

محاضرات الفيزياء الكمية

أستاذ المادة م.د حسين عبدالكريم حسين

اهداف المادة الدراسية

- فهم المبادئ الأساسية للميكانيك الكمي وتفسير سلوك الأنظمة الميكروسكوبية.
- التمييز بين الفيزياء الكلاسيكية والفيزياء الكمية من حيث المفاهيم والنتائج الفيزيائية.
- اكتساب القدرة على استخدام المعادلات والمؤثرات الكمية في حل المسائل الفيزيائية.
- تنمية مهارات التحليل الرياضي والتفكير المجرد المرتبط بالأنظمة الكمية.
- توظيف مفاهيم الفيزياء الكمية في تفسير الظواهر الحديثة والتطبيقات التقنية.

المراجع

- أحمد محمد الحسن، مبادئ ميكانيك الكم، دار المسيرة للنشر والتوزيع، عمان، الأردن، 2018 .
- عبد الجبار عبد الله، مقدمة في الفيزياء الحديثة والكمية، جامعة بغداد، العراق .
- سعد الله أحمد، الميكانيك الكمي وتطبيقاته، دار الكتب العلمية، بيروت، 2016 .
- محمد عبد الرحمن عبد الحميد، أساسيات الفيزياء الكمية، دار الفكر العربي، القاهرة، 2017 .
- علي حسين صالح، الفيزياء الذرية والكمية، وزارة التعليم العالي والبحث العلمي، العراق .
- Introduction to Quantum Mechanics Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2018). Introduction to Quantum Mechanics (3rd ed.). Cambridge University Press.
- Quantum Mechanics Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., & Laloë, F. (2019). Quantum Mechanics (2nd ed.). Wiley.
- Principles of Quantum Mechanics Shankar, R. (2012). Principles of Quantum Mechanics (2nd ed.). Springer.
- Modern Quantum Mechanics Sakurai, J. J., & Napolitano, J. (2020). Modern Quantum Mechanics (3rd ed.). Cambridge University Press.
- Quantum Physics Gasiorowicz, S. (2003). Quantum Physics (3rd ed.). Wiley.

المبادئ الأساسية للميكانيك الكمي

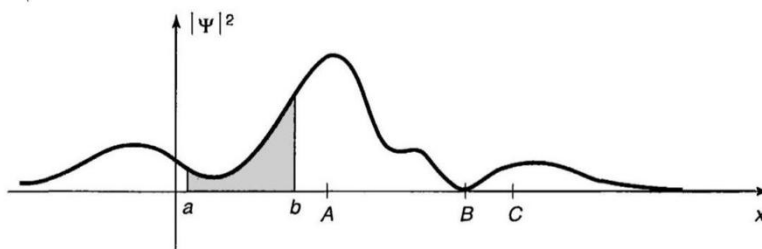
The Fundamental Principles of Quantum Mechanics

١-٢: دالة الموجة Wave Function

لو افترضنا جسماً كتلته m يسير باتجاه محور x تحت تأثير قوة $F(x, t)$ فإن الميكانيك التقليدي يعبر عنها بواسطة قانون نيوتن الثاني: $F = ma$ وطاقة الجسيم تكون: $E = T + V$ ، بينما يعبر الميكانيك الكمي عن نفس المسألة بصورة مختلفة تماماً فيعبر عنها بدلالة دالة الموجة $\Psi(x, t)$ التي تحوي معلومات عن الحالة المكانية للجسيم عند الزمن t . ويمثل مربع القيمة المطلقة لدالة الموجة $|\Psi(x, t)|^2$ احتمالية تواجد الجسيم في نقطة x في زمن t كما يلي:

$$2.1 \dots \dots \dots \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \{ \text{احتمالية ايجاد الجسيم بين النقطتين } a \text{ و } b \text{ عند الزمن } t \}$$

والاحتمالية هي المساحة تحت منحنى $|\Psi|^2$. ولدالة الموجة المبينة في الشكل 1-2 فإنه من المحتمل جداً ايجاد الجسيم قرب النقطة A عندما تكون $|\Psi|^2$ كبيرة. كما إنه من المستبعد إيجاد الجسيم قرب النقطة B.



الشكل 1-2: دالة موجة نموذجية، والمنطقة المظللة فيها تمثل احتمالية تواجد الجسيم بين a و b.

ويمكن تفسير المقدار $|\Psi(x, t)|^2$ بأنه الكثافة العددية للجسيمات، أي عدد الجسيمات في وحدة الحجم، وهو مركب من مقدار حقيقي وآخر معقد:

$$2.2 \dots \dots \dots |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t)$$

حيث تمثل $\Psi^*(x, t)$ الدالة المعقدة المرافقة للدالة $\Psi(x, t)$.

وتأخذ دالة الموجة الصيغة التالية:

$$2.3 \dots \dots \dots \Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{i(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t)}$$

ولمعرفة مؤثر الطاقة E نراجع المعادلة 2.9 التي يمكن كتابتها بالشكل:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{E} \Psi(x, t) \quad \dots \dots 2.20$$

إذن يكون مؤثر الطاقة كما يلي:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \dots \dots 2.21$$

وبالفعل لو أثرنا بهذا المؤثر على الدالة $\Psi(x, t)$ لحصلنا على المعادلة 2.9.

ومن معادلة شرودنجر (T. D. S. E.) 2.12':

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + V(r) \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t)$$

$$\hat{H} \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) \quad \dots \dots 2.22$$

حيث إن المقدار $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right)$ هو المؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ ، ويقابل في الميكانيك التقليدي المقدار:

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

وفي الميكانيك الكمي:

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

$$\therefore \hat{H} \Psi(r, t) = E \Psi(r, t) \quad \dots \dots 2.23$$

أما الزخم الزاوي L فإنه حسب الميكانيك التقليدي: $L = r \times p$

حيث r هو متجه الموضع للجسيم (لثلاثة أبعاد)، و p زخمه الخطي. ويكون الزخم الزاوي في الميكانيك الكمي:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar (r \times \nabla) \quad \dots \dots 2.24$$

والجدول التالي يوضح ما تقدم من المؤثرات.

الجدول 1-2: المتغيرات التقليدية والمؤثرات الكمية لـ $\Psi(r, t)$

المؤثر	التمثيل التقليدي	الحالة الظاهرة Observable
$\hat{r} = r$	R	الموضع Position
$\hat{p} = -i\hbar\nabla$	$P = mv$	الزخم Momentum
$\hat{V} = V$	V	الجهد Potential
$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$	$T = \frac{p^2}{2m}$	الطاقة الحركية Kinetic energy
$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$	E	الطاقة Energy
$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$ $= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$	H	الهاملتوني Hamiltonian
$\hat{L} = -i\hbar(r \times \nabla)$	L	الزخم الزاوي Angular momentum

٢-٥: العيارية Normalization

إن العلاقة التي تحقق الشرط في المعادلة 2.4 تسمى دالتها الموجية بالدالة العيارية. كما إن احتمالية تواجد الجسم في زمن t في عنصر الحجم d^3r المحيط بالنقطة r تُعطى بالعلاقة:

$$dP(r, t) = C |\Psi(r, t)|^2 d^3r \quad \dots \dots 2.25$$

حيث C : ثابت العيارية normalization constant. وتكون الاحتمالية الكلية لإيجاد الجسم في مكان في الفضاء في زمن t مساوية لـ 1، ولذلك:

$$\int dP(r, t) = 1 \quad \dots \dots 2.26$$

وتأخذ هذه الاحتمالية قيمة حقيقية دوماً. وهنا نحن متأكدون من تواجد الجسم في هذا الفضاء المفروض، وبالتالي فإن احتمال تواجد الجسم سيكون $100\% = 1$.

ومن العلاقتين 2.25 و 2.26 نستنتج:

$$\begin{aligned} \frac{1}{C} &= \int |\Psi(r, t)|^2 d^3r \quad \dots \dots 2.27 \\ &= \int \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) d^3r \end{aligned}$$

وعندما $C = 1$ نستطيع القول أن الدالة الموجية عيارية normalized. أي إنها صارت دالة طبيعية تدل على وجود فعلي للجسم وليس مجرد احتمال، ولكن هذا الوجود يخضع لمبدأ اللادقة.



مثال: جد قيمة الثابت A في الدالة $\Psi = Ae^{-kx}$ بحيث تكون الدالة عيارية ضمن المدى $(0 \leq x < \infty)$.

الحل: يجب توفر شرط العيارية: $\int_0^\infty \Psi^* \Psi dx = 1$

$$\int_0^\infty (Ae^{-kx})^* (Ae^{-kx}) dx = 1$$

$$A^2 \int_0^\infty e^{-2kx} dx = -\frac{A^2}{2k} [e^{-2kx}]_0^\infty = -\frac{A^2}{2k} [0 - 1] = \frac{A^2}{2k} = 1$$

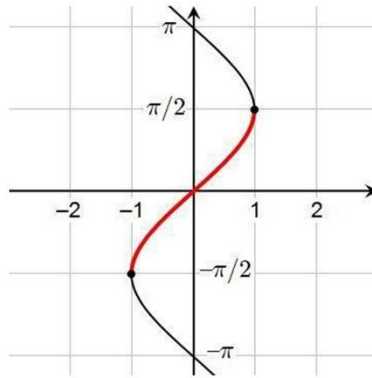
$$\therefore A^2 = 2k \rightarrow A = \pm\sqrt{2k}$$

٦-٢: شروط دالة الموجة Conditions of Wave Function

اقترح ماكس بورن Max Born سنة 1926 أن مربع القيمة المطلقة لدالة الموجة $|\Psi(r, t)|^2$ يمثل كثافة الاحتمالية لإيجاد جسيم في حالة معينة في زمن محدد. ومع ذلك، اقترح أيضاً أربعة شروط لقبول الدالة الموجية التي تستخدم في حل معادلة شرودنجر هي:

١- أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة single value، أي إن الدالة $\Psi(r, t)$ لها قيمة واحدة فقط لكل قيمة من قيم المتغيرات التي تعتمد عليها (r و t). أي إن كل قيمة محددة للموضع يقابلها قيمة وحيدة للدالة الموجية فقط وليس أكثر، وهذه وسيلة لضمان وجود قيمة واحدة لاحتمالية أن يكون النظام في الحالة المعطاة، لكن المتعددة القيمة تعطي أكثر من احتمال لتواجد الجسيم في هذه الحالة نفسها. وهذا مرفوض لأن الجسيم لا يمكن أن يتواجد في أكثر من مكان في نفس اللحظة ولا أن يكون له دالتان مختلفتان في نفس المكان كالدالة $(\sin^{-1} x)$ التي تأخذ قيماً متعددة حيث:

$$\sin^{-1} 0 = n\pi \quad \text{at } x = 0 \quad \text{where: } n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \text{ etc.}$$

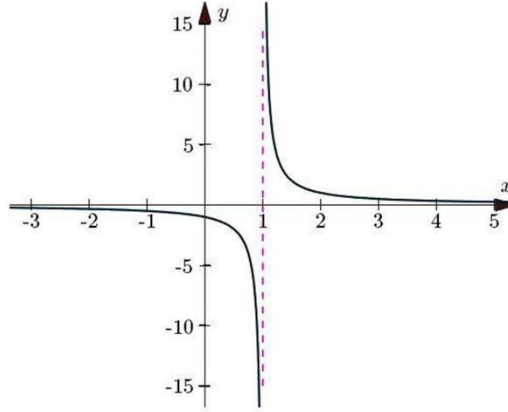


الشكل 2-2: الدالة $(\sin^{-1} x)$ متعددة القيم.

٢- أن يكون مربع الدالة الموجية قابلاً للتكامل، أي أن يكون تكامل $|\Psi|^2$ على كل الفضاء محدوداً. وهذا يعني بطريقة أخرى إمكانية استخدام $|\Psi|^2$ كثافة للإحتمالية لأن أي كثافة احتمال يجب أن تتكامل على كل الفضاء لإعطاء قيمة ١.

$$\int |\Psi|^2 d^3r < \infty \quad \dots \dots 2.28$$

٣- أن تكون الدالة الموجية متصلة (مستمرة) continuous، لأن كون الدالة غير متصلة (عندها انقطاع في الدالة في مكان ما) يجعل الجسم غير معرف في منطقة الانقطاع. وكمثال على الدالة غير المتصلة الدالة $(y = \frac{1}{x-1})$ حيث يصبح المنحني غير متصل عند النقطة $x = 1$. ويجب أيضاً أن تكون الدالة الموجية قابلة للاشتقاق دوماً.



الشكل 2-3: الدالة غير المتصلة $y = \frac{1}{x-1}$

٤- يجب أن تكون جميع المشتقات من الدرجة الأولى للدالة الموجية متصلة (مستمرة).

مثال: إذا كانت لدينا دالتان ψ و φ معرفتان عند المدى $0 \leq x < \infty$. يتبين لماذا لا يمكن أن تكون الدالة $\psi(x) = x$ دالة موجية بينما يمكن أن تكون الدالة $\varphi(x) = e^{-x}$ دالة موجية مقبولة؟

الحل: لكي تكون الدالة مقبولة يجب توفر الشروط الأربعة المذكورة آنفاً فيها. وهنا نلاحظ أن كلتا الدالتين أحادية القيمة ومستمرة خلال المدى المفروض وقابلة للاشتقاق، ومشتقة كل منهما متصلة، (لاحظ الشكل 2-4). ولكن هل إن مربع كل منهما قابل للتكامل؟ فلنكامل أولاً مربع الدالة الأولى:

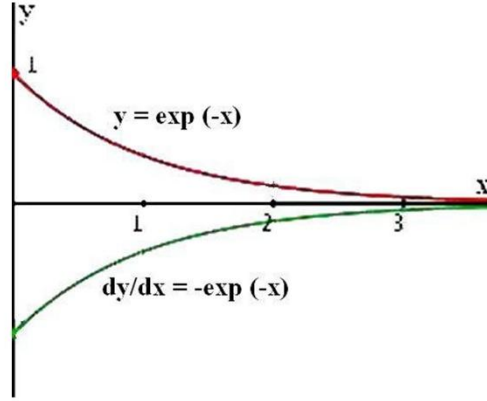
$$\int_0^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^{\infty} |x|^2 dx = \int_0^{\infty} x^2 dx = \left. \frac{x^3}{3} \right|_0^{\infty} = \infty$$

ويتبين من هذا أن مربع الدالة $\psi(x) = x$ غير قابل للتكامل ضمن حدود التكامل المفروضة $(0 \rightarrow \infty)$ ،

لذا فهي دالة غير مقبولة. ومن جهة أخرى فإن تكامل مربع الدالة الثانية يساوي:

$$\int_0^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \int_0^{\infty} |e^{-x}|^2 dx = \int_0^{\infty} e^{-2x} dx = \frac{1}{2}$$

أي إن مربع الدالة $\varphi(x) = e^{-x}$ قابل للتكامل، لذا فهي دالة مقبولة ضمن حدود التكامل المفروضة.



الشكل 2-4: الدالة $(\varphi(x) = e^{-x})$ ومشتقتها $(\frac{d\varphi(x)}{dx} = -e^{-x})$ ضمن حد التكامل $(0 \rightarrow \infty)$.

Properties of Operators

٧-٢: خواص المؤثرات

للمؤثرات خواص يمكن تصنيفها من خلال صنفين:

Linear Operators

١-٧-٢: المؤثرات الخطية

يُسمى المؤثر $\hat{F}$ مؤثراً خطياً إذا حقق الشرطين التاليين:

- I. $\hat{F}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{F}\Psi_1 + \hat{F}\Psi_2$
- II. $\hat{F}(c\Psi) = c\hat{F}\Psi$ where c is constant.

وكمثال على المؤثر الخطي هو المؤثر التفاضلي $\hat{F} = d/dx$:

$$\frac{d}{dx}(\Psi_1(x) + \Psi_2(x)) = \frac{d}{dx}\Psi_1(x) + \frac{d}{dx}\Psi_2(x)$$

ومما يجدر ذكره أنه ليست جميع المؤثرات خطية، وكمثال هو مؤثر الجذر التربيعي $\hat{F} = \sqrt{\quad}$

$$\sqrt{\Psi_1 + \Psi_2} \neq \sqrt{\Psi_1} + \sqrt{\Psi_2}$$

كما إن المؤثرات الخطية تخضع للعمليات الجبرية (الجمع والطرح والضرب) كما يلي، بفرض أن $\hat{F}$ و $\hat{S}$

مؤثران يؤثران على الدالة Ψ :

- I. $(\hat{F} + \hat{S})\Psi = \hat{F}\Psi + \hat{S}\Psi$
- II. $(\hat{F} - \hat{S})\Psi = \hat{F}\Psi - \hat{S}\Psi$
- III. $\hat{F}\hat{S}\Psi = \hat{F}(\hat{S}\Psi)$

والحالة الأخيرة (الضرب) تعني أن المؤثر $\hat{S}$ يؤثر على الدالة Ψ ، والمؤثر $\hat{F}$ يؤثر على نتيجة تأثير $\hat{S}$ على Ψ .

