac{2\pi x}{l}\right)) dx$$

$$P = \frac{1}{l}\int_0^{\frac{l}{2}} dx - \frac{1}{l}\int_0^{\frac{l}{2}} \frac{1}{2}(cos\left(\frac{2\pi x}{l}\right) dx * \frac{2\pi x}{l} * \frac{l}{2\pi x}$$

$$P = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi x}\int_0^{\frac{l}{2}} (cos\left(\frac{2\pi x}{l}\right) * \frac{2\pi dx}{l}$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi x}(\sin(\frac{2\pi\ l/2}{l}) - 0) = \frac{1}{2} - \frac{0}{2\pi x} = \frac{1}{2} = 50\%$$

أي ان احتمالية أيجاد الجسم في النصف الأول من الصندوق هي 50%

تاثير النفق

في حالة كون الطاقة الكامنة للجسيم اقل من ∞ عند الحواجز و عندما تكون $E < V$ فان دالة الموجة لاتضمحل الى الصفر عند الحواجز مباشرة و انما يكون الاضمحلال اسيا لذلك اذا كان الحجز ذو سمك قليل بحيث يتوقف الاضمحلال الاسي بعد ان يجاوز الجسم الحاجز فان الجسم سوف يعاود الظهور و هنالك احتمالية لوجود الجسيم خارج الصندوق حتى لو كانت طاقة الجسيم الكلية غير كافية لعبور الحاجز بخلاف ما هو متوقع من الميكانيك الكلاسيكي حيث تسمى هذه الظاهرة بتاثير النفق.

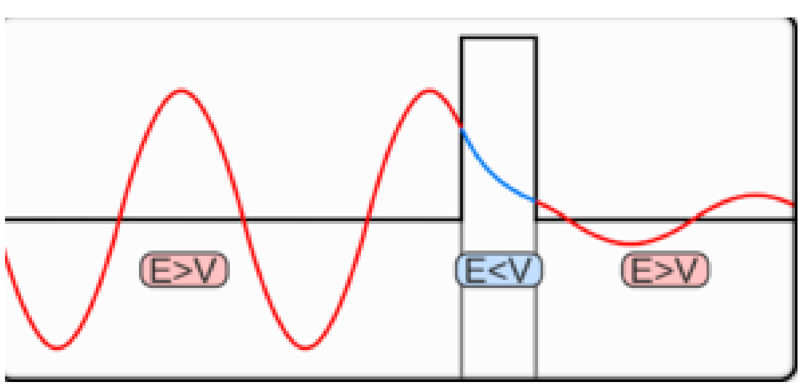
لايجاد احتمالية الانتقال النفقي لجسيم كتلته m يتحرك في بعد واحد سوف تكون معادلة شرودنكر بالشكل

$$\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} - \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\psi_{(x)} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (3-10)$$

و حيث اننا افترضنا ان $E < V$ يكون المقدار $V - E$ كمية موجبة و بالتالي يكون الحل العام لهذا النظام

$$\psi_{(x)} = C_1 e^{\propto x} + C_2 e^{-\propto x} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (4-10)$$

في هذه الحالة تكون $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$ ان هذه المعادلة مشابهة للمعادلة $(9-15)$ في المحاضرة التاسعة و الاختلاف المهم بين المعادلتين هو خلو الاس من العدد التخيلي في هذه المعادلة و هذا يعني ان المعادلة الاسية اعلاه هي معادلة حقيقية لا يمكن ان تتحول الى دالة مثلثية دورية وان هذا السلوك يتمثل على شكل اضمحلال اسي لدالة الموجة في المنطقة $E < V$ و لكن بعد ان يتجاوز الجسيم هذه المنطقة و يصل مرة اخرى للمنطقة $V = 0$ تعود دالة الموجة الى شكلها الجيبي الطبيعي.



احتمالية اجتياز جسيم لحاجز طوله L (لاحظ هنا ان طول الحاجز ليس هو طول الصندوق) يمكن حسابه من المعادلة

$$P = 16\mathcal{E}(1-\mathcal{E})e^{-\frac{2L}{D}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (5-10)$$

حيث ان $\mathcal{E} = \frac{E}{V}$ و $D = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$ حيث نلاحظ تناقص احتمالية اجتياز الجسيم لحاجز بواسطة تاثير النفق بزيادة كتلة الجسيم و بزيادة طول الحاجز لذلك فان تاثير النفق يكون مؤثرا في الالكترونات و اقل تاثيرا للبروتونات اما الجسيمات الاثقل فهو قليل الاهمية .

س/ قارن بين احتمالية نفوذ البروتون من حاجز و نفوذ الديوتريوم من نفس الحاجز حيث ان جهد الحاجز 1 ev و سمكه $1nm$ عندما تكون طاقة كل منهما 0.9ev ($1\text{ev} = 1.602 * 10^{-19}J$) و ان $m_H = 1.673 * 10^{-27}Kg \;\; \& \, m_D = 2m_H$

ج/

$$D_H = \frac{1.055*10^{-34}}{\sqrt{2*1.673*10^{-27}(1-0.9)*1.602*10^{-19}}} = 14.41 * 10^{-12} meter$$

$$D_D = \frac{1.055*10^{-34}}{\sqrt{2*2*1.673*10^{-27}(1-0.9)*1.602*10^{-19}}} = 10.19 * 10^{-12} meter$$

$$\frac{P_H}{P_D} = \frac{16\mathcal{E}(1-\mathcal{E})e^{-\frac{2L}{D_H}}}{16\mathcal{E}(1-\mathcal{E})e^{-\frac{2L}{D_D}}} = e^{\frac{2L}{D_D}-\frac{2L}{D_H}} = e^{200*1*10^{-12}(\frac{1}{10.19*10^{-12}}-\frac{1}{14.41*10^{-12}})}$$

$$\frac{P_H}{P_D} = 313.5$$

ان هذه النتيجة تعني ان احتمالية نفاذ البروتون من هذا الحاجز بواسطة تاثير النفق اكبر بثلاثمئة مرة من احتمالية نفاذ الديوتريوم و الذي هو اثقل بعدد ذري واحد من البرتون.