٢-٧-٢: المؤثرات التبادلية Commutator Operators

لنفرض أن المؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يؤثران بصورة متتالية على الدالة Ψ . ويُسمَّيان متبادليين إذا حققا الشرط التالي:

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

و تُكتب بالصيغة:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad \dots \dots 2.29$$

ومن الناحية الرياضية فإن هذا يعني أنه يمكن إيجاد مجموعة من الدوال المسموحة الآتية Ψ_n لكل من $\hat{A}$ و $\hat{B}$. وهذا يعني أنه بالإمكان قياس كميتين ملاحظتين observables آنياً وبدقة مضبوطة. وإذا لم يكن المؤثران تبادليين، أي كانا بالصيغة:

$$\hat{A}\hat{B}\Psi \neq \hat{B}\hat{A}\Psi \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

فإن هذا يعني أنه لا يمكن قياس $\hat{A}$ و $\hat{B}$ آنياً وبدقة متناهية، وهذا يتوافق مع مبدأ اللادقة لهايزنبرك. ومن الأمثلة على المؤثرات التبادلية:

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0, \quad [\hat{x}, \hat{y}] = 0, \quad [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0, \quad [\hat{p}_x, \hat{T}] = 0$$

أما المؤثرات غير التبادلية فإن من الأمثلة عليها:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0, \quad \left[\frac{d}{dx}, x^2\right] \neq 0, \quad [\hat{H}, \hat{p}_x] \neq 0, \quad [\hat{V}_x, \hat{p}_x] \neq 0,$$

وهناك بعض القواعد الرياضية للمؤثر المستبدل هي:

- 1- $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$
- 2- $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$
- 3- $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$
- 4- $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$
- 5- $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$
- 6- $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$
- 7- $[\hat{A}^2, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A} + \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}]$
- 8- $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$
- 9- $[\hat{A}, b] = 0$

حيث $\hat{A}$ و $\hat{B}$ و $\hat{C}$ مؤثرات خطية، و b ثابت.

أمثلة:

(١-) جد ناتج $\left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^n}{\partial x^n}\right]$ ، وبَيِّن فيما إذا كان المؤثران تبادليين.

الحل:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^n}{\partial x^n}\right] \Psi = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \Psi - \frac{\partial^n}{\partial x^n} \frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}} \Psi - \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}} \Psi = 0$$

∴ المؤثران تبادليان commute .

(٢-) جد ناتج $\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]$ ، وبَيِّن فيما إذا كان المؤثران تبادليين.

الحل:

$$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right] \Psi = \frac{d}{dx} x^2 \Psi - x^2 \frac{d}{dx} \Psi = \left(2x \Psi + x^2 \frac{d\Psi}{dx}\right) - x^2 \frac{d\Psi}{dx} = 2x \Psi$$

$$\therefore \left[\frac{d}{dx}, x^2\right] = 2x \neq 0$$

إذن، المؤثران ليسا تبادليين not commute .

(٣-) جد ناتج $[\hat{x}^n, \hat{p}_x]$ ، وبَيِّن فيما إذا كان المؤثران تبادليين.

الحل:

$$[\hat{x}^n, \hat{p}_x] \Psi = x^n \hat{p}_x \Psi - \hat{p}_x x^n \Psi$$

$$\because \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore [\hat{x}^n, \hat{p}_x] \Psi = x^n \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) x^n \Psi = -i\hbar \left(x^n \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \frac{\partial}{\partial x} x^n \Psi\right)$$

$$= -i\hbar \left(x^n \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \left(nx^{n-1} \Psi + x^n \frac{\partial}{\partial x} \Psi\right)\right) = -i\hbar \left(x^n \frac{\partial}{\partial x} \Psi - nx^{n-1} \Psi - x^n \frac{\partial}{\partial x} \Psi\right)$$

$$= i\hbar nx^{n-1} \Psi \Rightarrow [\hat{x}^n, \hat{p}_x] = i\hbar nx^{n-1} \neq 0 \quad (\text{not commute})$$

(٤-) برهن أنه لجسيم كتلته m يتحرك باتجاه محور x

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

الحل: الطريقة الأولى، بالاستناد إلى القواعد الرياضية للمؤثر المستبدل التي ذكرناها آنفاً:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{x}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{x}\right]$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{x}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right] + [\hat{V}, \hat{x}] \quad \dots 1 \quad (\text{حسب القاعدة ٤،})$$

$$[\hat{V}, \hat{x}] \Psi = \hat{V} \hat{x} \Psi - \hat{x} \hat{V} \Psi = 0 \Rightarrow [\hat{V}, \hat{x}] = 0 \quad \dots 2 \quad \text{ولكن:}$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] = \frac{1}{2m} ([\hat{p}, \hat{x}] \hat{p} + \hat{p} [\hat{p}, \hat{x}]) \quad \dots 3 \quad (\text{حسب القاعدة (v)})$$

$$\because \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore [\hat{p}, \hat{x}] \Psi = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} x \Psi - x \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) = -i\hbar \left(\left(\Psi + x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -i\hbar \Psi$$

$$\therefore [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \quad \dots 4$$

Sub. eq.4 in eq.3 $\Rightarrow$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] = \frac{1}{2m} (-i\hbar \hat{p} - \hat{p} i\hbar) = \frac{1}{2m} (-2i\hbar \hat{p}) = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p} \quad \dots 5$$

$$\text{Sub. eq.2 and eq.5 in eq.1} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V} \quad \text{الطريقة الثانية :}$$

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] \Psi &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V} \right) x \Psi - x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V} \right) \Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} x \Psi + \hat{V} x \Psi + x \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi - x \hat{V} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} x \Psi + x \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \cdot x \Psi \right) - x \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \Psi \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \left(\Psi + x \frac{d\Psi}{dx} \right) - x \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \Psi \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\Psi}{dx} + x \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d\Psi}{dx} - x \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(2 \frac{d\Psi}{dx} \right) = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx} \Psi \\ \therefore [\hat{H}, \hat{x}] &= -\frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx} \quad \dots 6 \\ \because \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

$\Leftarrow \therefore$ نضرب الطرف الأيمن للمعادلة 6 بالمقدار $\frac{i\hbar}{i\hbar}$ ،

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx} \cdot \frac{i\hbar}{i\hbar} = \frac{\hbar^2}{mi\hbar} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) = \frac{\hbar^2}{mi\hbar} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{mi} \hat{p}_x = \frac{-i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

$$\therefore [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{-i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

يوجد نوع من المعادلات الرياضية يُسمى معادلات القيمة الذاتية يتخذ الشكل العام التالي:

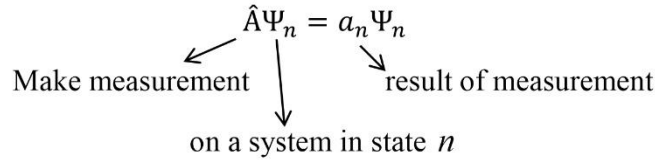
$$\hat{A}f = af \quad \dots \dots 2.30$$

حيث أن الدالة الذاتية للمؤثر الخطي $\hat{A}$ هي الدالة f بحيث أنه عندما نؤثر بـ $\hat{A}$ على f تنتج الدالة f مرة أخرى مضروبة بثابت يُسمى القيمة الذاتية a .

وعندما تكون الدالة الموجية Ψ هي الدالة الذاتية للمؤثر $\hat{A}$ فيمكن كتابة المعادلة السابقة بالصيغة:

$$\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n \quad \dots \dots 2.31$$

حيث Ψ_n : الدالة الذاتية eigenfunction، و a_n القيمة الذاتية eigenvalue للمؤثر $\hat{A}$. ويلعب هذا النوع من المعادلات الرياضية دوراً مهماً في ميكانيك الكم. والتفسير الفيزيائي لمعادلة القيمة الذاتية يعني أن المؤثر $\hat{A}$ يقوم بقياس الصفة الفيزيائية التي يمثلها النظام الموصوف بدالة الموجة Ψ_n والمتواجد في الحالة الكمية n . ونتيجة عملية القياس هي القيمة الذاتية a_n .



وعليه فعندما يؤثر مؤثر الزخم $\hat{p}$ على النظام الموصوف بالدالة Ψ_n والموجود في الحالة الكمية n فإنه يقوم بقياس الزخم للنظام في تلك الحالة. وكمثال على هذا أيضاً هو معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن:

$$\hat{H}\Psi(r) = \hat{E}\Psi(r)$$

حيث أن المؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ هو المؤثر الذي أثر على دالة الموجة $\Psi(r, t)$ (الدالة الذاتية) لينتج الدالة الموجية نفسها $\Psi(r, t)$ مضروبة بمؤثر الطاقة $\hat{E}$ (القيمة الذاتية). وعلى هذا الأساس يمكن إيجاد الصيغة الرياضية لأي مؤثر مقابل لصيغة فيزيائية معينة. لاحظ هذه المعادلات:

$$\hat{p}\Psi_n = p_n\Psi_n, \quad \hat{p}^2\Psi_n = p_n^2\Psi_n, \quad \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad \hat{r}\Psi_n = r_n\Psi_n$$

أمثلة:

(١-) إذا كان المؤثر $\left(\hat{A} = \frac{d}{dx}\right)$ فهل إن الدالة $(\phi(x) = e^{2ix})$ هي دالة ذاتية لهذا المؤثر؟

$$\hat{A}\phi(x) = \frac{d}{dx}e^{2ix} = 2ie^{2ix}$$

الحل:

إذن بعد تطبيق تعريف الدالة الذاتية $(\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n)$ يتبين أن الدالة $(\phi(x) = e^{2ix})$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ ، والقيمة الذاتية له هي: $2i$.

(٢-) إذا كانت الدالة ($f = \cos x$) دالة ذاتية للمؤثر ($\hat{f} = \frac{d^2}{dx^2}$) فجد القيمة الذاتية للمؤثر.

$$\hat{f}f = \frac{d^2}{dx^2} \cos x = \frac{d}{dx} (-\sin x) = -\cos x \rightarrow \text{eigenvalue} = -1 \quad \text{الحل:}$$

(٣-) برهن أن الدالة الذاتية للمؤثر ($\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2$) هي ($F(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$)، ثم جد القيمة الذاتية.

$$\therefore \hat{A}\Psi_n = a_n \Psi_n \quad \text{الحل:}$$

$$\begin{aligned} \therefore \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2 \right) e^{-\frac{1}{2}x^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(-x e^{-\frac{1}{2}x^2} \right) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ &= -x \left(-x e^{-\frac{1}{2}x^2} \right) + e^{-\frac{1}{2}x^2} (-1) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ &= x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} - e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} = -e^{-\frac{1}{2}x^2} = -F(x) \end{aligned}$$

إذن، القيمة الذاتية = -1

واجب بيتي:

١- هل الدالة ($\psi_k(x) = U_k(x)e^{ikx}$) هي دالة ذاتية لمؤثر الزخم ($\hat{p} = -i\hbar \partial/\partial x$) ؟

٢- هل الدالة ($\psi_n(x) = \sin 6x$) هي دالة ذاتية للمؤثر ($\hat{F} = -\partial^2/\partial x^2$) ؟

٩-٢: القيم المتوقعة Expectation Values

تتبع حركة الجسيم في الميكانيك التقليدي إذا عُرف متجه الموضع $\vec{r}$ كدالة للزمن $\vec{r} = \vec{r}(t)$. وإذا كان $\vec{r} = \vec{r}_1$ في الزمن t_1 فإن معادلات الحركة تزودنا بوضوح بمتجه الموضع $\vec{r} = \vec{r}_2$ في زمن لاحق t_2 . أما في الميكانيك الكمي فإن حركة الجسيم تصفها دالة الموجة $\Psi(r, t)$ ، ولو تعرفنا على موضع الجسيم ومن ثم $\Psi(r, t)$ في الزمن t_1 فإن معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن تستطيع تزويدنا فقط بدالة موجية تختلف عن الصفر لأي قيمة من $\vec{r}$ في زمن لاحق t_2 . وهذا يعني أن الجسيم يمكن أن يكون في أي مكان، وبالتالي فإن معرفتنا بموضع الجسيم في زمن معين لا يعني التعرف بدقة على موضعه في زمن لاحق. وللتغلب على هذه الصعوبة نفرض أنه قد أجريت قياسات كثيرة على الإحداثي r وحصلنا في كل مرة على قيم عديدة مختلفة. ولما كانت احتمالية تواجد الجسيم في عنصر الحجم d^3r حول النقطة r (أي بين r و $r + dr$) هي $\Psi^*(r, t)\Psi(r, t)d^3r$ أو ما يعادلها $|\Psi(r, t)|^2 d^3r$ فإن معدل هذه القياسات سوف يعطي قيمة متوسطة لـ r تسمى القيمة المتوقعة $\langle r \rangle$ ، وتساوي:

$$\langle r \rangle = \int \Psi^* r \Psi d^3r \quad \dots \dots 2.32$$

الفصل الرابع

المتذبذب التوافقي الخطي

The Linear Harmonic Oscillator

Introduction

١-٤: مقدمة

يُعتبر المتذبذب التوافقي الخطي مثلاً للجسيم المقيد لفكرة تكميم مستويات الطاقة في ميكانيك الكم، ويُعد ذا أهمية كبيرة في الدراسات التقليدية والكمية. فهناك ظواهر فيزيائية عديدة يمكن تحليلها بدلالة أنماط الحركة للمتذبذب التوافقي البسيط مثل اهتزاز الذرات والجزيئات في التراكيب الصلبة البلورية ومثل تذبذب المجال الكهرومغناطيسي الذي يمكن اعتباره في تطبيقات عديدة كعدد من الاهتزازات التوافقية البسيطة.

تحدث الحركة التوافقية حينما يهتز جسيم حول نقطة مركزية (تمثل نقطة توازنه) بسبب وجود قوة معيدة تجذبه نحو المركز، ولكن الجسيم - حين يرجع - سيجتاز المركز بسبب القصور الذاتي، ثم يتباطأ بعد ابتعاده عن المركز بسبب القوة المعيدة التي تتجه نحو المركز دائماً، وتصبح سرعة الجسيم صفراً في نقطة معينة ثم يعود بعدها باتجاه المركز، وهكذا. وفي حالة المتذبذب التوافقي البسيط تتغير القوة المعيدة بصورة خطية مع بعد الجسيم عن مركز الحركة. أي وفق قانون هوك:

$$F = -kx \quad \dots \dots 4.1$$

حيث k ثابت القوة، وقد وُضعت الإشارة السالبة لأن القوة تكون دائماً معاكسة لحركة الجسيم. وهذه القوة من النوع المحافظ، ولهذا فإن الطاقة الكامنة للجسيم المهتز هي:

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad \dots \dots 4.2$$

ولو أردنا معالجة المسألة تقليدياً فإننا نعوض المعادلة 4.1 في قانون نيوتن الثاني ($F = ma$) فينتج:

$$-kx = m \frac{d^2x}{dt^2} \Rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0 \Rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0 \quad \dots \dots 4.3$$

حيث ω : تردد الذبذبة ($\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$)، ويقاس بوحدة (rad/sec).

والحل المناسب للمعادلة 4.3 يكون بالشكل التالي:

$$x(t) = A \cos(\omega t) \quad \dots \dots 4.4$$

حيث A : سعة الذبذبة، أي الإزاحة العظمى من نقطة التوازن.

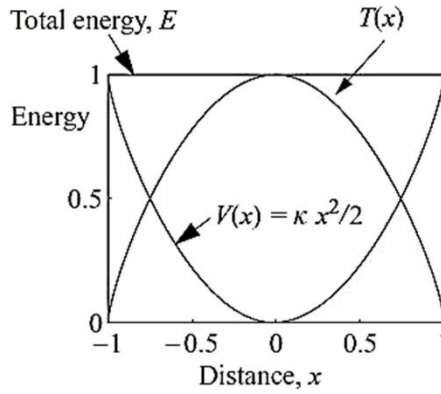
ويمكن أن نعبر عن القوة بدلالة الطاقة الكامنة بالعلاقة التالية:

$$F(x) = -\frac{dV}{dx} = -\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{2}kx^2\right) = -kx \quad \dots \dots 4.5$$

وحيث أن الطاقة الكامنة للجسيم المهتز تتناسب طردياً مع x^2 وفق العلاقة 4.2 فإن الطاقة الكامنة في مركز الحركة (أي عند $x = 0$) تساوي صفراً، ويمتلك الجسيم عندها طاقة حركية فقط، ويمتلك طاقة كامنة فقط عندما يكون بأقصى بعد عن مركز الحركة (لاحظ الشكل 4-1). وعليه فلو كانت الطاقة الكلية للمتذبذب هي E وكان يتذبذب بإزاحة أقصاها A فإن:

$$E = \frac{1}{2}kA^2 \quad \dots \dots 4.6$$

ولهذا فلا توجد قيود على تحديد قيمة E لأن A يمكن أن يأخذ أي قيمة. وهذا يعني أن قيم E متصلة. وهذه النتيجة طبيعية وفق المفهوم التقليدي.



الشكل 4-1: الطاقتان الحركية والكامنة لمتذبذب توافقي تقليدي ببعد واحد.

٢-٤: حل معادلة شرودنجر للمتذبذب التوافقي

Solution of Schrodinger Equation for Harmonic Oscillator

لدراسة مسألة المتذبذب التوافقي من ناحية الميكانيك الكمي نبدأ بمعادلة شرودنجر غير المعتمدة

على الزمن لبعد واحد، والتي تأخذ الشكل التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \dots \dots 4.7$$

$$\because V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (\text{from eq. 4.2})$$

$$\therefore T.I.S.E. \Rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{1}{2}kx^2 \Psi(x) = E\Psi(x) \right\} \times \left(-\frac{2m}{\hbar^2} \right) \Rightarrow$$

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2}kx^2 - E \right) \Psi$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \left(\frac{mkx^2}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\Psi \quad \dots \dots 4.8$$

لغرض تيسير حل المعادلة 4.8 نفرض:

$$\alpha^4 = \frac{mk}{\hbar^2} \quad \text{and} \quad \sigma = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\therefore \text{Eq. 4.8} \Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} = (\alpha^4 x^2 - \sigma)\Psi \quad \dots \dots 4.9$$

توجد عدة طرق لحل هذا النوع من المعادلات، إلا أن طريقة متعدد الحدود polynomial هي الأكثر شيوعاً. ولكن يلزم أن نعلم قبل البدء بالحل أن الدالة الموجية $\Psi(x)$ يجب أن تحقق الشروط العامة المعروفة عن الدالة الموجية من كونها عيارية وأنها تتلاشى في اللانهاية لأن الجسم مقيد في مدى محدود من الفضاء بسبب القوة المعيدة. ولإيجاد $\Psi(x)$ التي تحقق هذا الشروط نفرض أن $(x \rightarrow \infty)$. وفي هذه الحالة يمكن إهمال المقدار σ في المعادلة 4.9. وحينها نحصل على المعادلة:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \alpha^4 x^2 \Psi \quad \dots \dots 4.10$$

$$\Psi(x) = e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \quad \dots \dots 4.11$$

ويكون حلها بالصيغة :

$$\therefore \frac{d\Psi}{dx} = -\alpha^2 x e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}, \quad \text{and} \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \alpha^4 x^2 e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} - \alpha^2 e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \quad \dots \dots 4.12$$

وفي هذه المعادلة 4.12 يمكن أن نهمل الحد الثاني في الطرف الأيمن $\left(-\alpha^2 e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}\right)$ لأن قيمته تتلاشى أسرع بكثير من الحد الأول $\left(\alpha^4 x^2 e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}\right)$ لقيم x الكبيرة. ولهذا تكون المعادلة 4.11 حلاً مقبولاً للمعادلة 4.9، ولكنه ليس الناتج النهائي الذي نصبو إليه، فهو يعطي شكل الدالة الموجية للقيم الكبيرة فقط للمتغير x . أما للقيم الصغيرة فإن شكل الدالة سيتغير. وسنلجأ إلى تصحيح قيمة $\Psi(x)$ المعطاة بالمعادلة 4.11 بمعامل تصحيح $f(x)$ كي يصبح الحل النهائي بالصيغة:

$$\Psi(x) = f(x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad \dots \dots 4.13$$

والآن نفاضل هذه المعادلة مرتين بالنسبة للمتغير x فنحصل على:

$$\frac{d\Psi}{dx} = -\alpha^2 x e^{-(\alpha^2 x^2/2)} f(x) + e^{-(\alpha^2 x^2/2)} \frac{df(x)}{dx}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \left(-\alpha^2 f(x) - \alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} + \alpha^4 x^2 f(x) + \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - \alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} \right) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \left(\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2\alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} - \alpha^2 f(x) + \alpha^4 x^2 f(x) \right) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad \dots \dots 4.14$$

From eq. 4.13 and eq. 4.9 $\Rightarrow$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = (\alpha^4 x^2 - \sigma)f(x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad \dots \dots 4.15$$

By sub. eq. 4.14 in eq. 4.15 $\Rightarrow$

$$\left(\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2\alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} - \alpha^2 f(x) + \alpha^4 x^2 f(x) \right) e^{-\alpha^2 x^2/2} = (\alpha^4 x^2 - \sigma)f(x) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2\alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} - \alpha^2 f(x) + \alpha^4 x^2 f(x) = \alpha^4 x^2 f(x) - \sigma f(x)$$

$$\left(\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2\alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} - \alpha^2 f(x) \right) = -\sigma f(x)$$

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2\alpha^2 x \frac{df(x)}{dx} + (\sigma - \alpha^2)f(x) = 0 \quad \dots \dots 4.16$$

وتعني هذه المعادلة أن المسألة تحولت إلى إيجاد متعدد الحدود $f(x)$ الذي يحقق هذه المعادلة. ولتسهيل الحل نضع التحويل التالي:

$$y = \alpha x \quad \Leftrightarrow \quad y^2 = \alpha^2 x^2 \quad \dots \dots 4.17$$

ونُعرِّف متعدد حدود جديد $H(y)$ يتطابق في مواصفاته مع $f(x)$ كما يلي:

$$H(y) \equiv f(x) \quad \dots \dots 4.18$$

وهذا يعني أننا سنعوّض بالمقدار $\frac{y}{\alpha}$ بدلاً عن x . وحين نفاضل المعادلة 4.17 بالنسبة لـ x ينتج:

$$dy = \alpha dx \quad \Leftrightarrow \quad dx = \frac{dy}{\alpha}$$

وبهذا تصبح المعادلة 4.13 كما يلي:

$$\Psi(y) = H(y) e^{-y^2/2} \quad \dots \dots 4.19$$

وتُضحى المعادلة 4.16 كالتالي:

$$\frac{d^2 H(y)}{d\left(\frac{y}{\alpha}\right)^2} - 2\alpha^2 \frac{y}{\alpha} \frac{dH(y)}{\frac{dy}{\alpha}} + (\sigma - \alpha^2)H(y) = 0$$

$$\left. \frac{\alpha^2 d^2 H(y)}{dy^2} - 2\alpha^2 y \frac{dH(y)}{dy} + (\sigma - \alpha^2)H(y) = 0 \right\} \div \alpha^2 \Rightarrow$$

$$\frac{d^2 H(y)}{dy^2} - 2y \frac{dH(y)}{dy} + \left(\frac{\sigma}{\alpha^2} - 1\right)H(y) = 0 \quad \dots \dots 4.20$$

والآن نستبدل المقدار $\left(\frac{\sigma}{\alpha^2} - 1\right)$ بالمقدار $2n$ ، حيث n عدد صحيح موجب، أي $\left(2n = \frac{\sigma}{\alpha^2} - 1\right)$.

$$\therefore \frac{d^2 H_n(y)}{dy^2} - 2y \frac{dH_n(y)}{dy} + 2nH_n(y) = 0 \quad \dots \dots 4.21 \quad [Hermite Equation]$$

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} + 2n \right) H_n(y) = 0 \quad \dots \dots 4.21'$$

وتُعرف هذه المعادلة بمعادلة هيرميت، وإن حلول هذه المعادلة $H_n(y)$ تُعرف بمتعدد حدود هيرميت Hermite Polynomial ذي الدرجة n الذي يمكن كتابته صيغته العامة بالشكل التالي:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad \dots \dots 4.22$$

وبعد تعويض المعادلة 4.22 في المعادلة 4.19 سنحصل على الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي بالشكل:

$$\Psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-y^2/2} \quad \dots \dots 4.23$$

حيث N_n يمثل ثابت العيارية. ولإيجاد هذا الثابت نستخدم الشرط العياري:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(y) \Psi_n(y) dy = N_n^* N_n \int_{-\infty}^{+\infty} (H_n(y))^2 e^{-y^2} dy = 1$$

ومن هذا التكامل نحصل على ثابت المعيارية:

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \quad \dots \dots 4.24$$

حيث ω هو التردد الزاوي.

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \quad \dots \dots 4.24'$$

(وللتوضيح أكثر لاحظ الحاشية)¹.

من المعادلة 4.22 يمكن استخراج القيم الأولى لمتعدد حدود هيرميت بالتعويض بقيم n كما يلي:

$$\left. \begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \end{aligned} \right\} \quad \dots \dots 4.25$$

ويمكن كتابة متعدد حدود هيرميت $H_n(x)$ ذي الدرجة n بدلالة x بالشكل التالي:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} = (-1)^n e^{\alpha^2 x^2} \frac{d^n}{d(\alpha x)^n} e^{-\alpha^2 x^2}$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{\alpha^2 x^2} \frac{d^n}{\alpha^n dx^n} e^{-\alpha^2 x^2} \quad \dots \dots 4.26$$

¹ يُستفاد من العلاقات السابقة ($y = \alpha x$) و ($\alpha^4 = \frac{mk}{\hbar^2}$) و ($\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$) ما يلي:

$$y^2 = \alpha^2 x^2 = x^2 \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}} = x^2 \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2} * \frac{m}{m}} = x^2 \sqrt{\frac{m^2 k}{\hbar^2 m}} = x^2 \omega \sqrt{\frac{m^2}{\hbar^2}} = x^2 \omega \frac{m}{\hbar}$$

$$\therefore y^2 = \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \Rightarrow \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$



كما تُكتب الدالة الموجية العيارية $\Psi_n(x)$ للمتذبذب التوافقي بدلالة x بالصيغة التالية:

$$\begin{aligned}\Psi_n(x) &= N_n H_n(x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \\ &= \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \left((-1)^n e^{\alpha^2 x^2} \frac{d^n}{\alpha^n dx^n} e^{-\alpha^2 x^2} \right) e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \\ \Psi_n(x) &= (-1)^n \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{\alpha^2 x^2 / 2} \frac{d^n}{\alpha^n dx^n} e^{-\alpha^2 x^2} \quad \dots \dots 4.27\end{aligned}$$

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \quad \Leftrightarrow (n = 0) \text{ وللحالة الأرضية}$$

$$\Leftrightarrow (n = 1) \text{ وللحالة المتهيجة الأولى}$$

$$\begin{aligned}\Psi_1(x) &= (-1)^1 \left(\frac{\alpha}{2^1 1! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{\alpha^2 x^2 / 2} \frac{d^1}{\alpha^1 dx^1} e^{-\alpha^2 x^2} \\ &= - \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{\alpha^2 x^2 / 2} \frac{1}{\alpha} (-2\alpha^2 x) e^{-\alpha^2 x^2} \\ \Psi_1(x) &= \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} (2\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \quad \dots \dots 4.28\end{aligned}$$

The Energy of Harmonic Oscillator

٣-٤: طاقة المتذبذب التوافقي

فرضنا سابقاً العلاقات التالية:

$$\left(2n = \frac{\sigma}{\alpha^2} - 1 \right), \quad \left(\alpha^4 = \frac{mk}{\hbar^2} \Rightarrow \alpha^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \right) \quad \text{and} \quad \left(\sigma = \frac{2mE}{\hbar^2} \right)$$

$$\therefore 2n = \frac{2mE_n / \hbar^2}{\sqrt{mk} / \hbar} - 1 = \frac{2mE_n}{\hbar \sqrt{mk}} - 1$$

$$2n + 1 = \frac{2mE_n}{\hbar \sqrt{mk}} \quad \Bigg\} \div 2 \quad \Rightarrow \quad n + \frac{1}{2} = \frac{mE_n}{\hbar \sqrt{mk}}$$

$$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \frac{\sqrt{mk}}{m} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\therefore \omega = \sqrt{k/m}$$

$$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \dots \dots 4.29$$

$$\therefore \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{and} \quad \omega = 2\pi\nu, \quad \therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu \quad \dots \dots 4.30$$

حيث n تمثل عدداً كميّاً وتأخذ الأعداد الصحيحة ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$). والمعادلة الأخيرة تدل على أن

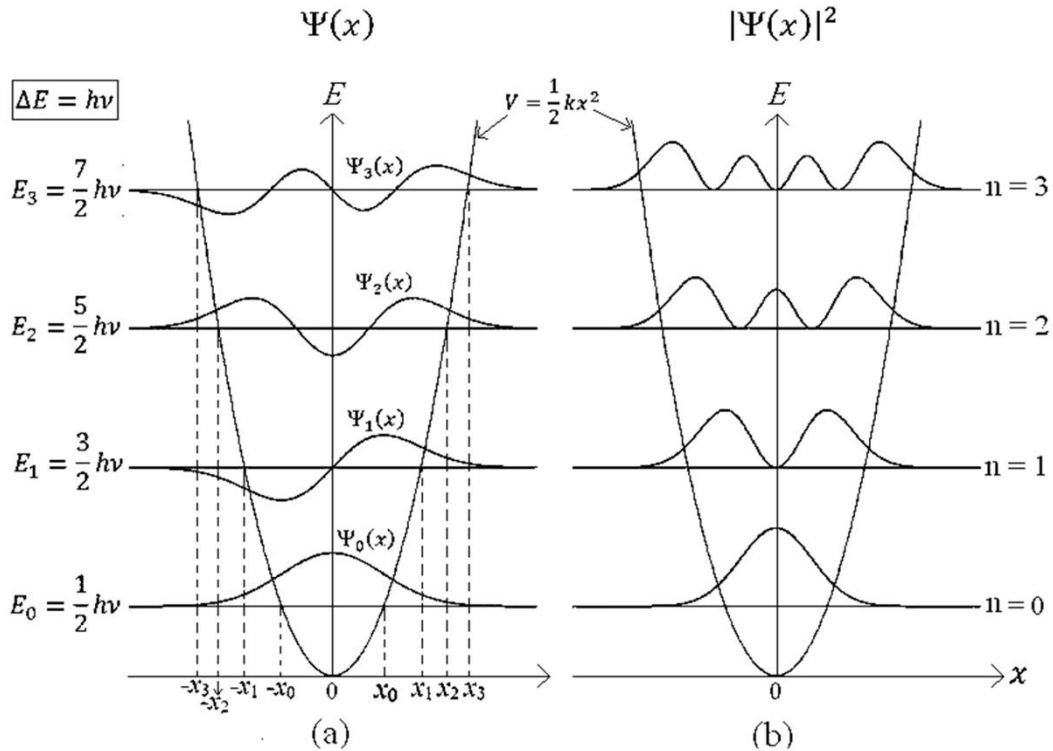
طاقة المتذبذب التوافقي هي طاقة مكتمة، كما إن طاقة الحالة الأرضية التي تتميز بالعدد الكمي ($n = 0$)

تُسمى طاقة نقطة الصفر zero point energy، وتساوي: $\{E_0 = \left(0 + \frac{1}{2} \right) h\nu = \frac{1}{2} h\nu = \frac{1}{2} \hbar \omega\}$

وهي أقل طاقة يمتلكها المتذبذب بخلاف الميكانيك التقليدي الذي يمكن أن تكون فيه طاقة المتذبذب مساوية للصفر وفق قانون بلانك ($E_n = nh\nu = n\hbar\omega$). وتقابل طاقة نقطة الصفر أوطاً مستوى يمكن أن يكون فيه المتذبذب، وهو ما يقابل نقطة الصفر المطلق في الميكانيك الإحصائي، ولهذا تُستعمل هذه النتيجة في تفسير العديد من الظواهر المتعلقة بهذا المجال. أما طاقات الحالات الأخرى (المتهيجة) التي تتميز بالأعداد الكمية (1, 2, 3) فهي:

$$\left(E_1 = \left(1 + \frac{1}{2}\right)h\nu = \frac{3}{2}h\nu\right), \left(E_2 = \frac{5}{2}h\nu\right), \left(E_3 = \frac{7}{2}h\nu\right)$$

وكما نلاحظ في الشكل 2-4 فإن الدوال الموجية تنفذ للمناطق ذوات الجهد المحظور وفق الميكانيك التقليدي والتي تمثلها النقاط ($\pm x_0, \pm x_1, \pm x_2, \pm x_3$) للحالة الأرضية والحالات المتهيجة الثلاثة الأولى للمتذبذب التوافقي. وكذلك فإن احتمالية تواجد الجسيم المتذبذب تصل إلى المنطقة المحظورة تقليدياً وتتناقص فيها أسياً. ويُلاحظ أيضاً أن فرق الطاقة بين مستوى وآخر يليه هو مقدار ثابت ($\Delta E = h\nu = \hbar\omega$) بخلاف الجسيم المحصور داخل صندوق الذي يزداد الفرق بين مستويات الطاقة فيه تدريجياً بزيادة قيمة n .