س/ قارن بين احتمالية نفوذ البروتون من حاجزين حيث ان جهد الحاجز الاول 1 ev و سمكه $1nm$ جهد الحاجز الثاني 1 ev و سمكه $2nm$ عندما تكون طاقته 0.9ev . ج/ $9 * 10^4$

المحاضرة الحادي عشر(المهتز التوافقي)

1- الحل الموجي

تعلمنا اثناء حل نظام جسيم في صندوق كيفية اختزال المعادلة التفاضلية ثلاثية البعد الى معادلة تفاضلية احادية البعد و من ثم تعميم الحل الى ثلاثة ابعاد بعد حل المعادلة التفاضلية ذات البعد الواحد ان هذا التقريب يبقى ساري في مسالة المهتز التوافقي لذلك سوف نبداء بالاشتقاق في بعد واحد مع التذكر اننا بعد ذلك نستطيع توسيع الحل و الانتقال الى مسالة المهتز التواقي في الابعاد الثلاثة

$$\hat{H}\psi(x) = E_x * \psi(x) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (1-11)$$

$$(\hat{T}+\hat{V})\psi(x) = E_x * \psi(x) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (2-11)$$

$$(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2)\psi(x) = E_x * \psi(x) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (3-11)$$

حيث ان k هو ثابت قوة المهتز التوافقي اي ان الحد $\frac{1}{2}kx^2$ يمثل حد الطاقة الكامنة

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E_x * \psi(x) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (4-11)$$

لغرض حل المعادلة التفاضلية اعلاه نتخلص من الثوابت المضروبة في الحد التفاضلي اي نضرب المعادلة $(4-11)$ بالمقدار $\frac{2m}{-\hbar^2}$ ثم نصفر المعادلة

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)-\frac{mk}{\hbar^2}x^2\psi(x)+\frac{2mE_x}{\hbar^2}*\psi(x)=0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (5-11)$$

و باعادة ترتيب المعادلة نحصل على

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\left[\frac{2mE_x}{\hbar^2}-\frac{mk}{\hbar^2}x^2\right]\psi(x)=0 \ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. (6-11)$$

ان المعادلة التفاضلية اعلاه هي معادلة تفاضلية غير خطية معروفة عند المتخصصين بالرياضيات بالصيغة العامة

$$\frac{d^2y}{dx^2}+[\alpha-\beta^2x^2]y=0 \ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. (7-11)$$

و عند مقارنة المعادلتين $(6-11)$ و$(7-11)$ نجد

$$x\rightarrow x, y\rightarrow\psi(x), \alpha\rightarrow\frac{2mE_x}{\hbar^2}, \beta^2\rightarrow\frac{mk}{\hbar^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots... (8-11)$$

لذلك يمكن كتابة المعادلة $(11-6)$ بالصيغة

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+[\alpha-\beta^2x^2]\psi(x)=0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (9-11)$$

حيث تحل هذه المعادلة باستخدام المتسلسلات لتعطي الحل العام

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{2^n*n!}}*(\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}}*H_n(\sqrt{\beta}x)*e^{\frac{-\beta x^2}{2}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (10-11)$$

حيث ان $H_n(\beta x)$ هي متعددة حدود هرميت و تعطى بالمعادلة

$$H_n(\sqrt{\beta}x)=(-1)^n*e^{\beta x^2}*\frac{d^n}{d(\sqrt{\beta}x)^n}\left(e^{-\beta x^2}\right)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (11-11)$$

حيث يعطي الجدول ادناه الحدود الثلاثة الاولى لها

n	$H_n(\sqrt{\beta}x)$
0	1
1	$2\sqrt{\beta}x$
2	$-2+4*(\sqrt{\beta}\,x)^2$
3	$-12(\sqrt{\beta}x)+8*(\sqrt{\beta}\,x)^3$

ان المعادلة $(10-11)$ تعطي الدالة الذاتية او دالة الحالة لنظام المهتز التوافقي حيث انه من الواضح ان الحالات الكمية المختلفة تكون متميزة و مكممة فمثلا دالة الحالة عند المستوي الصفري يمكن الحصول عليها بجعل $n=0$ في هذه المعادلة مع تذكر ان $2^0=1\ and\ 0!=1$ وتؤخذ قيمة $H_0(\sqrt{\beta}\,x)$ من الجدول فنحصل على

$$\psi_0(x)=\sqrt{\frac{1}{2^0*0!}}*(\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}}*H_0\left(\sqrt{\beta}x\right)*e^{\frac{-\beta x^2}{2}}$$

$$=\psi_0(x)=\sqrt{\frac{1}{1*1}}*(\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}}*1*e^{\frac{-\beta x^2}{2}}=(\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}}*e^{\frac{-\beta x^2}{2}}$$

مثال/ جد الدالة الذاتية للمستوي الثاني في نظام المهتز التوافقي

$$\psi_2(x)=\sqrt{\frac{1}{2^2*2!}}*(\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}}*H_2(\sqrt{\beta}x)*e^{\frac{-\beta x^2}{2}}$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{1}{4*2}} * (\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}} * [-2 + 4 * \left(\sqrt{\beta}x\right)^2] * e^{\frac{-\beta x^2}{2}}$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{1}{8}} * (\frac{\beta}{\pi})^{\frac{1}{4}} * [-2 + 4 * \beta x^2] * e^{\frac{-\beta x^2}{2}}$$

اما معادلة القيمة الذاتية لنظام المهتز التوافقي (طاقته الكلية) فتعطى بالمعادلة

$$E_{nx} = \left(n + \frac{1}{2}\hbar\omega\right) = E_{nx} = \left(n + \frac{1}{2}hv\right) \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (12-11)$$

حيث تبين الاشكال $(11-1)$ و$(11-2)$ اشكال دالة الموجة و مربعها المطلق للاعداد الكمية الاربعة الاولى

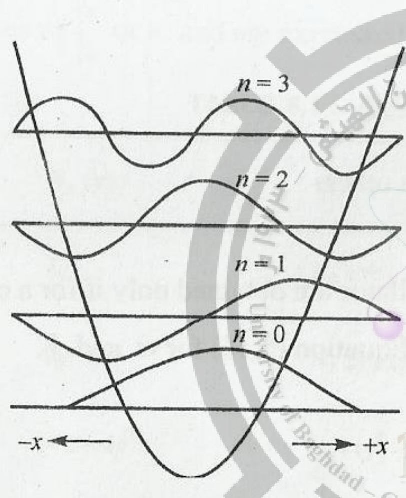


Figure (1-11)