الشكل 2-4

(a) الدوال الذاتية الأربعة الأوطاً طاقة لمتذبذب توافقي ببعد واحد. (b) كثافة الاحتمالية لهذه الدوال.

بما أن فرق الطاقة بين أي مستويين متتاليين هو فرق ثابت ويُعطى بالعلاقة:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega = \hbar\sqrt{k/m} \quad \dots \dots 4.31$$

مهما كانت قيمة n فإن هذا الفرق يزداد بزيادة قيمة ثابت القوة k للمتذبذب التوافقي ونقصان قيمة الكتلة m ، والعكس صحيح. وعند الحدود القصوى عندما يقل k حتى يقترب من الصفر ($k \rightarrow 0$) فإن مستويات الطاقة تتقارب لدرجة التطابق فتبدو وكأنها متصلة ويتحول النظام إلى واقع الميكانيك التقليدي. والحال نفسه عندما تزداد كتلة المتذبذب بصورة كبيرة.

مثال ٤-١: جد قيمة الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط للحالة الأرضية وللحالة المتهيجة الأولى.

$$\Psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-y^2/2}$$

الحل :

حيث N_n : ثابت العيارية، و $H_n(y)$: متعدد حدود هيرميت بالدرجة n ، و $(y = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)$ و ω : التردد الزاوي، و m : كتلة الجسم المتذبذب.

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4}, \quad H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

* For ground state $n = 0 \Rightarrow$

$$N_0 = \frac{1}{\sqrt{2^0 0!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4}$$

$$H_0(y) = (-1)^0 e^{y^2} \frac{d^0}{dy^0} e^{-y^2} = e^{y^2} \cdot e^{-y^2} = 1$$

$$\Psi_0(y) = N_0 H_0(y) e^{-y^2/2} = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-y^2/2} = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-y^2/2}$$

* For first excited state: $n = 1 \Rightarrow$

$$N_1 = \frac{1}{\sqrt{2^1 1!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4}$$

$$H_1(y) = (-1)^1 e^{y^2} \frac{d^1}{dy^1} e^{-y^2} = -e^{y^2} (-2y) e^{-y^2} = 2y$$

$$\Psi_1(y) = N_1 H_1(y) e^{-y^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} (2y) e^{-y^2/2} = \left(\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} y e^{-y^2/2}$$

واجب بيتي: جد قيمة الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط للحالتين المتهيجتين الثانية والثالثة. (تلميح:

استفد من العلاقة (4.25).

مثال ٤-٢: جد التفاوت في الموقع للمتذبذب التوافقي البسيط للحالة الأرضية، ثم جد الانحراف القياسي.

الحل :

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} = \Psi_0^*(x) \quad \Leftrightarrow (n = 0) \text{ للحالة الأرضية}$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^* x \Psi_0 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} x \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0 \quad \text{because the function } (f(x) = x e^{-\alpha^2 x^2}) \text{ is odd.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^* x^2 \Psi_0 dx = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx\right) \quad \text{because the function } (f(x) = x^2 e^{-\alpha^2 x^2}) \text{ is even.} \end{aligned}$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3} \quad \text{من جداول التكاملات :}$$

$$\therefore \langle x^2 \rangle = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3} = \frac{1}{2\alpha^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{2\alpha^2} - 0 = \frac{1}{2\alpha^2} = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \text{التفاوت :}$$

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\alpha^2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad \text{الانحراف القياسي :}$$

مثال ٤-٣: بالاستفادة من نتائج المثال السابق، احسب القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة للمتذبذب التوافقي

للحالة الأرضية بدلالة الطاقة الكلية.

الحل :

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle = \frac{k}{4\alpha^2}$$

$$\therefore k = m\omega^2 \quad (\text{where } \omega = \sqrt{k/m}) \quad \text{and} \quad \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\therefore \langle V \rangle = \frac{m\omega^2}{4 m\omega/\hbar} = \frac{1}{4} \hbar\omega = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \hbar\omega\right)$$

$$\therefore E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad , \quad \therefore \langle V \rangle = \frac{1}{2} E_0$$

مثال ٤-٤: جد التفاوت في الزخم الخطي للمتذبذب التوافقي البسيط للحالة الأرضية. ثم جد الانحراف

القياسي.

$$(\Delta \hat{p}_x)^2 = \langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2 \quad , \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{الحل :}$$

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} = \Psi_0^*(x) \quad \Leftrightarrow (n=0) \text{ للحالة الأرضية}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^* \hat{p}_x \Psi_0 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= -i\hbar \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= -i\hbar \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} (-\alpha^2 x) e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= i\hbar \frac{\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0 \quad \text{because the function } (f(x) = x e^{-\alpha^2 x^2}) \text{ is odd.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^* \hat{p}_x^2 \Psi_0 dx, \quad \hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \langle \hat{p}_x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} e^{-\alpha^2 x^2/2}\right) dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} \frac{\partial}{\partial x} (-\alpha^2 x e^{-\alpha^2 x^2/2}) dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} (\alpha^4 x^2 - \alpha^2) e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} (\alpha^4 x^2 - \alpha^2) dx = -\hbar^2 \frac{\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} (\alpha^2 x^2 - 1) dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha^2 x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx \right) \end{aligned}$$

ولأن الدالتين $(x^2 e^{-\alpha^2 x^2})$ و $(e^{-\alpha^2 x^2})$ هما دالتان زوجيتان فيمكن تغيير حدود التكامل لكل منهما مع مضاعفة مقدار التكامل بالشكل التالي:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_x^2 \rangle &= -2\hbar^2 \frac{\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \left(\int_0^{\infty} \alpha^2 x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx - \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx \right) \\ \int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx &= \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3}, \quad \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \end{aligned} \quad \text{ومن جداول التكاملات :}$$

$$\therefore \langle \hat{p}_x^2 \rangle = -2\hbar^2 \frac{\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \left(\alpha^2 \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3} - \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\alpha^2}{2} - \alpha^2 \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\alpha^2}{2} - \frac{2\alpha^2}{2} \right) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2}$$

$$\therefore (\Delta \hat{p}_x)^2 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} - 0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} = \frac{\hbar^2 m\omega}{2} = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad \text{التفاوت :}$$

$$\Delta \hat{p}_x = \frac{\hbar \alpha}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \quad \text{الانحراف القياسي :}$$

مثال ٤-٥: اعتماداً على نتائج المثالين السابقين، جد معدل الطاقة الحركية للمتذبذب التوافقي للحالة الأرضية، ثم جد معدل الهاملتوني.

الحل :

$$\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar m \omega}{4m} = \frac{1}{4} \hbar \omega$$

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega + \frac{1}{4} \hbar \omega = \frac{1}{2} \hbar \omega = E_0$$

مثال ٤-٦: برهن أن $\left(\frac{1}{i\hbar} [\hat{v}, \hat{H}] = -\omega^2 x\right)$ للمتذبذب التوافقي البسيط. حيث $\hat{v}$: مؤثر السرعة، و $\hat{H}$: المؤثر الهاملتوني، و ω : التردد الزاوي.

الحل:

$$\hat{v} = \frac{\hat{p}_x}{m} = \frac{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

$$[\hat{v}, \hat{H}] = [\hat{v}, \hat{T} + \hat{V}] = [\hat{v}, \hat{T}] + [\hat{v}, \hat{V}] \quad \dots 1$$

$$[\hat{v}, \hat{T}] \Psi = \left[-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \Psi$$

$$= \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi$$

$$= \frac{i\hbar^3}{2m^2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi = \frac{i\hbar^3}{2m^2} \left(\frac{\partial^3}{\partial x^3} - \frac{\partial^3}{\partial x^3} \right) \Psi = 0 \quad \dots 2$$

$$[\hat{v}, \hat{V}] \Psi = \left[-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{1}{2} kx^2 \right] \Psi = \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{1}{2} kx^2 \right) \Psi - \left(\frac{1}{2} kx^2 \right) \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi$$

$$= -\frac{i\hbar k}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} x^2 \Psi - x^2 \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) = -\frac{i\hbar k}{2m} \left(2x \Psi + x^2 \frac{\partial}{\partial x} \Psi - x^2 \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right)$$

$$[\hat{v}, \hat{V}] \Psi = -\frac{i\hbar k}{2m} 2x \Psi = -\frac{i\hbar k}{m} x \Psi \quad \dots 3$$

By sub. eq. 3 and eq. 2 in eq. 1 $\Rightarrow [\hat{v}, \hat{H}] = 0 - \frac{i\hbar k}{m} x = -\frac{i\hbar k}{m} x$

$$\therefore \frac{1}{i\hbar} [\hat{v}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{i\hbar k}{m} x \right) = -\frac{k}{m} x = -\omega^2 x$$

٤-٤: الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي هي عيارية متعامدة

The Wave Functions of Harmonic Oscillator are Orthonormal

ذكرنا في الفصل الثاني شرط التعامد العياري للدوال الموجية ومثلناه بالمعادلة 2.49. وفي حالة المتذبذب التوافقي الخطي تُكتب المعادلة كما يلي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad \dots \dots 4.32$$

كما إن $\{\Psi_m^*(x) = \Psi_m(x)\}$ مثلما يتبين من علاقات سابقة.

$$\therefore \Psi_n(x) = N_n H_n(x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2}, \quad \Psi_m(x) = N_m H_m(x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2}$$

$$\therefore N_m N_n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m H_n dx = \delta_{mn}$$

$$\text{When } m = n \Rightarrow N_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_n^2 dx = 1 \quad (\Psi_n \text{ is normalized})$$

$$\text{When } m \neq n \Rightarrow N_m N_n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m H_n dx = 0 \quad (\Psi_m \text{ and } \Psi_n \text{ are orthogonal})$$

مثال ٧-٤: برهن أن الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي للحالة الأرضية وللحالة المثيعة الأولى هي عيارية متعامدة orthonormal.

الحل: ١- لإثبات العيارية في الحالة الأرضية:

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} = \Psi_0^*(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_n(x) dx = 1 \quad \text{وحيث أن شرط العيارية هو:}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^*(x) \Psi_0(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx \quad \text{because the function } (e^{-\alpha^2 x^2}) \text{ is even.}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \quad \text{ومن جداول التكاملات:}$$

$$\therefore \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} = 1 \quad (\therefore \Psi_0 \text{ is normalized})$$

٢- لإثبات العيارية في الحالة المثيعة الأولى:

$$\Psi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (2\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2 / 2} = \Psi_1^*(x)$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_1(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} (2\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} (2\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\
&= \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx \\
&= \frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx \quad \text{because } (x^2 e^{-\alpha^2 x^2}) \text{ is even function.}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx &= \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3} \\
\therefore \frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx &= \frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3} = 1 \quad (\because \Psi_1 \text{ is normalized})
\end{aligned}$$

٣- لإثبات التعامد بين الدالتين Ψ_1 و Ψ_0 يلزم تحقق شرط التعامد:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_0(x) dx &= 0 \\
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_0(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} (2\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\
&= 2\alpha \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0 \quad \text{because } (x e^{-\alpha^2 x^2}) \text{ is odd function.}
\end{aligned}$$

مثال ٤-٨: جسيم خاضع لجهد متذبذب توافقي وينطلق في الحالة: $\Psi(x, 0) = A[3\Psi_0(x) + 4\Psi_1(x)]$ ، جد قيمة الثابت A .

الحل: بما أن الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي هي عيارية متعامدة، فإن:

$$\begin{aligned}
1 &= \int \Psi(x, 0)^* \Psi(x, 0) dx = \int (A[3\Psi_0(x) + 4\Psi_1(x)])^* (A[3\Psi_0(x) + 4\Psi_1(x)]) dx \\
&= |A|^2 \int (9\Psi_0^* \Psi_0 + 12\Psi_0^* \Psi_1 + 12\Psi_1^* \Psi_0 + 16\Psi_1^* \Psi_1) dx \\
&= |A|^2 (9 + 0 + 0 + 16) = 25|A|^2 \Rightarrow A = 1/5
\end{aligned}$$

٤-٥: مقارنة النظرية التقليدية مع النظرية الكمية

Comparison of Classical Theory with Quantum Theory

تختلف النتائج التي حصلنا عليها في دراسة المتذبذب التوافقي بين النظرية التقليدية والنظرية

الكمية، وكما يلي:

١- طاقة الحالة الدنيا لا تساوي صفراً في الميكانيك الكمي، بينما في الميكانيك التقليدي تساوي الصفر.

٢- مستويات الطاقة في الميكانيك الكمي منفصلة عن بعض discrete بينما في الميكانيك التقليدي متصلة continuous.

٣- في النظرية التقليدية تتناسب كثافة الاحتمالية عكسياً مع الانطلاق، أما في النظرية الكمية فإنها تُعطى بالكمية $|\Psi_n(x)|^2$ مما ينتج تصرفاً مختلفاً عن تصرف المتذبذب التقليدي.

ولتوضيح اختلاف النتائج بين النظريتين:

١- إن قيمة طاقة نقطة الصفر E_0 ضئيلة ولا تقاس بتجربة عيانية. فمثلاً لمتذبذب يبلغ تردده الزاوي $(\omega = 10^6 \text{ Hz})$ فإن $(E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega)$ تعطي النتيجة العددية: $(E_0 \cong 0.5 \times 10^{-28} \text{ J})$.

٢- إن الفرق بين أي مستويين متتاليين للطاقة هو $\hbar \omega$ ويساوي تقريباً 10^{-28} J للمتذبذب المذكور في الفقرة 1 وهو مقدار ضئيل جداً، وبالتالي فلا عجب إذا بدت مستويات الطاقة في النظرية التقليدية متصلة وهي التي يكون التردد الزاوي فيها أقل بكثير.

٣- لتجربة عيانية بطاقة كلية تقارب 10^{-7} J ناتجة عن تردد زاوي مقداره 10^3 Hz فإن $n \sim 10^{24}$ (كيف؟). ولمثل هذه القيم العالية لـ n يمكن قياس معدل الاحتمالية لعدة ذبذبات فقط لدالة الموجة. وهذا المعدل يتبع النظرية التقليدية.

٤-٦: الدالة المولدة The Generating Function

هنالك عدد من العلاقات تتضمن متعدد حدود هيرميت وتنفع لحساب خواص المتذبذب التوافقي (وبعض هذه العلاقات مرّ علينا سابقاً)، وكما يلي:

١- الدالة المولدة:

$$G(t, y) = e^{y^2 - (t-y)^2} = e^{-t^2 + 2ty} \quad \dots \dots 4.33$$

ويمكن الحصول على متعدّدات حدود هيرميت $H_n(y)$ من الدالة المولدة:

$$e^{-t^2 + 2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(y) \quad \dots \dots 4.34$$

حيث يمثل $H_n(y)$ المشتقة ذات الرتبة n للدالة المولدة $(e^{-t^2 + 2ty})$ بالنسبة لـ t عند $(t = 0)$ ، لاحظ المثال ٤-١٠.

٢- صيغة رودريغيس Rodrigues formula :

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad \dots \dots 4.22$$

٣- التعامد والعيارية Orthogonality and Normality :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) dy = 0 \quad \text{for } m \neq n \quad \dots \dots 4.35$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} (H_n(y))^2 dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad \text{for } m = n \quad \dots \dots 4.36$$

ويمكن التأكد من صحة هاتين المعادلتين بالتعويض ببعض قيم $H_n(y)$ في المعادلة 4.25. كما إنه من الممكن تعيير $H_n(y)$ بالضرب بـ $\left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}\right)$.

٤- التماثل Parity :

$$H_n(y) = (-1)^n H_n(-y) \quad \dots \dots 4.37$$

$$H_{2n-1}(0) = 0 \quad \dots \dots 4.38$$

٥- العلاقة التكرارية Recurrence relation :

إذا اشتقنا متعدد حدود من الرتبة n فسنحصل على متعدد حدود من الرتبة $(n-1)$. وسيكون الأمر لمتعددات حدود هيرميت كما في المعادلة 4.39:

$$a - \frac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y) \quad \dots \dots 4.39$$

$$b - H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y) \quad \dots \dots 4.40$$

٦- معادلة هيرميت Hermite Equation :

$$H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0 \quad \dots \dots 4.21$$

مثال ٩-٤: أ- استخليم صيغة رودريغيس لاشتقاق H_3 و H_4 .

ب- استخدم العلاقة التكرارية 4.40 مع نتيجة جواب "أ" لاستخراج H_5 و H_6 .

ج- تحقق من المعادلة التكرارية 4.39 باشتقاق H_5 و H_6 .