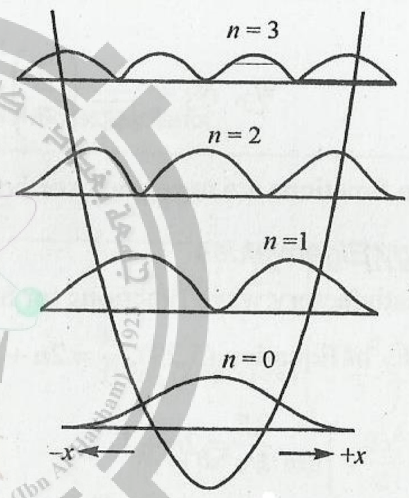


Figure (2-11)

2- الحل المصفوفي

نبدا بكتابة المؤثر الهاملتوني لنظام المهتز التوافقي

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (13-11)$$

ثم نحول المؤثر الهاملتوني و باقي المؤثرات الى مؤثرات مجردة من خلال استخراج الثوابت الفيزيائية الداخلة في بنية هذه المؤثرات و التي تعطي مجتمعة نفس و حدة المؤثر فيكون لدينا

$$\hat{H} = \hbar\omega * \hat{\mathcal{H}} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (14-11)$$

$$\hat{P}_x = \sqrt{m\hbar\omega} * \hat{\mathcal{P}}_x \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (15-11)$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} * \hat{\mathcal{X}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (16-11)$$

علما ان

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \ or \ k = m\omega^2 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. (17-11)$$

اذا نظرنا الى المؤثرات اعلاه نجدها مكونة من جزئين جزء يعطي المعنى الفيزيائي للمؤثر و يتمثل بالثوابت و الجزء الاخر خالي من الوحدات و لكنه يعطي البنية الرياضية للمؤثر

نعوض المعادلات من $(11-14)$ الى $(11-17)$ في المادلة $(11-13)$

$$\hbar\omega * \hat{\mathcal{H}} = \frac{m\hbar\omega}{2m}\hat{\mathcal{P}}_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\hat{\mathcal{X}}^2 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (18-11)$$

و بعد اختصار الثوابت الموجودة في المعادلة اعلاه نحصل على

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}\hat{\mathcal{P}}_x^2 + \frac{1}{2}\hat{\mathcal{X}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{P}}_x^2 + \hat{\mathcal{X}}^2) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (18-11)$$

و كما تعلمنا سابقا

$$[\hat{P}_x, \hat{x}] = -i\hbar \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. (19-11)$$

$$\hat{P}_x\,\hat{x} - \hat{x}\,\hat{P}_x = -i\hbar \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots (20-11)$$

و الان نحول مؤثرات الزخم و الموقع الى المؤثرات المجردة المقابلة لها

$$\sqrt{m\hbar\omega} * \hat{\mathcal{P}}_x \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} * \hat{\mathcal{X}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} * \hat{\mathcal{X}}\sqrt{m\hbar\omega} * \hat{\mathcal{P}}_x = -i\hbar \ldots. (21-11)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_x\,\hat{\mathcal{X}} - \hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x = -i \Leftrightarrow [\hat{\mathcal{P}}_x, \hat{\mathcal{X}}] = -i \Leftrightarrow [\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}_x] = i. \ldots\ldots (22-11)$$

ان العلاقة $(11-18)$ هي علاقة مجموع مربعين يمكن تحويلها الى علاقة فرق بين مربعين من خلال ابدال علامة الجمع بالكمية $-i^2$ لكن يجب التذكر ان الكميات $\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}_x$ هي مؤثرات وليست كميات رياضية عادية لذلك يجب الانتباه عند استبدال عملية الجمع بعملية طرح ان الناتج يمكن ان لا يكون نفسه في الحالتين

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{P}}_x^2 + \hat{\mathcal{X}}^2) = \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}_x^2) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (23-11)$$

$$\frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{P}}_x^2 - i^2\hat{\mathcal{X}}^2\right) \overset{?}{\Leftrightarrow} \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{X}}^2 - i^2\hat{\mathcal{P}}_x^2\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (24-11)$$

ناخذ القوس الاخير في المعادلة اعلاه و نجزئه الى قوسي القرق بين مربعين مع تجزئة المعامل $\frac{1}{2}$ بالتساوي بين القوسين

$$\frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{X}}^2 - i^2\hat{\mathcal{P}}_x^2\right) \Longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}_x\right) * \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}_x\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (25-11)$$

ان الاقواس اعلاه هي عبارة عن مؤثرات غير هرميتية و لكن احدها هو المرافق الحرميتي للاخر فاذا رمزنا للقوس الاول بالرمز a يكون الاخر $a^\dagger$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}_x\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (26-11)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}_x\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (27-11)$$

و الان لمعرفة تاثير ترتيب المؤثرات $a, a^\dagger$ نجري العمليتن التالية

$$aa^\dagger = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{X}}^2 - i\hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x + i\hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{X}} + \hat{\mathcal{P}}_x^2\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (28-11)$$

$$a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{X}}^2 + i\hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x - i\hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{X}} + \hat{\mathcal{P}}_x^2\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (29-11)$$

نلاحظ ان المتوسط الحسابي للمعادلات اعلاه يعطينا المؤثر الهاملتوني المحرد الذي بدانا منه

$$\frac{\boldsymbol{aa^\dagger + a^\dagger a}}{\boldsymbol{2}} = \frac{\frac{2}{2}\left(\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}_x^2\right)}{\boldsymbol{2}} = \hat{\mathcal{H}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (30-11)$$

اما من الفرق بينهما (تبادليتهما) فنحصل على

$$aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2}\left(-2i\hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x + 2i\hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{X}}\right) = -i\left(\hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x - \hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{X}}\right) .. (31-11)$$

$$aa^\dagger - a^\dagger a = -i * \left[\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}_x\right] = -i * i = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (32-11)$$

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \ or \ [a, a^\dagger] = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (33-11)$$

$$\therefore aa^\dagger = a^\dagger a + 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (34-11)$$

و الان نعوض المعادلة $(34-11)$ بالمعادلة $(30-11)$ لنحصل على

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}\left(a^\dagger a + a^\dagger a + 1\right) = \frac{1}{2}\left(2a^\dagger a + 1\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (35-11)$$

$$\therefore \hat{\mathcal{H}} = \left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (36-11)$$

و الان نعرف مؤثر العدد $\widehat{N}$ و الذي يمثل $a^{\dagger}a$

$$\hat{\mathcal{H}} = \left(\widehat{N} + \frac{1}{2}\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (37-11)$$

بالرجوع للمعادلة (11-14) يمكن الحصول على المؤثر الهاملتوني الاعتيادي من المؤثر المجرد

$$\widehat{H} = \hbar\omega * \hat{\mathcal{H}} = \left(\widehat{N} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (38-11)$$

و هنا يمكننا الحصول على القيمة الذاتية للطاقة الكلية للمهتز التوافقي من خلال التاثير بالمؤثر اعلاه على دالة الحالة ذات الرتبة n و التي تكتب حسب تمثيل ديراك $|n>$

$$\widehat{H}\,|n>= \hbar\omega * \hat{\mathcal{H}}\,|n>= \left(\widehat{N} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots (39-11)$$

و حيث ان المؤثر $\widehat{N}$ يعطي رقم الحالة الكمي فيكون

$$\widehat{H}|n> = E_n|n>= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n> \cdots \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (40-11)$$

و بذلك تكون القيمة الذاتية للطاقة الكلية لنظام المهتز التزافقي

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (41-11)$$

لمعرفة تاثير المؤثرات $a\,, a^{\dagger}$ على دالة الموجة الناتجة $|n>$ سنحاول معرفة رتبة دالة الموجة الناتجة من هذه المؤثرات باستخدام مؤثر العدد

$$\widehat{N}a|n>= a^{\dagger}aa|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (42-11)$$ من تعريف مؤثر العدد

$$\widehat{N}a|n>= (aa^{\dagger}-1)a|n> \ \ldots\ldots (43-11)$$ من تبادلية المؤثرات المترافقة هرميتيا

$$\widehat{N}a|n>= (aa^{\dagger}a - a)|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (44-11)$$

$$\widehat{N}a|n>= a(a^{\dagger}a - 1)|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (45-11)$$

$$\widehat{N}a|n>= a(\widehat{N} - 1)|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (46-11)$$

$$\widehat{N}a|n>= (n-1)a|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (47-11)$$

ان النتيجة اعلاه تبين ان رتبة الدالة $a|n>$ اقل من رتبة الدالة الاصلية $|n>$ بمقدار واحد اي ان المؤثر a عمل على تقليل رتبة الدالة $|n>$ و تحويلها الى الدالة $|n-1>$ ويمكن كتابة هذه العملية

$$a|n> = C_n\, |n-1> \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (48-11)$$

اذا كررنا العمليات السابقة للمؤثر $a^\dagger$ ايضا

$$\hat{N}a^\dagger|n> = a^\dagger a a^\dagger|n> \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (49-11)$$ من تعريف مؤثر العدد

$$\hat{N}a^\dagger|n> = a^\dagger(\, a^\dagger a + 1)|n> \quad \ldots. (50-11)$$ من تبادلية المؤثرات المترافقة هرميتيا

$$\hat{N}a^\dagger|n> = a^\dagger(\hat{N} + 1)|n> \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (51-11)$$

$$\hat{N}a^\dagger|n> = (\, n+1)a^\dagger|n> \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (52-11)$$

ان النتيجة اعلاه تبين ان رتبة الدالة $a^\dagger|n>$ اكبر من رتبة الدالة الاصلية $|n>$ بمقدار واحد اي ان المؤثر $a^\dagger$ عمل على زيادة رتبة الدالة $|n>$ و تحويلها الى الدالة $|n+1>$ و تكتب هذه العملية

$$a^\dagger|n> = C_n^\dagger\, |n+1> \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (53-11)$$

لهذا السبب تسمى المؤثرات $a\,, a^\dagger$ بمؤثرات الخفض و الرفع او مؤثرات الفناء و التخليق، ان المعادلات $(11-48)$ و $(11-53)$ و الان يمكن الوصول الى الحالة الارضية لنظام المهتز التوافقي (اي اقل قيمة ممكنة ياخذها العدد الكمي n) من حقيقة ان التاثير بمؤثر الخفض على دالة الحالة الارضية سيكون صفر

$$a|n_{min}> = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (54-11)$$

ثم نؤثر بمؤثر الرفع على المعادلة اعلاه

$$a^\dagger a|n_{min}> = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (55-11)$$

$$\hat{N}|n_{min}> = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (56-11)$$

نضرب طرفي المعادلة بالدالة المرافقة $<n_{min}|$

$$\langle n_{min}|\hat{N}|n_{min}\rangle = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (57-11)$$

$$n_{min} * \langle n_{min}|n_{min}\rangle = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (58-11)$$

ولان دالة الموجة معايرة لذلك يكون التكامل $\langle n_{min}|n_{min}\rangle = 1$ و بذلك يكون

$$n_{min} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ (59-11)$$

و هنا نستطيع انشاء المصفوفة الكاملة للمؤثر الهرميتي من خلال العودة الى المعادلة

$$\widehat{H}|n> = E_n|n> = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (40-11)$$

و ضربها بالدالة $<n|$

$$\langle n|\widehat{H}|n\rangle = \ \hbar\omega\left\langle n\left|\left(n+\frac{1}{2}\right)\right|n\right\rangle \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (60-11)$$

$$\langle n|\widehat{H}|n\rangle = \hbar\omega\begin{bmatrix}1/2 & 0 & 0\\ 0 & 3/2 & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots\end{bmatrix}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ (61-11)$$

يتبقى ان نعرف الشكل المصفوفي للمؤثرات $a, a^{\dagger}$ من خلال استعمال مؤثر العدد على دالة الموجة $|n>$

$$\widehat{N}|n> = n*|n> \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ (62-11)$$

كذلك نضرب طرفي المعادلة بالدالة $|n>$

$$\langle n|\widehat{N}|n\rangle = \langle n|n|n\rangle \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ (63-11)$$

و حيث ان $\widehat{N} = a^{\dagger}a$

$$\langle n|a^{\dagger}a|n\rangle = \langle n|n|n\rangle \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ (64-11)$$

من معرفة ان المؤثر a يعمل على تحويل الدالة $|n>$ الى الدالة $|n-1>$ لذلك سوف نستعمل العلاقة الواحدية للدالة $|n-1>$ و التي تنص

$$|n-1><n-1| = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ (65-11)$$

$$\langle n|a^{\dagger}*1*a|n\rangle = \langle n|n|n\rangle \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ (66-11)$$

$$\langle n|a^{\dagger}|n-1\rangle\langle n-1|a|n\rangle = n*\langle n|n\rangle = n \ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots\ldots\ (67-11)$$

$$a^{\dagger}_{(n,n-1)} * a_{(n-1,n)} = n \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ (68-11)$$