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad \text{الحل : "أ" -}$$

$$\frac{d}{dy} e^{-y^2} = -2ye^{-y^2} ; \quad \left(\frac{d}{dy}\right)^2 e^{-y^2} = \frac{d}{dy} (-2ye^{-y^2}) = -2e^{-y^2} + 4y^2 e^{-y^2} ;$$

$$\begin{aligned} * \left(\frac{d}{dy}\right)^3 e^{-y^2} &= \frac{d}{dy} [-2e^{-y^2} + 4y^2 e^{-y^2}] \\ &= 4ye^{-y^2} + 8ye^{-y^2} - 8y^3 e^{-y^2} = 12ye^{-y^2} - 8y^3 e^{-y^2} = (12y - 8y^3) e^{-y^2} ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} * \left(\frac{d}{dy}\right)^4 e^{-y^2} &= \frac{d}{dy} [12ye^{-y^2} - 8y^3 e^{-y^2}] = 12e^{-y^2} - 24y^2 e^{-y^2} - 24y^2 e^{-y^2} + 16y^4 e^{-y^2} \\ &= 12e^{-y^2} - 48y^2 e^{-y^2} + 16y^4 e^{-y^2} = (12 - 48y^2 + 16y^4) e^{-y^2} . \end{aligned}$$

$$\therefore H_3(y) = (-1)^3 e^{y^2} \left(\frac{d}{dy}\right)^3 e^{-y^2} = -e^{y^2} (12y - 8y^3) e^{-y^2} = -12y + 8y^3 ;$$

$$H_4(y) = (-1)^4 e^{y^2} \left(\frac{d}{dy} \right)^4 e^{-y^2} = e^{y^2} (12 - 48y^2 + 16y^4) e^{-y^2} = 12 - 48y^2 + 16y^4.$$

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y) \quad \text{ـ "بـ"}$$

$$\begin{aligned} H_5(y) &= 2yH_4 - 2(4)H_3 = 2yH_4 - 8H_3 \\ &= 2y(12 - 48y^2 + 16y^4) - 8(-12y + 8y^3) = 120y - 160y^3 + 32y^5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_6(y) &= 2yH_5 - 2(5)H_4 = 2yH_5 - 10H_4 \\ &= 2y(120y - 160y^3 + 32y^5) - 10(12 - 48y^2 + 16y^4) \\ &= -120 + 720y^2 - 480y^4 + 64y^6 \end{aligned}$$

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y) \quad \text{ـ "جـ"}$$

$$\begin{aligned} \frac{dH_5}{dy} &= \frac{d(120y - 160y^3 + 32y^5)}{dy} = 120 - 480y^2 + 160y^4 \\ &= 10(12 - 48y^2 + 16y^4) = 10H_4 = (2)(5)H_4. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dH_6}{dy} &= \frac{d(-120 + 720y^2 - 480y^4 + 64y^6)}{dy} = 1440y - 1920y^3 + 384y^5 \\ &= 12(120y - 160y^3 + 32y^5) = (2)(6)H_5 \end{aligned}$$

مثال ٤-١٠: استعمل الدالة المولدة لإيجاد H_0 و H_1 و H_2 و H_3 .

الحل: بما أن $H_n(y)$ يمثل المشتقة ذات الرتبة n للدالة المولدة (e^{-t^2+2ty}) بالنسبة لـ t عند $(t = 0)$ ، إذن:

$$* \left(\frac{d}{dt} \right)^0 (e^{-t^2+2ty}) = e^{-t^2+2ty}; \text{ setting } t = 0 \Rightarrow H_0(y) = 1$$

$$* \left(\frac{d}{dt} \right)^1 (e^{-t^2+2ty}) = (-2t + 2y)e^{-t^2+2ty}; \text{ setting } t = 0 \Rightarrow H_1(y) = 2y$$

$$\begin{aligned} * \left(\frac{d}{dt} \right)^2 (e^{-t^2+2ty}) &= \frac{d}{dt} [(-2t + 2y)e^{-t^2+2ty}] = -2e^{-t^2+2ty} + (-2t + 2y)^2 e^{-t^2+2ty} \\ &= [-2 + (-2t + 2y)^2] e^{-t^2+2ty}; \end{aligned}$$

$$\text{setting } t = 0 \Rightarrow H_2(y) = -2 + 4y^2$$

$$\begin{aligned} * \left(\frac{d}{dt} \right)^3 (e^{-t^2+2ty}) &= \frac{d}{dt} \{ [-2 + (-2t + 2y)^2] e^{-t^2+2ty} \} \\ &= \{ 2(-2t + 2y)(-2) + [-2 + (-2t + 2y)^2](-2t + 2y) \} e^{-t^2+2ty}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{setting } t = 0 \Rightarrow H_3(y) &= \{ 2(2y)(-2) + [-2 + (2y)^2](2y) \} \\ &= -8y + (-2 + 4y^2)(2y) = -8y - 4y + 8y^3 = -12y + 8y^3 \end{aligned}$$

مثال ٤-١١: أثبت خاصية التماثل $H_n(y) = (-1)^n H_n(-y)$ باستخدام القيمة الفردية ($n = 1$) والقيمة الزوجية ($n = 2$).

الحل: نستخدم صيغة رودريغيس $H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$
 * عندما تكون قيمة n فردية وتساوي 1 :

$$H_1(y) = (-1)^1 e^{y^2} \frac{d^1}{dy^1} e^{-y^2} = -e^{y^2} (-2y) e^{-y^2} = 2y$$

$$H_1(-y) = 2(-y) = -2y = -H_1(y)$$

$$\therefore H_n(-y) = -H_n(y) \text{ when } n \text{ is odd}$$

* وعندما تكون قيمة n زوجية وتساوي 2 :

$$H_2(y) = (-1)^2 e^{y^2} \frac{d^2}{dy^2} e^{-y^2} = e^{-y^2} \frac{d}{dy} \left(\frac{d}{dy} e^{-y^2} \right) = e^{-y^2} \frac{d}{dy} (-2ye^{-y^2})$$

$$= e^{-y^2} (-2e^{-y^2} + 4y^2 e^{-y^2}) = 4y^2 - 2$$

$$H_2(-y) = 4(-y)^2 - 2 = 4y^2 - 2 = H_2(y)$$

$$\therefore H_n(-y) = H_n(y) \text{ when } n \text{ is even}$$

The raising and lowering operators

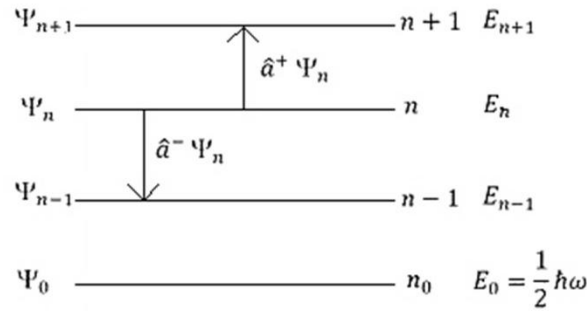
٧-٤: المؤثرات الرافعة والخافضة

يمكن إيجاد الدالة الموجية ذات الرتبة n الأعلى والأوطأ مباشرة بتسليط مؤثرين يُعرفان بمؤثري الرفع والخفض أو مؤثري الاستحداث والإفناء creation and destruction operators أو يُسميان معاً بالمؤثر السلّم ladder operator، وكما يلي:

$$* \quad \hat{a}^+ \Psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \Psi_n(y) = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}(y) \quad \dots \dots 4.41$$

$$* \quad \hat{a}^- \Psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \Psi_n(y) = \sqrt{n} \Psi_{n-1}(y) \quad \dots \dots 4.42$$

حيث يسمى المؤثر $\left\{ \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \right\}$ بمؤثر الرفع raising operator والذي حينما يؤثر على دالة الموجة $\Psi_n(y)$ من الدرجة n فإنه سيحولها إلى دالة موجة تصف مستوى أعلى بدرجة واحدة Ψ_{n+1} . ويسمى المؤثر (الذي يُرمز له بـ $\hat{a}^-$ أو $\hat{a}$) بمؤثر الخفض lowering operator $\left\{ \hat{a}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \right\}$ والذي حينما يؤثر على دالة الموجة $\Psi_n(y)$ من الدرجة n فإنه سيحولها إلى دالة موجة تصف مستوى أوطأ بدرجة واحدة Ψ_{n-1} .



الشكل 3-4: مؤثر الرفع والخفض.

مثال ٤-١٢: برهن العلاقة $\left\{ y\Psi_n(y) = \sqrt{\frac{n}{2}}\Psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\Psi_{n+1}(y) \right\}$ للمتذبذب التوافقي.

$$\Psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-y^2/2} \quad * y$$

الحل :

$$\Rightarrow y\Psi_n(y) = N_n e^{-y^2/2} y H_n(y)$$

ومن العلاقة التكرارية:

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y) \Rightarrow yH_n(y) = \frac{1}{2}H_{n+1}(y) + nH_{n-1}(y)$$

$$\therefore y\Psi_n(y) = N_n e^{-y^2/2} \left\{ \frac{1}{2}H_{n+1} + nH_{n-1} \right\} = e^{-y^2/2} \left\{ \frac{1}{2}N_n H_{n+1} + nN_n H_{n-1} \right\}$$

$$\because N_n = \sqrt{\left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)} \Rightarrow y\Psi_n(y) = e^{-y^2/2} \left\{ \frac{\sqrt{\alpha}}{2\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_{n+1} + \frac{n\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right\}$$

$$y\Psi_n(y) = e^{-y^2/2} \left\{ \frac{\sqrt{2}\sqrt{n+1}\sqrt{\alpha}}{2\sqrt{2^{n+1}(n+1)! \sqrt{\pi}}} H_{n+1} + \frac{n\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2}\sqrt{n}\sqrt{2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right\}$$

$$= e^{-y^2/2} \left\{ \frac{\sqrt{n+1}\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2}\sqrt{2^{n+1}(n+1)! \sqrt{\pi}}} H_{n+1} + \frac{n\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2n}\sqrt{2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right\}$$

$$= e^{-y^2/2} \left\{ \sqrt{\frac{n+1}{2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^{n+1}(n+1)! \sqrt{\pi}}} H_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right\}$$

$$= e^{-y^2/2} \left\{ \sqrt{\frac{n+1}{2}} N_{n+1} H_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} N_{n-1} H_{n-1} \right\}$$

$$= \sqrt{\frac{n+1}{2}} N_{n+1} H_{n+1} e^{-y^2/2} + \sqrt{\frac{n}{2}} N_{n-1} H_{n-1} e^{-y^2/2}$$

$$\therefore y\Psi_n(y) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}(y) + \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}(y)$$

مثال ١٣-٤: برهن العلاقة $\left\{ \frac{d\Psi_n(y)}{dy} = -y\Psi_n(y) + \sqrt{2n} \Psi_{n-1}(y) \right\}$ للمتذبذب التوافقي.

الحل :

$$\because \Psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-y^2/2}$$

$$\therefore \frac{d\Psi_n(y)}{dy} = N_n H_n e^{-y^2/2} (-y) + N_n e^{-y^2/2} \frac{dH_n}{dy}$$

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2n H_{n-1}(y)$$

ومن العلاقة التكرارية :

$$\therefore \frac{d\Psi_n(y)}{dy} = -y\Psi_n + N_n e^{-y^2/2} (2n H_{n-1})$$

$$\because N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2}$$

$$\begin{aligned} \therefore \frac{d\Psi_n(y)}{dy} &= -y\Psi_n + e^{-y^2/2} \left(2n \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right) \\ &= -y\Psi_n + e^{-y^2/2} \left(2n \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2 \times 2^{n-1} \times n \times (n-1)! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right) \\ &= -y\Psi_n + e^{-y^2/2} \left(\frac{2n}{\sqrt{2n} \sqrt{2^{n-1} (n-1)! \sqrt{\pi}}} \sqrt{\alpha} H_{n-1} \right) \\ &= -y\Psi_n + e^{-y^2/2} \left(\sqrt{2n} \sqrt{\frac{\alpha}{2^{n-1} (n-1)! \sqrt{\pi}}} H_{n-1} \right) \\ &= -y\Psi_n + \sqrt{2n} N_{n-1} e^{-y^2/2} H_{n-1} \\ \therefore \frac{d\Psi_n(y)}{dy} &= -y\Psi_n(y) + \sqrt{2n} \Psi_{n-1}(y) \end{aligned}$$

مثال ١٤-٤: برهن العلاقة التالية لمؤثر الرفع للمتذبذب التوافقي:

$$\left\{ \hat{a}^+ \Psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \Psi_n(y) = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}(y) \right\}$$

الحل: من المثال السابق:

$$\frac{d\Psi_n(y)}{dy} = -y\Psi_n(y) + \sqrt{2n} \Psi_{n-1}(y) \quad \dots 1$$

ومن المثال الأسبق:

$$y\Psi_n(y) = \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}(y) \Rightarrow$$

$$\sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}(y) = y\Psi_n(y) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}(y) \Rightarrow$$

$$\Psi_{n-1}(y) = \sqrt{\frac{2}{n}} \left(y\Psi_n - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} \right)$$

By sub. in eq. 1 $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_n}{dy} &= -y\Psi_n + \sqrt{2n} \sqrt{\frac{2}{n}} \left(y\Psi_n - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} \right) = -y\Psi_n + 2 \left(y\Psi_n - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} \right) \\ &= -y\Psi_n + 2y\Psi_n - \sqrt{2}\sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \\ &= y\Psi_n - \sqrt{2}\sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \end{aligned}$$

$$\frac{d\Psi_n}{dy} - y\Psi_n = -\sqrt{2}\sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \quad \} \times -1 \Rightarrow$$

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right) \Psi_n = \sqrt{2}\sqrt{n+1} \Psi_{n+1}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}$$

$$\therefore \hat{a}^+ \Psi_n(y) = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}(y) \quad \text{where } \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)$$

واجب بيتي: برهن العلاقة التالية لمؤثر الخفض للمتذبذب التوافقي:

$$\hat{a}^- \Psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \Psi_n(y) = \sqrt{n} \Psi_{n-1}(y)$$

مثال ١٥-٤: برهن العلاقة التالية لمؤثر الرفع للمتذبذب التوافقي: $\hat{a}^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x)$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \quad , \quad y = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad , \quad \frac{d}{dy} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \quad \text{الحل :}$$

$$\therefore \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx}$$

$$\because \hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad , \quad \therefore \frac{d}{dx} = \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x = \frac{m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$$

$$\therefore \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x)$$

واجب بيتي: برهن العلاقة التالية لمؤثر الخفض للمتذبذب التوافقي: $\hat{a}^- \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x)$

مثال ١٦-٤: أثبت العلاقة: $\hat{H} = (\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{1}{2}) \hbar \omega$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad \text{الحل :}$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x) \quad , \quad \hat{a}^- = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x) \quad \text{ومما سبق :}$$

$$\hat{a}^+ \hat{a}^- = \frac{1}{2m\hbar\omega} (m^2\omega^2\hat{x}^2 + im\omega\hat{x}\hat{p}_x - im\omega\hat{p}_x\hat{x} + \hat{p}_x^2)$$

$$\hat{a}^+ \hat{a}^- = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2\hbar} + \frac{i\hat{x}\hat{p}_x}{2\hbar} - \frac{i\hat{p}_x\hat{x}}{2\hbar} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m\hbar\omega} \quad \left. \vphantom{\frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2\hbar}} \right\} * \hbar\omega$$

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ \hat{a}^- \hbar\omega &= \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + \frac{i\omega\hat{x}\hat{p}_x}{2} - \frac{i\omega\hat{p}_x\hat{x}}{2} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \\ &= \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + \frac{i\omega}{2} (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + \frac{i\omega}{2} [\hat{x}, \hat{p}_x] + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \end{aligned}$$

$$\text{But } [\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi = x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x\Psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \right) = i\hbar \Psi$$

$$\therefore [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

$$\therefore \hat{a}^+ \hat{a}^- \hbar\omega = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + \frac{i\omega}{2} i\hbar + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$$

$$\hat{a}^+ \hat{a}^- \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$$

$$\therefore \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega = \hat{H}$$

واجب بيتي: أثبت العلاقة: $\hat{H} = (\hat{a}^- \hat{a}^+ - \frac{1}{2}) \hbar\omega$

مثال ١٧-٤: أثبت العلاقة: $[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1$

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^- \quad \text{الحل :}$$

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] \Psi_n = (\hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^-) \Psi_n = \hat{a}^- \hat{a}^+ \Psi_n - \hat{a}^+ \hat{a}^- \Psi_n$$

$$= \hat{a}^- \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} - \hat{a}^+ \sqrt{n} \Psi_{n-1} \quad (\text{from eq. 4.41 \& 4.42})$$

$$= \sqrt{n+1} \hat{a}^- \Psi_{n+1} - \sqrt{n} \hat{a}^+ \Psi_{n-1}$$

$$= \sqrt{n+1} \sqrt{n+1} \Psi_n - \sqrt{n} \sqrt{n} \Psi_n \quad (\text{from eq. 4.41 \& 4.42})$$