و بما ان المؤثرين $a^\dagger , a$ احدهما مرافق هرميتي للاخر لذلك فان حاصل ضربهما يعطي المربع المطلق لاي منهما

$$\left|a^\dagger_{(n,n-1)}\right|^2 = \left|a_{(n-1,n)}\right|^2 = n \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (69-11)$$

لذلك

$$a_{(n-1,n)} = \sqrt{n} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (70-11)$$

$$a^\dagger_{(n,n-1)} = \sqrt{n} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots\ldots. (71-11)$$

اي ان المصفوفات المقابلة لها تكون

$$a_{(n-1,n)} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (72-11)$$

$$a^\dagger_{(n,n-1)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. (73-11)$$

المحاضرة 12 ذرة الهيدروجين

يعتبر نظام ذرة الهيدروجين ابسط نظام ذري اذ تتكون ذرة الهيدروجين من بروتون واحد والكترون واحد و بسبب كون كتلة البروتون اكبر بكثير من كتلة الالكترون فيمكننا كتقريب اولي اعتبار ان مركز ثقل النظام هو نواة ذرة الهيدروجين و بذلك تكون الحركة الدورانية للالكترون حول النواة هي التي تساهم بالجزء الاكبر من طاقة ذرة الهيدروجين ومن جهة اخرى فان نمط الحركة هذا يحمل المفاهيم الاساسية لتكميم نظام الدوار الصلد و بذلك يكون المؤثر الهاملتوني الذي يصف الطاقة الكلية لذرة الهيدروجين مكون من مؤثر طاقة حركية لالكترون يتحرك حركة دورانية حول نواة تمثل مركز ثقل النظام اما مؤثر الطاقة الكامنة فيمثل طاقة التجاذب الكهربائي بين الالكترون و النواة.

$$\hat{H}\Psi(x,y,z) = E * \Psi(x,y,z) \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots. (1-12)$$

$$\left(\hat{T}+\hat{V}\right)\Psi(x,y,z) = E * \Psi(x,y,z) \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots.. (2-12)$$

و بما ان حركة الالكترون حول النواة حركة دائرية في ثلاثة ابعاد لذلك تكون مؤثرات $\hat{T},\hat{V}$ معتمدة على ثلاثة ابعاد لذلك يحسب حد الطاقة الكامنة من حاصل ضرب شحنتي الالكترون و النواة مقسوما على المسافة بينهما التي تكون حسب قانون البعد بين نقطتين $\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ على فرض ان البروتون يقع في نقطة الاصل.

اما المؤثر التفاضلي الموجود في حد الطاقة الحركية فيعطى بالمعادلة

$$\nabla^2_{(x,y,z)} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots. (3-12)$$

اي ان معادلة القيمة الذاتية للمؤثر الهملتوني تاخذ الشكل ادناه في الفضاء الثلاثي البعد لنظام ذرة الهيدروجين

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2_{(x,y,z)} + \frac{-e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right)\Psi(x,y,z) = E * \Psi(x,y,z) \dots\dots\dots. (4-12)$$

او

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right)\Psi(x,y,z) = E * \Psi(x,y,z). (4-12)$$

لحل المعادلة السابقة يتوجب فصل المتغيرات (x,y,z) كل منها في حد لا يتضمن المتغيرات الباقية من خلال استعمال عمليات الضرب و القسمة و الجمع و الطرح و لكن لايمكن فصل متغيرات هذه المعادلة مهما حاولنا بالطرق الاعتيادية لذلك سنقوم بتحويل النظام الاحداثي لهذه المعادلة معتمدين على نظام احداثي يحقق شروط تماثل نمط الحركة لهذا النظام و بما ان نمط حركة

الالكترون حول النواة ذو شكل كروي لذلك سوف نحول النظام الديكارتي المستعمل للتعبير عن هذه المعادلة الى النظام الكروي للاحداثيات من خلال

$$\nabla^2_{(x,y,z)} \rightarrow \nabla^2_{(r,\theta,\phi)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(5-12)$$

$$\sqrt{x^2+y^2+z^2} \rightarrow r \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(6-12)$$

$$\Psi(x,y,z) \rightarrow \Psi(r,\theta,\phi) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(7-12)$$

س/ اذا علمت ان

$$x = r.sin\theta.cos\phi \, , y = r.sin\theta.sin\phi \,\&\, z = r.cos\theta$$

اثبت ان

$$\sqrt{x^2+y^2+z^2} = r$$

و الان تتحول المعادلة $(4-12)$ الى الشكل الكروي

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)-\frac{e^2}{r}\right)\Psi(r,\theta,\phi) = E*\Psi(r,\theta,\phi)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(8-12)$$

و الان نجعل الحد التفاضلي خالي من المعاملات و ذلك بضرب المعادلة اعلاه بالمقدار $\frac{-2m_e}{\hbar^2}$ ثم نصفر المعادلة المتبقية

$$\left(\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)+\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{e^2}{r}\right)\Psi(r,\theta,\phi) = \frac{-2m_e}{\hbar^2}E*\Psi(r,\theta,\phi)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(9-12)$$

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\Psi(r,\theta,\phi) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)\Psi(r,\theta,\phi) = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(10-12)$$

لغرض تجزئة المتغيرات الموجودة في المعادلة $(12-10)$ نفرض ان دالة الموجة المعتمدة على ثلاث متغيرات $\Psi(r,\theta,\phi)$ مكونة من حاصل ضرب ثلاث دوال موجة كل منها معتمد على متغير و احد فقط

$$\Psi(r,\theta,\phi)=R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(11-12)$$

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)=0\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(12-12)$$

و عند فتح الاقواس في هذه المعادلة فان الدوال التي تتضمن متغير الحد التفاضلي هي التي تبقى داخله و تخرج الدوال الاخرى بدون تاثر بالحد التفاضلي

$$\left(\frac{\Theta(\theta).\Phi(\phi)}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{R(r).\Phi(\phi)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{R(r).\Theta(\theta)}{r^2sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}\right)+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)=0\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(13-12)$$

نحاول ان نجعل الحد الاول ذو المقدار التفاضلي المعتمد على r يحتوي على الدالة R فقط كذلك الحدود التفاضلية الثاني و الثالث و ذلك بقسمة المعادلة $(13-12)$ على $R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)$ فتحذف الحدود المضروبة و تتبقى الحدود التفاضلية

$$\frac{1}{R}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{\Theta}\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{1}{r^2sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)=0\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(14-12)$$

ان المعادلة الناتجة الان انفصلت فيها الدوال الاساسية عن بعضها و بذلك يمكن اجراء عمليات التكامل لحلها و الحد الابسط فيها هو الحد الثالث (حد Φ) و لكنه لا يزال يحتوي على المتغيرات (r,θ) و التي لا تنتمي الى الدالة Φ لذلك نضرب المعادلة $(14-12)$ بالمقدار $r^2sin^2\theta$

$$\frac{sin^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2sin^2\theta=0\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(15-12)$$

ان الحد الثالث في هذه المعادلة حد خاص بالدالة Φ يحتوي على المتغير ϕ فقط لغرض اجراء عملية التكامل على هذا الحد نفترض ان باقي اجزاء المعادلة ثابتة بالنسبة الى هذا الحد كذلك يمكن تحويل تفاضله الجزئي الى تفاضل تام لان دالته معتمدة على متغيرها فقط

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = constant = m^2 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (16-12)$$

ان اختيار الحرف m للتعبير عن الثابت في المعادلة الاخيرة يعود الى ان القيمة الذاتية الناتجة عن حلها تكون متعلقة بعدد الكم المغناطيسي لذلك فان اختيارهذا الحرف في هذه المعادلة هو اجراء معتمد عند حل معادلة شرودنكر لذرة الهيدروجين.

عند تعويض المعادلة $(16-12)$ في المعادلة $(15-12)$ نحصل على

$$\frac{sin^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+m^2+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2sin^2\theta = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (17-12)$$

و التي تحتوي على المتغيرين (r,θ) مع حدودها التفاضلية و لكننا نجد ان المقادير المتغيرة ما تزال ممتزجة مع بعضها حيث ان الحد الاول الخاص بالمتغير r يحتوي على الدالة $sin^2\theta$ لذلك نقسم المعادلة $(17-12)$ على هذه الدالة

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{\Theta}\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{m^2}{sin^2\theta}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2 = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (18-12)$$

نلاحظ ان الحدين الاول و الرابع في المعادلة اعلاه خاصة بالمتغير r مع دالته و حده التفاضلي اما الحدين الثاني و الثالث فهي خاصة للمتغير θ مع دالته و حده التفاضلي لذلك من الملائم ترتيب المعادلة بالشكل

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2+\frac{1}{\Theta}\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{m^2}{sin^2\theta} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (19-12)$$

و لاجل فصل المتغيرين لغرض التكامل نثبت احدهما و ليكن المتغير r اي ان كل حدود هذا المتغير ذات قيمة ثابتة و لتكن β

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2 = \beta \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (20-12)$$

حيث نلاحظ ان التفاضل الجزئي تحول الى تفاضل تام لان الدالة R معتمدة على المتغير r فقط وهو المتغير الوحيد الموجود في المعادلة. عند تعويض المعادلة $(20-12)$ في معادلة $(19-12)$ نحصل على

$$\beta+\frac{1}{\Theta}\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{m^2}{sin^2\theta} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots . (21-12)$$

$$or \quad \frac{1}{\Theta}\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{m^2}{sin^2\theta}=-\beta \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(22-12)$$

تمثل المعادلات $(12-16)$ و$(12-20)$ و$(12-22)$ ثلاث معادلات تفاضلية من الدرجة الثانية كل منها بمتغير واحد فقط و كما ذكرنا سابقا فان المعادلة الابسط بينها و التي يمكن حلها بالتكامل المباشر هي معادلة Φ حيث يكون حلها

$$\Phi_{\mathrm{m}}(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(23-12)$$

حيث تاخذ قيم m الاعداد $0,\pm1,\pm2,\pm3 \ldots \ldots..,\pm\infty$ ويسمى بعدد الكم المغناطيسي لذرة الهيدروجين.

المعادلة $(12-22)$ معادلة تفاضلية غير خطية تحل بطريقة المتسلسلات من خلال تحويلها الى الشكل القياسي

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{m^2}{sin^2\theta}\Theta+l(l+1)\Theta=0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(24-12)$$

حيث ان $\beta=l(l+1)$ وان l ياخذ القيم $l=0,1,2,3 \ldots,\infty$ مع شرط ان $|m|\le l$ ويكون الحل العام للمعادلة اعلاه هو

$$\Theta_l^{|m|}(\theta)=N_l^{|m|}*P_l^{|m|}(cos\theta) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(25-12)$$

$N_l^{|m|}$ هو ثابت معايرة الدالة وهو يعتمد على الاعداد الكمية $l,|m|$ و يعطى بالمعادلة

$$N_l^{|m|}=\sqrt{\frac{(2l+1)}{2}*\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(26-12)$$

اما $P_l^{|m|}(cos\theta)$ فتسمى متعددة حدود ليجندر عندما تاخذ $|m|=0$ و تسمى متعددة حدود ليجندر المرافقة عندما تكون قيمة $|m|$ غيرها من الاعداد و تعطى بالمعادلة

$$P_l^{|m|}(cos\theta)=\frac{1}{2^l*l!}*(sin\theta)^{|m|}*\frac{d^{(l+|m|)}}{d(cos\theta)^{(l+|m|)}}(cos^2\theta-1)^l \ldots(27-12)$$

و لتسهيل التعامل مع الدالة المذكورة نقوم بتعويض $u=cos\theta$ فتاخذ المعادلة $(27-12)$ الشكل

$$P_l^{|m|}(u)=\frac{1}{2^l*l!}*(1-u^2)^{|m|/2}*\frac{d^{(l+|m|)}}{d(u)^{(l+|m|)}}(u^2-1)^l \ldots(28-12)$$

وبعد الحل نعيد $u=cos\theta$ اي بدلالة θ

مثال / اوجد قيمة الدالة $\Theta_l^{|m|}(\theta)$ عندما تكون $l=2,m=-1$

$$\Theta_2^{|-1|}(\theta)=N_2^{|-1|}*P_2^{|-1|}(cos\theta)=\Theta_2^1(\theta)=N_2^1*P_2^1(cos\theta)$$

$$N_2^1=\sqrt{\frac{(2*2+1)}{2}*\frac{(2-1)!}{(2+1)!}}=\sqrt{\frac{5}{2}*\frac{(1)!}{(3)!}}=\sqrt{\frac{5}{2}*\frac{1}{6}}=\sqrt{\frac{5}{12}}$$

$$P_2^1(u)=\frac{1}{2^2*2!}*(1-u^2)^{1/2}*\frac{d^{(3)}}{d(u)^{(3)}}(u^2-1)^2$$

$$P_2^1(u)=\frac{1}{8}*(1-u^2)^{\frac{1}{2}}*\frac{d^{(3)}}{d(u)^{(3)}}(u^4-2u^2+1)$$

$$P_2^1(u)=\frac{1}{8}*(1-u^2)^{\frac{1}{2}}*24u\Longrightarrow P_2^1(cos\theta)=\frac{1}{8}*sin\theta*24cos\theta$$
$$=3sin\theta*cos\theta$$

$$\therefore\ \Theta_2^1(\theta)=N_2^1*P_2^1(cos\theta)\rightarrow\sqrt{\frac{5}{12}}*3sin\theta*cos\theta$$