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] \Psi_n = (n+1 - n) \Psi_n = \Psi_n$$

$$\therefore [\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1$$

حيث $\langle r \rangle$ هي القيمة المتوقعة لمتجه الموضع r للجسيم، وهي لا تعني أنها القيمة التي نتوقعها بعد إجراء قياس واحد فقط (أي القيمة الأكثر احتمالاً)، بل هي عبارة عن معدل عدد كبير وكافٍ من القياسات الآتية التي أجريت على r لجسيمات مماثلة لها نفس دالة الموجة $\Psi(r, t)$ عند نفس الفترة الزمنية بحيث تُسجل القيم الظاهرة لـ r متى ما وجدنا الجسيم. أو إنها معدل القياسات المتكررة على مجموعة من أنظمة متماثلة وليست معدل القياسات المتكررة على نظام واحد أو أنظمة محددة بنفسها. وبالتالي فإن الميكانيك الكمي لا يجزم بنتيجة قياس واحد لموضع الجسيم، بل يتنبأ بقيمة دقيقة لمعدل عدد كبير من القياسات. ويمكن تعميم هذه العلاقة إلى متغيرات فيزيائية أخرى، وكما يلي:

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r}{\int \Psi^* \Psi d^3r} \quad \dots \dots 2.33$$

وإذا كانت الدالة عيارية، أي: $\int \Psi^* \Psi d^3r = 1$ فإن القيمة المتوقعة تأخذ الشكل التالي:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r = \int \hat{A} |\Psi|^2 d^3r$$

وكأمثلة على أخذ القيمة المتوقعة لبعض المتغيرات:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx = \int x |\Psi|^2 dx \quad \dots \dots 2.34 \quad \text{١- الموقع لبعده واحد:}$$

$$\langle p_x \rangle = \int \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx \quad \text{٢- الزخم لبعده واحد:}$$

$$\therefore \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore \langle p_x \rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \quad \dots \dots 2.35$$

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{E} \Psi dx \quad \text{٣- الطاقة لبعده واحد:}$$

$$\therefore \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \therefore \langle E \rangle = \int \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi dx = i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx \quad \dots \dots 2.36$$

$$\langle T \rangle = \int \Psi^* \hat{T} \Psi dx \quad \text{٤- الطاقة الحركية لبعده واحد:}$$

$$\therefore \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\therefore \langle T \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi dx \quad \dots \dots 2.37$$

$$\langle T \rangle = \int \Psi^* \hat{T} \Psi d^3r \quad \text{أما الطاقة الحركية لثلاثة أبعاد:}$$

$$\therefore \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \quad \therefore \langle T \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Psi d^3r = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3r$$

مثال: اكتب مؤثر السرعة $\hat{v}$ وقيمه المتوقعة.

$$P = mv, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{v} = \frac{\hat{p}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{الحل :}$$

The expectation value would be:

$$\langle v \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

The Variance

١٠-٢: التفاوت

يُعرف التفاوت بصورة عامة بأنه متوسط مربع انحراف القياس عن القيمة المتوقعة.

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle A^2 \rangle - \langle 2A \langle A \rangle \rangle + \langle \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2$$

$$\therefore (\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad \dots \dots 2.38$$

حيث A : قياس قيمة نقطة معينة. و $\langle A \rangle$: معدل قياسات متعددة أو "القيمة المتوقعة".

أما الانحراف القياسي standard deviation الذي يمثل اللادقة في حساب القيمة المتوقعة

للقياس فيعرف بأنه الجذر التربيعي للتفاوت:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} \quad \dots \dots 2.39$$

وكتطبيق على هذا التعريف الرياضي: لكي نحسب اللادقة (اللا تحديد) في حاصل ضرب موقع

الجسيم والزخم $(\Delta x \Delta p)$ علينا أولاً أن نعرف معنى Δx و Δp . فاللا دقة في موقع الجسيم Δx تُعرف بأنها

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} \quad \text{أي: } \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

ويمثل مربع اللادقة في موقع الجسيم التفاوت في الموقع:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad \dots \dots 2.40$$

$$\langle x^2 \rangle = \int \Psi^* x^2 \Psi dx \quad \text{أي: } \langle x^2 \rangle = \int \Psi^* x^2 \Psi dx$$

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx \quad \text{أي: } \langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx$$

$$\langle x \rangle^2 = \left(\int \Psi^* x \Psi dx \right)^2 \quad \text{أي: } \langle x \rangle^2 = \left(\int \Psi^* x \Psi dx \right)^2$$

ثم نعوض في المعادلة 2.40 لحساب التفاوت (اللا دقة) في الموقع Δx بعد جذر النتيجة النهائية.

أما اللادقة في زخم الجسيم Δp فتُعرف بأنها الجذر التربيعي لمتوسط مربع انحراف الزخم عن

القيمة المتوقعة.

$$(\Delta p) = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \quad \dots \dots 2.41$$

بوجود العدد العقدي i في تعاريف المؤثرات مثل $(\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x})$ أو $(\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t})$ حقاً لنا أن نتسائل فيما إذا كانت القيم المتوقعة expectation values لهذه المؤثرات قيماً حقيقية. ونحن نريد لها أن تكون حقيقية وإلا فإن القيم المتوقعة لـ $\hat{p}$ أو $\hat{E}$ سوف لا تتوافق مع الزخم أو الطاقة التي نقيسها فعلاً في العالم الحقيقي. والآن فلنختبر إن كانت القيم المتوقعة لـ $\hat{p}$ و $\hat{E}$ حقيقية. مثال: بين أن القيمة المتوقعة لمؤثر الزخم حقيقية (أي $\langle \hat{p} \rangle^* = \langle \hat{p} \rangle$).

الحل: من المعادلة 2.35:

$$\begin{aligned}\langle \hat{p} \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \\ \langle \hat{p} \rangle^* &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi d\Psi^* \\ &= i\hbar \left(\Psi \Psi^* \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* d\Psi \right) \quad (\text{integration by parts})\end{aligned}$$

ولجسيم محصور ضمن حيز فإن الضرب $\Psi_1^* \Psi_2$ يتجه للصفر عند كل نقطة نهاية لأن الدالة الموجية تقترب من الصفر عند المسافات الطويلة.

$$\therefore \langle \hat{p} \rangle^* = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* d\Psi = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \langle \hat{p} \rangle$$

والآن نقول: إن المؤثر الذي له قيمة متوقعة حقيقية يُدعى مؤثراً هرميتياً.

إن المؤثرات التي واجهناها حتى الآن كمؤثر الزخم $\hat{p}$ ومؤثر الطاقة الحركية $\hat{T}$ ومؤثر الطاقة $\hat{E}$ لها جميعاً قيم متوقعة حقيقية، وبالتالي فإن جميعها مؤثرات هرميتية. وفي الواقع فإنه يبدو بصورة واضحة ومعقولة أن جميع المتغيرات الظاهرة observables في ميكانيك الكم يجب أن تكون حقيقية.

إن نتائج القياسات الفيزيائية هي أرقام حقيقية. وهذا يعني أن النموذج الفيزيائي الواقعي يقتصر على التنبؤ بأرقام حقيقية. وتلعب المؤثرات الهرميتية (التي سُميت هكذا نسبة لعالم الرياضيات Hermite) دوراً خاصاً في الميكانيك الكمي لأن هذه المؤثرات تضمن قيماً ذاتية حقيقية. ولهذا فإن النظام الفيزيائي الموصوف باستخدام مؤثر هرميتي سيزودنا بمعلومات عن كميات قابلة للقياس. ويسمى المؤثر $\hat{A}$ مؤثراً هرميتياً خطأً إذا حقق العلاقة التالية:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* (\hat{A} \Psi_2) d^3r = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 (\hat{A}^* \Psi_1^*) d^3r = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}^* \Psi_1^*) \Psi_2 d^3r \quad \dots \dots 2.42$$

حيث إن Ψ_1 و Ψ_2 هما دالتان مقبولتان فيزيائياً. وتمثلان الحالات الفيزيائية التي يتواجد بها النظام. وتوجد خاصيتان للمؤثرات الهرميتية:

١- القيم الذاتية للمؤثر الهرميتي هي قيم حقيقية.

٢- الدوال الذاتية المرافقة للمؤثر الهرميتي هي دوال متعامدة orthogonal.

لإثبات الخاصية الأولى نفرض أن $\hat{A}$ يمثل المؤثر الهرميتي، و Ψ الدالة الذاتية له، ولهذا فإن القيمة الذاتية له تُعطى بالعلاقة 2.31:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \quad \dots \dots 2.43$$

وبأخذ المرافق المعقد (complex conjugate) لهذه المعادلة:

$$\hat{A}^*\Psi^* = a^*\Psi^* \quad \dots \dots 2.44$$

وبضرب المعادلة 2.43 بـ Ψ^* من اليسار وضرب المعادلة 2.44 من اليسار أيضاً بـ Ψ نحصل على:

$$\Psi^*\hat{A}\Psi = \Psi^*a\Psi \quad \dots \dots 2.43'$$

$$\Psi\hat{A}^*\Psi^* = \Psi a^*\Psi^* \quad \dots \dots 2.44'$$

وبعد إجراء التكامل لكل الفضاء على طرفي المعادلتين:

$$\int \Psi^*\hat{A}\Psi dV = a \int \Psi^*\Psi dV \quad \dots \dots 2.43''$$

$$\int \Psi\hat{A}^*\Psi^* dV = a^* \int \Psi\Psi^* dV \quad \dots \dots 2.44''$$

وحسب تعريف المؤثر الهرميتي (المعادلة 2.42)، ولأن $(\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi)$ فإن الطرفين الأيسرين من المعادلتين متساويان. أي إن:

$$\int \Psi^*\hat{A}\Psi dV = \int \Psi\hat{A}^*\Psi^* dV$$

وبالتالي فإن الطرفين الأيمنين متساويان أيضاً:

$$a \int \Psi^*\Psi dV = a^* \int \Psi\Psi^* dV$$

$$\therefore \int \Psi^*\Psi dV = 1 \quad \text{normalization condition} \quad \rightarrow \quad \therefore a = a^*$$

وهذا يعني أن القيم الذاتية للمؤثر الهرميتي هي قيم حقيقية.

لإثبات الخاصية الثانية نفرض أن Ψ_1 و Ψ_2 هما دالتان ذاتيتان للمؤثر الهرميتي $\hat{A}$ ، والقيم الذاتية

هي a_1 و a_2 على التوالي و $(a_2 \neq a_1)$. وبتطبيق معادلة القيمة الذاتية 2.31 على هاتين الدالتين:

$$\hat{A}\Psi_1 = a_1\Psi_1 \quad \dots \dots 2.45$$

$$\hat{A}\Psi_2 = a_2\Psi_2 \quad \dots \dots 2.46$$

وبأخذ المرافق المعقد للمعادلة 2.45 :

$$\hat{A}^* \Psi_1^* = a_1^* \Psi_1^* \quad \dots \dots 2.45'$$

ولأن القيم الذاتية للمؤثر الهرميتي هي قيم حقيقية حسب الخاصية الأولى ($a_1^* = a_1$)

$$\therefore \hat{A}^* \Psi_1^* = a_1 \Psi_1^* \quad \dots \dots 2.45''$$

نضرب المعادلة 2.46 من اليسار بـ Ψ_1^* والمعادلة 2.45'' من اليسار بـ Ψ_2 ونكامل على كل الفضاء.

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dV = \int \Psi_1^* a_2 \Psi_2 dV \quad \dots \dots 2.46'$$

$$\int \Psi_2 \hat{A}^* \Psi_1^* dV = \int \Psi_2 a_1 \Psi_1^* dV \quad \dots \dots 2.45'''$$

وبطرح المعادلتين الأخيرتين من بعض: ($eq. 2.45''' - eq. 2.46' \Rightarrow$)

$$\int \Psi_2 \hat{A}^* \Psi_1^* dV - \int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dV = (a_1 - a_2) \int \Psi_2 \Psi_1^* dV$$

الطرف الأيسر من هذه المعادلة يساوي صفراً لانطباق تعريف المؤثر الهرميتي عليه (المعادلة 2.42).

$$\therefore (a_1 - a_2) \int \Psi_2 \Psi_1^* dV = 0 \quad \dots \dots 2.47$$

$$\therefore a_2 \neq a_1 \rightarrow a_1 - a_2 \neq 0$$

$$\therefore \int \Psi_2 \Psi_1^* dV = 0 \quad \dots \dots 2.47'$$

وهذا يعني أن الدالتين Ψ_1 و Ψ_2 متعامدتان. وبهذا أثبتنا أن الدوال الذاتية المرافقة للمؤثر الهرميتي والعائدة لقيم ذاتية مختلفة $a_2 \neq a_1$ هي دوال متعامدة.

مثال: برهن أن $\hat{p}_x$ هو مؤثر هرميتي.

الحل:

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{p}_x \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \hat{p}_x^* \Psi_1^* dx \quad \text{Hermitian operator condition}$$

$$\therefore \hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_2 dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{d}{dx} \Psi_2 dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* d\Psi_2 \quad \dots \dots 1$$

Integration by parts: $\int u dv = uv - \int v du$

Let $u = \Psi_1^*$ and $dv = d\Psi_2 \rightarrow v = \Psi_2$

$$\therefore -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* d\Psi_2 = -i\hbar \left(\Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 d\Psi_1^* \right)$$

ولجسيم مقيد (محصور ضمن حيز) فإن الضرب $\Psi_1^* \Psi_2$ يتجه للصفر عند كل نقطة نهاية لأن الدالة الموجية تقترب من الصفر عند المسافات الطويلة.

$$\therefore -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* d\Psi_2 = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 d\Psi_1^* \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi_2 dx = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 d\Psi_1^* \quad \left] \times \frac{dx}{dx} \right. \Leftrightarrow \text{المعادلة 1}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi_2 dx = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{d}{dx} \Psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \left(i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi_1^* dx$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \rightarrow \hat{p}_x^* = \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^* = \left(i\hbar \frac{d}{dx}\right)$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{p}_x \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \hat{p}_x^* \Psi_1^* dx$$

إذن قد تحقق شرط المؤثر الهرميتي. وعليه فإن مؤثر الزخم $\hat{p}_x$ هو مؤثر هرميتي.

واجب بيتي: أثبت أن مؤثر الطاقة الحركية الذي يعطى بالعلاقة $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\right)$ هو مؤثر هرميتي.

١٢-٢: التعامد العياري Orthonormal

يمكن وصف حالة النظام الفيزيائي باستخدام دالة الموجة Ψ ، والنظام له عدة حالات يمكن وصف كل منها بدالة موجة Ψ_n ، أي إن Ψ تمثل مجموعة كاملة complete set وعناصرها $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_n$ حيث Ψ_1 هي دالة الحالة "1" التي تحتوي على المعلومات الخاصة بالنظام وهو في الحالة "1". ولكن هذه الدالة لا تحتوي معلومات عن النظام وهو في الحالة "2" التي يمكن وصفها بالدالة Ψ_2 ، وهكذا. أي إن Ψ_1 مستقلة تماماً عن Ψ_2 . ويمكن التعبير عن هذه الاستقلالية رياضياً بالتعبير:

$$\int \Psi_i \Psi_j dV = 0 \quad i \neq j \quad \dots \dots 2.48$$

هذا التكامل يسمى شرط التعامد orthogonality condition، وهو يعبر عن استقلالية عناصر المجموعة Ψ عن بعضها، أي إن الدوال المتعامدة هي دوال مستقلة خطياً، أي لا تعتمد الواحدة على الأخرى، وهذا يشبه حالة المتجهات في الرياضيات، فالضرب العددي (غير الاتجاهي) للمتجهين $\vec{B}$ و $\vec{C}$ هو: $\vec{B} \cdot \vec{C} = BC \cos \theta$ حيث إن B و C يمثلان مقداري المتجهين و θ الزاوية المحصورة بين المتجهين. وعندما تكون الزاوية بينهما 90° فإنه: $\vec{B} \cdot \vec{C} = 0$. وفي هذه الحالة يقال عن المتجهين إنهما متعامدان، أي إن كل متجه ليس له مركبات باتجاه المتجه الآخر.

وتمثل Ψ مجموعة كاملة يكون كل عنصر من عناصرها معيّراً normalized، وأي زوج من عناصرها متعامد orthogonal، ولهذا تُسمى بالمجموعة العيارية المتعامدة orthonormal set.

يتطلب تفسير الاحتمالية $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ أن تكون Ψ دالة عيارية بحيث تحقق شرط العيارية الذي ذكرناه سابقاً: $\int |\Psi|^2 dV = \int \Psi^* \Psi dV = 1$. ووفق ما ذكر في البند ١١-٢ فإنه إذا كان هناك دالتان ذاتيتان Ψ_1 و Ψ_2 للمؤثر الهرميتي ولهما قيمتان ذاتيتان مختلفتان a_1 و a_2 فإن الدالتين متعامدتان. أي إن:

$$\int \Psi_1^* \Psi_2 dV = \int \Psi_2^* \Psi_1 dV = 0$$

لذا فعندما تكون الدوال الموجية عيارية في نفسها ومتعامدة مع غيرها فإنها دوال عيارية متعامدة

orthonormal، ويمكن التعبير عن الدوال المتعامدة العيارية بالشكل:

$$\int \Psi_i^* \Psi_j dV = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases} \quad \dots \dots 2.49$$

حيث إن الرمز δ_{ij} يسمى دالة "كرونكر دلتا" Kronecker delta function، أي إنه إذا كانت نفس

$$\left. \begin{aligned} \int \Psi_i^* \Psi_i dV &= 1 \\ \int \Psi_j^* \Psi_j dV &= 1 \end{aligned} \right\} i = j \quad \text{الدالة فإن شرط العيارية يتحقق:}$$

$$\left. \begin{aligned} \int \Psi_i^* \Psi_j dV &= 0 \\ \int \Psi_j^* \Psi_i dV &= 0 \end{aligned} \right\} i \neq j \quad \text{وإذا كانت الدوال مختلفة فإن شرط التعامد يتحقق:}$$

توضيح: لربط مفاهيم الدالة الذاتية والقيمة الذاتية مع شرط التعامد فلنلاحظ معادلة شرودنجر التي هي معادلة قيمة ذاتية كما ذكرنا سابقاً، وكتطبيق عليها هو معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين:

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

ويرمز الحرف n الذي تمت إضافته في المعادلة إلى أن هناك عدة دوال (n من الدوال) تصلح لأن تكون دوال ذاتية، وأن هناك قيمة ذاتية من الطاقة لكل دالة ذاتية. ويوضح الجدول 2-2 بعضاً من هذه الدوال الذاتية وطاقاتها للإلكترون ذرة الهيدروجين.

الجدول 2-2: الدوال الذاتية وطاقاتها للإلكترون ذرة الهيدروجين.

القيمة الذاتية	الدالة الذاتية	n
E_{1s}	Ψ_{1s}	1
E_{2s}	Ψ_{2s}	2
E_{2p}	Ψ_{2p_x}	3
E_{2p}	Ψ_{2p_y}	4
E_{2p}	Ψ_{2p_z}	5
E_{3s}	Ψ_{3s}	6

نلاحظ في هذا الجدول أن هناك ثلاث دوال ذاتية لها نفس القيمة الذاتية وهي الدوال الخاصة بالمدار p . وحينئذ نقول إن المدارات p_x و p_y و p_z منحلة degenerate ولا ينطبق عليها شرط التعامد. أما في حال الدوال الذاتية غير المنحلة non-degenerate فينطبق شرط التعامد.

مثال: هل الدالتان $2e^{-2x}$ و $4e^{-8x}$ متعامدتان ضمن المدى $(0 \leq x < \infty)$ ؟

الحل: شرط التعامد: $\int \Psi_i \Psi_j dx = 0$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} (2e^{-2x})(4e^{-8x})dx &= 8 \int_0^{\infty} e^{-2x} e^{-8x} dx = 8 \int_0^{\infty} e^{-10x} dx = -\frac{8}{10} [e^{-10x}]_0^{\infty} \\ &= -\frac{8}{10} [0 - 1] = \frac{8}{10} \neq 0 \quad (\text{not orthogonal}) \end{aligned}$$

١٣-٢: الدوال الذاتية وثوابت الحركة Eigenfunctions and Constants of Motion

إذا كانت الدالة Ψ دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ بقيمة ذاتية a كما في معادلة القيمة الذاتية 2.31:

$\hat{A}\Psi = a\Psi$ ، وكانت القيمة المتوقعة expectation value للكمية الظاهرة A هي:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r$$

وأدخلنا معادلة القيمة الذاتية في معادلة القيمة المتوقعة، فسينتج:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* a \Psi d^3r = a \int \Psi^* \Psi d^3r$$

ولكن $(\int \Psi^* \Psi d^3r = 1)$ باعتبار أن الدالة عيارية.

$$\therefore \langle A \rangle = a$$

وهذا يعني أن كل القياسات التي أجريت لقياس المتغير A تعطي نفس النتيجة a . ويمكن القول أن الكمية

A في هذه الحالة هي ثابت الحركة constant of motion. وثابت الحركة هو الكمية الفيزيائية التي لا

تتغير مع الزمن. أي إن:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = 0 \quad \dots \dots 2.50$$

ولإثبات معادلة الحركة:

$$\therefore \langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \int \Psi^* \hat{A} \Psi d^3r = \int \left(\frac{d\Psi^*}{dt} \hat{A} \Psi + \Psi^* \hat{A} \frac{d\Psi}{dt} \right) d^3r \quad \dots 1$$

$$\left. \begin{aligned} \therefore i\hbar \frac{d\Psi}{dt} &= \hat{H} \Psi \quad (\text{eq. 2.22}) & \rightarrow & \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \\ \text{By taking complex conjugate: } -i\hbar \frac{d\Psi^*}{dt} &= \hat{H}^* \Psi^* & \rightarrow & \frac{d\Psi^*}{dt} = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \Psi^* \end{aligned} \right\} \quad \dots 2$$

Sub. eq. 2 in eq. 1 $\Rightarrow$

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \int \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \Psi^* \hat{A} \Psi - \Psi^* \hat{A} \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \right) d^3r = \frac{i}{\hbar} \int \left(\hat{H}^* \Psi^* \hat{A} \Psi - \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi \right) d^3r \quad \dots 3$$

ومن تطبيق تعريف المؤثر الهرميتي (المعادلة 2.42) ينتج:

$$\int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{A} \Psi d^3r = \int \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi d^3r \quad \dots 4$$

Sub. eq. 4 in eq. 3 $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle A \rangle &= \frac{i}{\hbar} \int (\Psi^* \hat{H} \hat{A} \Psi - \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi) d^3r = \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \Psi d^3r \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [\hat{H}, \hat{A}] \Psi d^3r \\ \therefore \frac{d}{dt}\langle A \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle \quad \dots \dots 2.51 \end{aligned}$$

وهذه المعادلة تدعى معادلة الحركة equation of motion و A ثابت الحركة، وتبين المعادلة أن المؤثر الظاهر the observable يكون ثابت حركة إذا كان متبادلاً مع المؤثر الهاملتوني $\hat{H}$.

مثال: أثبت أن الزخم الخطي $\hat{p}_x$ لجسيم حر هو ثابت حركة.

الحل: لكي يكون مؤثر الزخم ثابت حركة يجب أن يكون تبادلياً مع المؤثر الهاملتوني، أي يحقق الشرط:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p}_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}_x] \rangle = 0$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (V = 0 \text{ for a free particle})$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{p}_x] \Psi &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \Psi \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi \\ &= \frac{i\hbar^3}{2m} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \Psi - \frac{i\hbar^3}{2m} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \Psi = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{d}{dt}\langle \hat{p}_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}_x] \rangle = 0 \quad \rightarrow \hat{p}_x \text{ is a constant of motion}$$

تهدف هذه النظرية إلى اختزال معادلات ميكانيك الكم إلى شكلها التقليدي (الكلاسيكي) إذا استبدلنا القيم المتوقعة التي تخص مؤثر ما في ميكانيكا الكم بما يقابلها في الميكانيك التقليدي. فمثلاً لدينا العلاقتان التقليديتان التاليتان اللتان تتساءل إن كان بالإمكان الحصول عليهما من القيم المتوقعة expectation values في ميكانيكا الكم:

$$1) \quad m \frac{dr}{dt} = p, \quad 2) \quad \frac{dp}{dt} = -\nabla V \quad (V: \text{potential energy})$$

١- العلاقة الأولى تمثل الصيغة التقليدية لقانون نيوتن الثاني في الحركة. وفي الميكانيك الكمي فإن القيمة المتوقعة للزخم تساوي حاصل ضرب الكتلة بالمعدل الزمني لتغير القيمة المتوقعة للموقع. أي:

$$\langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$$

From equation of motion (eq. 2.51): $\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle \quad \dots 1$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x)$$

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x), \hat{x} \right] = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x} \right] + [\hat{V}(x), \hat{x}] \quad \dots 2$$

$$\text{But } [\hat{V}(x), \hat{x}] = 0 \quad \dots 3$$

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x} \right] = \frac{1}{2m} ([\hat{p}_x, \hat{x}] \hat{p}_x + \hat{p}_x [\hat{p}_x, \hat{x}]) \quad \dots 4$$

$$\therefore \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore [\hat{p}_x, \hat{x}] \Psi = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} x \Psi - x \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) = -i\hbar \left(\left(\Psi + x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -i\hbar \Psi$$

$$\therefore [\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar \quad \dots 5$$

Sub. eq.5 in eq.4 $\Rightarrow$

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x} \right] = \frac{1}{2m} (-i\hbar \hat{p}_x - \hat{p}_x i\hbar) = \frac{1}{2m} (-2i\hbar \hat{p}_x) = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \quad \dots 6$$

$$\text{Sub. eq. 3 and eq. 6 in eq. 2} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$$

$$\therefore \text{eq. 1} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \Rightarrow \langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$$

وهو المطلوب، حيث إن هذه المعادلة تماثل التعريف التقليدي عدا أنها تتضمن القيمة المتوقعة.

٢- ما يقابل العلاقة الثانية في الميكانيك الكمي هو أن تغير القيمة المتوقعة للزخم بالنسبة إلى الزمن تساوي سالب القيمة المتوقعة لمشتقة الطاقة الكامنة.

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle \quad \Leftarrow \text{وليعد واحد}$$

$$\text{From equation of motion (eq. 2.51):} \quad \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}_x] \rangle \quad \dots 1$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}, \hat{p}_x \right] = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{p}_x \right] + [\hat{V}, \hat{p}_x] \quad \dots 2$$

$$\text{But } \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{p}_x \right] \Psi = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 \hat{p}_x \Psi - \hat{p}_x \hat{p}_x^2 \Psi) = 0 \quad \dots 3$$

$$\text{And } [\hat{V}, \hat{p}_x] \Psi = \hat{V} \hat{p}_x \Psi - \hat{p}_x \hat{V} \Psi$$

$$\therefore \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} \therefore [\hat{V}, \hat{p}_x] \Psi &= -i\hbar \left(V \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \Psi \right) \\ &= -i\hbar \left(V \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial V}{\partial x} \right) = i\hbar \Psi \frac{\partial V}{\partial x} = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \Psi \end{aligned}$$

$$\therefore [\hat{V}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \quad \dots 4$$

Sub. eq. 3 and eq. 4 in eq. 2 $\Rightarrow$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = 0 + i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \quad \dots 5$$

$$\text{Sub. eq. 5 in eq. 1} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

وهذه المعادلة تماثل أيضاً التعريف التقليدي عدا أنها تتضمن القيمة المتوقعة.

مثال: أثبت أن $\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$. وما هو المعنى الفيزيائي للنتيجة؟

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \quad \text{T. D. S. E.} \quad \text{الحل: من معادلة 2.12':}$$

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \quad \hat{V} = V \quad \text{بدلالة المؤثرات:}$$

$$\therefore \text{ T. D. S. E. } \rightarrow \hat{E} \Psi = \hat{T} \Psi + \hat{V} \Psi \quad] * \Psi^* \text{ from left}$$

$$\int \Psi^* \hat{E} \Psi d^3r = \int \Psi^* \hat{T} \Psi d^3r + \int \Psi^* \hat{V} \Psi d^3r$$

$$\therefore \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (\text{from expectation value eq. 2.32})$$

ويلاحظ أن هذه النتيجة تقابل نتيجة الميكانيك التقليدي $E = T + V$ ، ولكن نتيجة الميكانيك الكمي

توصف بدلالة القيم المتوقعة.

٢-١٥: حل معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن Solution of T.D.S.E

تُعطى معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن وفق العلاقة 2.12' :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + V(r) \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} \quad \dots \dots 2.12'$$

ولحل هذه المعادلة تُستخدم طريقة فصل المتغيرات حيث نفرض ما يلي:

$$\Psi(r, t) = \Psi(r) \Phi(t) \quad \dots \dots 2.52$$

حيث إن $\Psi(r)$ هي دالة للموقع فقط. و $\Phi(t)$ هي دالة للزمن فقط.

ندخل المعادلة 2.52 في المعادلة 2.12' $\Leftrightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) \Phi(t) + V(r) \Psi(r) \Phi(t) = i\hbar \frac{\partial (\Psi(r) \Phi(t))}{\partial t}$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Phi(t) \nabla^2 \Psi(r) + V(r) \Psi(r) \Phi(t) = i\hbar \Psi(r) \frac{d\Phi(t)}{dt}$$

By dividing on $\Psi(r) \Phi(t) \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \Psi(r)}{\Psi(r)} + V(r) = i\hbar \frac{1}{\Phi(t)} \frac{d\Phi(t)}{dt}$$

نلاحظ من هذه المعادلة أن الطرف الأيسر هو دالة للموضع فقط r بينما الطرف الأيمن هو دالة للزمن فقط t . ولهذا فإن أي تغير في الزمن سوف لا يغير الطرف الأيسر لأنه لا يعتمد عليه، وهو بالتالي لا يغير الطرف الأيمن نفسه لأنه يجب أن يساوي الطرف الأيسر لجميع قيم t . وبالتالي فإن كل طرف يجب أن يبقى ثابتاً لكي تكون المعادلة صحيحة. وحينئذ يمكن أن نفرض أن قيمة كل منهما تساوي مقداراً ثابتاً هو E (والذي يسمى ثابت الفصل)، والطرف الأيمن سيصبح بالشكل التالي:

$$i\hbar \frac{1}{\Phi(t)} \frac{d\Phi(t)}{dt} = E \quad \Rightarrow \quad \frac{d\Phi(t)}{\Phi(t)} = \frac{E}{i\hbar} dt = -\frac{i}{\hbar} E dt$$

$$\int \frac{d\Phi(t)}{\Phi(t)} = -\frac{i}{\hbar} E \int dt \quad \Rightarrow \quad \ln \Phi(t) = -\frac{i}{\hbar} Et + C \quad (C = \text{constant})$$

$$\therefore \Phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et + C} = e^C e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = A e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (e^C = A = \text{constant})$$

وبالتعويض في المعادلة 2.52 $\Leftrightarrow$

$$\Psi(r, t) = A \Psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad \dots \dots 2.53$$

$$\Psi^*(r, t) = A \Psi^*(r) e^{\frac{i}{\hbar} Et} \quad \Leftrightarrow 2.53 \text{ المعادلة للمرافق}$$

لنفرض أن الثابت E حقيقي وأن الدالة $\Psi(r, t)$ عيارية. وبعد الضرب والتكامل $\Leftrightarrow$

$$\int \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) d^3r = 1 = A^2 \int \Psi^*(r) e^{\frac{i}{\hbar} Et} \Psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} d^3r = A^2 \int \Psi^*(r) \Psi(r) d^3r$$

$$\int \Psi^*(r) \Psi(r) d^3r = \frac{1}{A^2} \quad \text{أي :}$$

وإذا كان $A^2 = 1$ فإن دالة الموقع $\Psi(r)$ هي عيارية أيضاً. ولما كانت احتمالية الحصول على الجسيم في نقطة تتناسب مع $\Psi^*(r, t) \Psi(r, t)$ وأن الأخيرة تساوي $\Psi^*(r) \Psi(r)$ فهذا يعني أن هذه الاحتمالية لا تعتمد على الزمن. ولهذا السبب فإن جسيماً تكون دالته الموجية وفق الصيغة 2.53 يقال عنه أنه في حالة مستقرة stationary state. وهكذا جسيم سيبقى في هذه الحالة حتى تؤثر عليه قوة خارجية تزحجه عن هذه الحالة.

وللتعرف على المعنى الفيزيائي لثابت الفصل E الذي يظهر في المعادلة 2.53 نؤثر على الدالة $\Psi(r, t)$ بمؤثر الطاقة $\hat{E} \Leftarrow$

$$\hat{E} \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A \Psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

$$= i\hbar A \Psi(r) \left(-\frac{i}{\hbar} E \right) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = E A \Psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = E \Psi(r, t)$$

وهذا يعني أن $\Psi(r, t)$ هي دالة ذاتية لمؤثر الطاقة $\hat{E}$ وبقيمة ذاتية تساوي E ، وبالتالي فهي قيمة ذاتية أيضاً للمؤثر الهاملتوني كما يتبين من المعادلة 2.23، أي إن ثابت الفصل E هو طاقة الجسيم الكلية:

$$\hat{H} \Psi(r, t) = E \Psi(r, t) \quad \dots \dots 2.23$$

١٦-٢: حفظ الاحتمالية^١ Conservation of Probability

بيناً سابقاً أن الاحتمالية الكلية لجسيم بدالة موجية $\Psi(r, t)$ موجود ضمن حيز محدد تساوي الواحد الصحيح، أي:

$$P = \int \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) d^3r = 1$$

وتكون هذه الاحتمالية صحيحة لكل قيم t ، أي تكون الاحتمالية محفوظة. ولإثبات أن الاحتمالية الكلية يجب أن لا تتغير مع الزمن فإن مشتقة P نسبة للزمن $\left(\frac{dP}{dt} \right)$ يجب أن تساوي صفراً.