و الجدول ادناه يبين قيم $N_l^{|m|}\&P_l^{|m|}(cos\theta)$ لبعض قيم الاعداد الكمية l,m

الان تم اكمال حل معادلتي $\Theta(\theta)\&\ \Phi(\phi)$ و هي الدوال التي تعطي الاعتماد الزاوي في حل مسالة ذرة الهيدروجين لذلك فان حاصل ضرب هاتين الدالتين يعطي الدالة الزاوية الكلية لهذا النظام اي ان

$$Y_l^{|m|}(\theta,\phi)=\Theta_l^{|m|}(\theta).\Phi_{\mathrm{m}}(\phi)=N_l^{|m|}*P_l^{|m|}(cos\theta)*\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}.(29-12)$$

ان هذه المعادلة تمثل الحل لاي نظام يتحرك حركة دائري يكون فيها نصف قطر الدوران مقدار ثابت اي انها تمثل الدالة الذاتية لمسالة الدوار الصلد ايضا و لحساب القيمة الذاتية للطاقة لمسالة الدوار الصلد نذهب الى المعادلة

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2=\beta \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (20-12)$$

بسبب وجود حد القيمة الذاتية للطاقة فيها. في هذه المعادلة بالنسبة للدوار الصلد يكون الحد الاول التفاضلي يساوي صفر بسبب ثبوت نصف القطر و حد الجهد يساوي صفر لسببين الاول ان الجهد بين نقطتين البعد بينهما ثابت مقدار ثابت يمكن اهماله و الثاني ان حالة التجاذب الحاصلة هي لحالة البروتون و الالكترون في ذرة الهيدروجين و عند التعويض يجب التذكر ان $\beta = l(l+1)$ لذلك تصبح المعادلة

$$0+\frac{2mr^2}{\hbar^2}(0+E)=l(l+1) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (30-12)$$

ان المقدار mr^2 يمثل عزم القصور الذاتي للدوار الصلد بسبب ثبوت نصف القطر ويرمز له I وبعد ترتيب المعادلة

$$E_l=l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (31-12)$$

و التي تمثل معادلة القيمة الذاتية للطاقة لمسالة الدوار الصلد

مثال/ احسب الطاقة اللازمة لانتقال جزيئة خطية نصف قطرها $0.5nm$ و كتلتها $1*10^{-30}Kg$ من حالتها الدورانية الارضية الى حالتها الدورانية الثانية

$$E_0=0(0+1)\frac{\hbar^2}{2I}=0$$

$$E_2=2(2+1)\frac{\hbar^2}{2I}=E_l=6\frac{\hbar^2}{2I}$$

$$\Delta E=E_2-E_0=3\frac{\hbar^2}{I}=3*\frac{(6.63*10^{-34})^2\big/(2*3.14)^2}{1*10^{-30}*(0.5*10^{-9})^2}=4.46*10^{-20}J$$

الجدول $(12-1)$ يبين حلول متعددة حدود ليجيندر المرافقة و الاعتيادية مع ثابت المعايرة لها

$\lvert m \rvert$	l	$N_l^{\lvert m \rvert}$	$P_l^{\lvert m \rvert}(cos\theta)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	1
0	1	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$cos\theta$
0	2	$\sqrt{\frac{5}{2}}$	$\frac{1}{2}(3cos^2\theta-1)$
0	3	$\sqrt{\frac{7}{2}}$	$\frac{3}{2}(\frac{5}{3}cos^3\theta-cos\theta)$
1	1	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$sin\theta$
1	2	$\sqrt{\frac{5}{12}}$	$3sin\theta.cos\theta$
1	3	$\sqrt{\frac{7}{24}}$	$\frac{3}{2}sin\theta.(5cos^2\theta-1)$
2	2	$\sqrt{\frac{5}{48}}$	$3sin^2\theta$
2	3	$\sqrt{\frac{7}{240}}$	$15sin^2\theta.cos\theta$

الدالة المتبقية الان هي الدالة النصف قطرية لذرة الهيدروجين و التي يمكن كتابتها بالشكل

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+E\right)r^2-l(l+1)=0\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(31-12)$$

و التي يكون الحل العام لها بالشكل

$$R_{n,l}(\rho)=N_{n,l}*\rho^l*L_{n+l}^{2l+1}(\rho)*e^{-\rho/2}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(32-12)$$

حيث ان $\rho=\frac{2r}{na_0}$ و يكون a_0 هو المدار الاوطاء رتبة في ذرة الهيدروجين و يعرف بنصف قطر بور و يساوي $a_0=\frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ و يمكن الحصول عليه من نضرية بور من خلال حساب قيمة r عندما تكون قيمة $n=1$. $N_{n,l}$ هو ثابت التناسق للاعداد الكمية n,l يحسب من المعادلة

$$N_{n,l}=-\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3*\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots\ldots(32-12)$$

$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ تعرف بانها متعددة حدود لاوكري عندما يكون فيها $l=0$ و متعددة حدود لاوكري المرافقة عند القيم الاخرى لعدد الكم الاوربتالي و تعطى بالمعادلة

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)=\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(2l+1)}\left[e^{\rho}.\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(n+l)}\left(\rho^{(n+l)}e^{-\rho}\right)\right]\ldots\ldots.(33-12)$$

مثال/ اوجد $R_{1,0}(\rho)$

$$N_{1,0}=-\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3*\frac{(1-0-1)!}{2*1[(1+0)!]^3}}=-\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3*\frac{1}{2}}$$

$$L_{1+0}^{0+1}(\rho)=\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(0+1)}\left[e^{\rho}.\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(1+0)}\left(\rho^{(1+0)}e^{-\rho}\right)\right]=\frac{d}{d\rho}\left[e^{\rho}.\frac{d}{d\rho}(\rho.e^{-\rho})\right]$$

$$L_1^1(\rho)=\frac{d}{d\rho}[e^{\rho}.(-\rho.e^{-\rho}+e^{-\rho})]=\frac{d}{d\rho}[-\rho+1]=-1$$

$$\therefore R_{1,0}(\rho)=-\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3*\frac{1}{2}}*\rho^0*-1*e^{-\rho/2}=\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3*\frac{1}{2}}*e^{-\rho/2}$$

ويمكن الحصول على الدالة $R_{1,0}$ بدلالة r اي $R_{1,0}(r)$ بتعويض قيمة ρ

$$R_{1,0}(r) = \sqrt{\left(\frac{2r/a_0}{r}\right)^3 * \frac{1}{2}} * e^{r/a_0} = 2 * \sqrt{\frac{1}{a_0^3}} * e^{r/a_0}$$

س/ اوجد $R_{2,0}(r)$ و $R_{2,1}(r)$

نلاحظ في حل الدالة القطرية ان الدالة $R_{n,l}(r)$ تكون معتمدة على الاعداد الكمية n,l و ان القيم التي تاخذها هذه الاعداد يجب ان تحقق الشرط $n > l$ و بما ان مجال الاعداد المسموح الى l ان ياخذها هي ∞ .... 0,1,2 لذلك فان القيم الممكن ان ياخذها العدد الكمي n تكون $1,2,\ldots\infty$ لذلك فان اوطاء حالة ياخذها العدد الكمي الاساسي n هي 1 .

كذلك من حل الدالة القطرية نحصل على معادلة تكميم الطاقة الكلية لذرة الهيدروجين

$$E_n = \frac{m_e e^4}{n^2 \hbar^2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (34-12)$$

ان هذه المعادلة هي المعادلة نفسها التي حصل عليها بور من نموذجه لذرة الهيدروجين

الان يمكننا الحصول على دالة الموجة الكلية لذرة الهيدروجين من اعادة ضرب المعادلات المحلولة ذات المتغير الواحد

$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r).\Theta_l^{|m|}(\theta).\Phi_{\mathrm{m}}(\phi) = R_{n,l}(r).Y_l^{|m|}(\theta,\phi) \ldots (35-12)$$

مثال/ اكتب دالة الموجة الكلية لذرة الهيدروجين في المدار $2p$ عند ادنى مستوى طاقة له؟

العدد الكمي الاساسي للالكترون في هذا الاوربتال هو $n = 2$ و العدد الكمي الاوربتالي $l = 1$ اما العدد الكمي المغناطيسي فيمكن الحصول عليه من الشكل

-1	0	+1
↑		

لذلك يكون $m = -1$ اي ان دالة الموجة تكون

$$\Psi_{2,1,-1}(r,\theta,\phi) = R_{2,1}(r).\Theta_1^{|-1|}(\theta).\Phi_{-1}(\phi)$$

$$\Phi_{-1}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\phi}$$

$$\Theta_1^{|-1|}(\theta) = N_1^{|-1|} * P_1^{|-1|}(cos\theta) = N_1^1 * P_1^1(cos\theta)$$

يمكن معرفة قيمة متعددة حدود ليجندر المرافقة و ثابت معايرتها بالحل كما مر سابقا او من اخذ قيمها من الجدول مباشرة

$$\Theta_1^{|-1|}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{4}} * sin\theta$$

و تكون الدالة $R_{2,1}(\rho)$

$$R_{2,1}(\rho) = N_{2,1} * \rho^1 * L_3^3(\rho) * e^{-\rho/2}$$

$$N_{2,1} = -\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3 * \frac{(2-1-1)!}{2*2[(2+1)!]^3}} = -\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3 * \frac{(0)!}{4[(3)!]^3}} = -\sqrt{\left(\frac{\rho}{r}\right)^3 * \frac{1}{4*216}}$$

$$N_{2,1} = -\sqrt{\frac{8}{8 * a_0^3} * \frac{1}{4 * 216}} = -\frac{1}{\sqrt{864a_0^3}}$$

$$L_3^3(\rho) = \left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(3)} \left[e^{\rho}.\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(3)} (\rho^{(3)} e^{-\rho})\right] =$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(3)} \left[e^{\rho}.\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(2)} (-\rho^{(3)} e^{-\rho} + e^{-\rho}.3\rho^2.)\right]$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(3)} \left[e^{\rho}.\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(1)} ((\rho^3 - 12\rho^2 + 6\rho)e^{-\rho})\right]$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(3)} [e^{\rho}.[-(\rho^3 - 12\rho^2 + 6\rho)e^{-\rho} + (3\rho^2 - 24\rho + 6)e^{-\rho}]]$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(3)} [-\rho^3 + 15\rho^2 - 30\rho + 6] = -6$$

$$R_{2,1}(\rho) = -\frac{1}{\sqrt{864a_0^3}} * \rho^1 * -6 * e^{-\rho/2} = \frac{6}{\sqrt{864a_0^3}} * \rho * e^{-\rho/2}$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{6}{\sqrt{864a_0^3}} * \frac{r}{a_0} * e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\Psi_{2,1,-1}(r,\theta,\phi) = \frac{6}{\sqrt{864a_0^3}} * \frac{r}{a_0} * e^{-\frac{r}{2a_0}} * \sqrt{\frac{3}{4}} * sin\theta * \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\phi}$$

$$\Psi_{2,1,-1}(r,\theta,\phi) = \sqrt{\frac{9}{376\pi.\, a_0^5}} * r * e^{-\frac{r}{2a_0}} * sin\theta * e^{-i\phi}$$

س/ اوجد دالة الموجة الكلية للالكترون في حالته الارضية في ذرة الهيدروجين؟

ان الحالات الكمية التي ذكرت سابقا تناولت ثلاث اعداد كم و العدد الكمي الاخير الخاص ببرم الالكترون لايمكن الحصول عليه من معادلة شرودنكرثلاثية الابعاد السالفة الذكر و انما من الصياغة النسبية لمعادلة شرودنكر حيث يدخل الزمن كبعد رابع و ان وجود الزمن كبعد رابع يحتم وجود اربعة اعداد كمية لوصف حالة الالكترون في ذرة الهيدروجين لذلك و كتقريب يتم وصف برم الالكترون كدالة مستقلة في اشتقاق ذرة الهيدروجين ثلاثية البعد.