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \int \Psi^* \Psi d^3r = \int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) d^3r$$

^١ ينص قانون الحفظ conservation law في الفيزياء على أن الخاصية المعينة القابلة للقياس لنظام فيزيائي معزول لا تتغير بتقدم الزمن. وكمثال عليها: قانون حفظ الطاقة وقانون حفظ الشحنة وقانون حفظ الزخم الخطي والزوايا.

$$\hat{H}\Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\Psi \quad \text{وباستخدام المعادلة 2.22 :}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\Psi)^*$$

$$\therefore \frac{dP}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int \left((\hat{H}\Psi)^* \Psi - \Psi^* (\hat{H}\Psi) \right) d^3r$$

$\therefore \hat{H}$ is Hermitian operator, $\therefore$ from eq. 2.42 $\Rightarrow$

$$\int (\hat{H}\Psi)^* \Psi d^3r = \int \Psi^* (\hat{H}\Psi) d^3r$$

$$\therefore \frac{dP}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int (\Psi^* \hat{H}\Psi - \Psi^* \hat{H}\Psi) d^3r = 0 \quad \dots \dots 2.54$$

وهذه النتيجة ترينا مرة أخرى الحاجة لأن تكون المؤثرات هرميتية، حيث أن الصفة الهرميتية لها تستوجب بقاء الاحتمالية الكلية ثابتة مع الزمن وأن التغير في دالة الموجة Ψ حسبما تصفه معادلة شرودنجر يتمشى مع حفظ الاحتمالية.

١٧-٢: تيار الاحتمالية Probability Current

من معادلات ماكسويل في الكهرومغناطيسية تنتج معادلة الاستمرارية^١ continuity equation

التي هي قانون حفظ موضعي^٢. وتأخذ الشكل التالي (للفضاء): $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \right)$ والشكل التالي (للمحور واحد): $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \right)$. حيث $\rho(x, t)$: كثافة الشحنة density of charge عند الموقع x والزمن t ، و $j(x, t)$: كثافة التيار current density عند الموقع x والزمن t .

كما مرّ علينا سابقاً فإن كثافة الاحتمالية في الميكانيك الكمي تساوي $\Psi^* \Psi = |\Psi|^2$ ، وسنرمز لها بالرمز ρ كما يُرمز لكثافة الشحنة في الكهرومغناطيسية.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) && \text{ولحساب } \frac{\partial \rho}{\partial t} : \\ &= \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} && \dots a \end{aligned}$$

^١ تُدعى "معادلة الاستمرارية" لأنها معادلة تصف الوجود المستمر لكمية ما حين تدفقها من مكان لآخر. أي إنها تحدد العلاقة بين مقدار الكمية وانتقالها.

^٢ "قانون الحفظ الموضعي" local conservation law هو القانون الذي يُعبر عنه رياضياً بمعادلة مشتقة جزئية كما في معادلة الاستمرارية، وينص على أن مقدار الكمية المحفوظة conserved quantity في نقطة أو ضمن حجم يمكن أن تتغير - فقط - بمقدار الكمية التي تدفق داخل أو خارج الحجم المعين.

ووفقاً لمعادلة شرودنجر لبعء واحد 2.12 :

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \end{aligned} \right\} \div i\hbar \Rightarrow$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} V\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{1}{i\hbar} V\Psi^*$$

$$\text{From eq. a} \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} V\Psi^* \Psi + \frac{\hbar}{2mi} \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{1}{i\hbar} V\Psi \Psi^*$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right]$$

هذه المعادلة لا يبدو شكلها كمعادلة الاستمرارية لمُحور واحد إلا إذا عرّفنا تيار الاحتمالية (كثافة

التيار) بالشكل:

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

وعندها تكون معادلة الاستمرارية في الميكانيك الكمي كما يلي:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad \dots \dots 2.55$$

$$J(r, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad \Leftarrow \text{ولثلاثة أبعاد}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \quad \dots \dots 2.55'$$

مثال ١: جد تيار الاحتمالية للدالة الموجية $\Psi = 3ke^{ikx}$ حيث k ثابت.

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad \text{الحل :}$$

$$\Psi = 3ke^{ikx} \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial x} = 3k(ik)e^{ikx} = 3ik^2e^{ikx}$$

$$\Psi^* = 3ke^{-ikx} \rightarrow \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} = 3k(-ik)e^{-ikx} = -3ik^2e^{-ikx}$$

$$j = \frac{\hbar}{2mi} [3ke^{-ikx}(3ik^2e^{ikx}) - 3ke^{ikx}(-3ik^2e^{-ikx})]$$

$$j = \frac{\hbar}{2mi} [9ik^3e^0 + 9ik^3e^0] = \frac{9\hbar k^3}{m}$$

مثال ٢: جد تيار الاحتمالية للدالة الموجية $\Psi = 5e^{2x}$.

الحل :

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

$$\Psi = 5e^{2x} = \Psi^* \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial x} = 10e^{2x} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}$$

$$\therefore \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \rightarrow j = 0$$

١٨-٢: انحلال مستويات الطاقة Degeneracy of Energy Levels

كما ذكرنا في الفقرة (١٢-٢: التعامد العياري) فإن الانحلال هو الحالة التي يكون فيها أكثر من دالة ذاتية تقابل نفس القيمة الذاتية، ففي حالات معينة يرافق مستوى طاقة معين مثل E_n أكثر من دالة موجة واحدة Ψ_n بحيث تكون هذه الدوال مستقلة خطياً عن بعضها البعض linearly independent وفي مثل هذه الحالات يسمى مستوى الطاقة منحللاً degenerate، ودرجة الانحلال تساوي عدد الدوال الموجية المستقلة المرافقة لذلك المستوى. فمثلاً إذا كان مستوى الطاقة E_n منحللاً بدرجة انحلال تساوي N فإن عدد الدوال المستقلة سيكون مساوياً لـ N :

$$\Psi_n^1, \Psi_n^2, \Psi_n^3, \dots, \Psi_n^N$$

أما مستوى الطاقة الذي يمتلك دالة موجية واحدة فيقال عنه أنه غير منحل non degenerate.

١٩-٢: مبدأ التراكب الخطي Linear Superposition Principle

إن أي مزج خطي لعدة دوال منحلة يصلح أن يكون دالة لنفس مستوى الطاقة. فمثلاً لو كان لدينا الدالتان Ψ_1 و Ψ_2 التابعتان لحالة مستوى طاقتها E بحيث:

$$\hat{H}\Psi_1 = E\Psi_1, \quad \hat{H}\Psi_2 = E\Psi_2$$

فإن المزج الخطي لكل من Ψ_1 و Ψ_2 يصبح أن يكون دالة موجية لها نفس الطاقة E لأن:

$$\hat{H}(a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2) = E(a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2)$$

ويمكن التعميم إلى الحالة العامة التي تكون فيها درجة انحلال مستوى الطاقة N ، وتشارك فيها مجموعة من الدوال $\Psi_n, \Psi_2, \dots, \Psi_1$ التي تصف حالات نظام، فهذه الدوال الذاتية للنظام والتي لها قيم ذاتية هي $a_1, a_2, \dots, a_n$ على التوالي، فعندئذ يمكن بناء دالة جديدة Φ تتبع نفس المستوى وتمثل المجموع الخطي للدوال الذاتية، وتكون بالشكل التالي:

$$\Phi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + C_3\Psi_3 + \dots + C_n\Psi_n = \sum_n C_n\Psi_n \quad \dots \dots 2.56$$

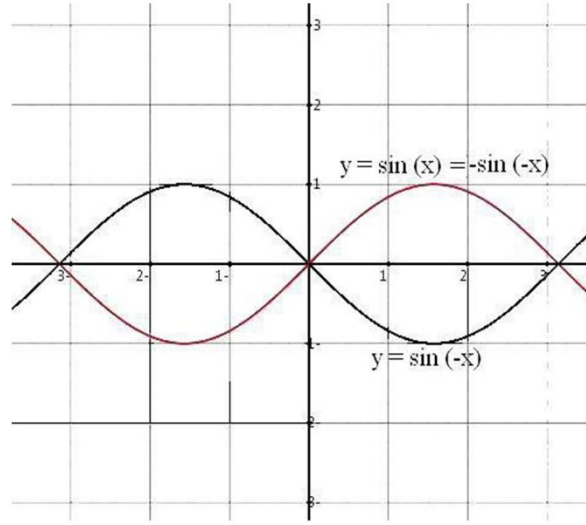
حيث $C_1, C_2, C_3, \dots, C_n$ كميات ثابتة. وتسمى هذه العلاقة مبدأ التراكب الخطي.

٢-٢٠: التماثل (التكافؤ) Parity

يمكن وصف التماثل بأنه حالة مرآئية كالذي يحدث في المرآة بحيث تنقلب الصورة. وقد تكون لبعء واحد أو أكثر:

$$P = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \quad \text{for three coordinates.}$$

$$P = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \text{for one coordinate.}$$



الشكل 2-5: التماثل على محور x .

قد تتصف الدوال الموجية بصفة التناظر الزوجي even والفردى odd بالنسبة للانعكاس في الاحداثيات خلال نقطة الأصل.

$$\left. \begin{array}{ll} \Psi(x) = \Psi(-x) & \text{even function} \quad \text{دالة زوجية} \\ \Psi(x) = -\Psi(-x) & \text{odd function} \quad \text{دالة فردية} \end{array} \right\} \dots \dots 2.57$$

ويظهر هذا التناظر بوضوح لكل دوال الموجة للطاقات غير المنحلة لأي منظومة تكون طاقتها الكامنة متناظرة بالنسبة لإحداثي معين. ويمكن التعامل في هذه المسألة من خلال مؤثر خطي يسمى مؤثر التماثل parity operator حيث يؤثر على الدالة الموجية بهذه الطريقة:

$$P\Psi(x) = \Psi(-x) \quad \dots \dots 2.58$$

$$P\Psi(x) = \lambda\Psi(-x) \quad \dots \dots 2.59 \quad \Leftrightarrow \text{وإذا اعتمدنا معادلة القيمة الذاتية لـ } P \text{ فإنه}$$

وبتطبيق P مرة ثانية على المعادلة 2.58 فإنه $\Leftarrow$

وبتطبيق هذا على معادلة القيمة الذاتية 2.59 $\Leftarrow$

وبمساواة هاتين النتيجةين فإنه $\Leftarrow$

ويتبين من هذا أن الدالة الزوجية لها قيمة ذاتية $(+1)$ ولها تماثل زوجي، وأن الدالة الفردية لها قيمة ذاتية (-1) ولها تماثل فردي. وأن مؤثر التماثل P هو المؤثر الذي يكون حاصل تأثيره على الدالة $\Psi(r)$ هو استبدال (r) بـ $(-r)$ كما في المعادلة 2.58 وأنه مؤثر أحادي unitary operator.

مسألة: عندما يكون الجهد متناظراً بحيث $V(x) = V(-x)$ فإن هذا يستتبع أن المؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ سيكون دالة زوجية، أي إن $\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$. وحينها فإن الهاملتوني سيتبادل commutes مع مؤثر التماثل $\hat{P}$ ، أي $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$.

البرهان:

$$\begin{aligned} \hat{P}(\hat{H}(x)\Psi(x)) &= \hat{H}(-x)\Psi(-x) && \text{from eq. 2.58} \\ &= \hat{H}(x)\Psi(-x) && \text{because } \hat{H}(x) = \hat{H}(-x) \\ &= \hat{H}(x)\hat{P}\Psi(x) && \text{from eq. 2.58} \\ \therefore \hat{P}\hat{H}(x)\Psi(x) &= \hat{H}(x)\hat{P}\Psi(x) && \text{because } \hat{P} \text{ is a linear operator.} \\ \therefore (\hat{P}\hat{H}(x) - \hat{H}(x)\hat{P})\Psi(x) &= 0 \\ \therefore (\hat{P}\hat{H}(x) - \hat{H}(x)\hat{P}) &= 0 \quad \rightarrow \quad [\hat{P}, \hat{H}(x)] = 0 \end{aligned}$$

مثال: بين نوع التماثل في دالة الجيب $y(x) = \sin x$ ودالة الجيب تمام $y(x) = \cos x$.

الحل:

$$1 - y(x) = \sin x$$

$$y(-x) = \sin(-x) = -\sin x = -y(x)$$

$$\therefore y(x) = -y(-x)$$

$\therefore$ from eq. 2.57 $\rightarrow y(x) = \sin x$ is odd function

$$2 - y(x) = \cos x$$

$$y(-x) = \cos(-x) = \cos(x) = y(x)$$

$$y(x) = y(-x)$$

$\therefore$ from eq. 2.57 $\rightarrow y(x) = \cos x$ is even function

يمكن وصف الفضاء الاعتيادي الإقليدي بواسطة مجموعة الاحداثيات المتعامدة المعروفة بالاحداثيات الكارتيزية التي تتكون من ثلاثة محاور متعامدة مع بعض، وهناك متجهات أساسية $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ منطبقة على المحاور x, y, z على التوالي، أي إنها تمثل مساقط المتجه A على المحاور الثلاثة، ومقدار كل منها وحدة واحدة.

$$\vec{A} = A_x \hat{x} + A_y \hat{y} + A_z \hat{z}$$

والأرقام A_x, A_y, A_z هي مركبات المتجه بالنسبة إلى الأسس $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$. وهذه المتجهات الأساسية هي عيارية متعامدة orthonormal، أي:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases} \Rightarrow \hat{x} \cdot \hat{x} = \hat{y} \cdot \hat{y} = \hat{z} \cdot \hat{z} = 1, \quad \hat{x} \cdot \hat{y} = \hat{y} \cdot \hat{z} = \hat{z} \cdot \hat{x} = 0$$

وإذا فرضنا متجهاً ثانياً $\vec{B}$ فمن الممكن أن نجمع أو نطرح المتجهين مع بعض كي ينتج متجه ثالث $\vec{C}$:

$$\vec{C} = \vec{A} \pm \vec{B} = (A_x \pm B_x) \hat{x} + (A_y \pm B_y) \hat{y} + (A_z \pm B_z) \hat{z}$$

ومن الممكن ضرب المتجه vector بعدد غير متجه scalar كي ينتج متجه جديد:

$$a\vec{A} = aA_x \hat{x} + aA_y \hat{y} + aA_z \hat{z}$$

ويمكن تطبيق الضرب الداخلي inner product بين متجهين، والنتيجة عدد غير متجه:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$$

$$\sqrt{\vec{A} \cdot \vec{A}} = \sqrt{A_x^2 + A_y^2 + A_z^2} \quad \text{وهذا يسمح لنا بتعريف طول المتجه كما يلي:}$$

ونستطيع تعميم هذه الأفكار لجعلها ملائمة للميكانيك الكمي بأن نتخذ عدداً محدوداً finite أو غير محدود infinite من الأبعاد التي تمثل الدوال (المتجهات الأساسية). وحينئذ يمكن افتراض فضاء جديد متناهي أو غير متناهي الأبعاد له عدد غير محدود من المحاور نصف فيه الدوال functions بدل المتجهات ويسمى هذا الفضاء بفضاء هيلبرت. وهذه الدوال هي في نفس الوقت دوال ذاتية لمؤثر هرميتي معين. أي إن فضاء هيلبرت هو أساس رياضي يُستخدم لأجل ميكانيك الكم ويستند على الأفكار الأساسية لتحليل المتجهات، ولكن الدوال تحل محل المتجهات. وكل محور في فضاء هيلبرت اللامتناهي تمثله دالة ذاتية أو دالة أساسية كما تسمى في كثير من الأحيان، ويمكن أن تكون عناصر فضاء هيلبرت عقدية complex.

٢٢-٢: رموز ديراك Dirac Notation

أدخل ديراك بعض الصيغ الرياضية المختصرة لوصف العمليات الرياضية في الميكانيك الكمي واختزال خطواتها، وتعتمد هذه الصيغ على الصفة الاتجاهية لحالات الجسيم، وتم فيها وصف حالة النظام بواسطة متجه حالة عوضاً عن دالة حالة. ويُكتب متجه الحالة Ψ بالصيغة $|\Psi\rangle$. والرمز $\rangle$ يسمى ket. وهناك رمز آخر لديراك يستخدم لتمثيل الدالة Ψ^* وهو $\langle$ ويسمى bra بحيث تكتب Ψ^* بالشكل $\langle\Psi|$. ويسمى جمع الصيغتين $\langle$ و $\rangle$ bracket. وفيما يلي بعض المفاهيم الكمية بدلالة رموز ديراك والتي كنا نستخدمها بتمثيل شرودينجر:

١- دالة الموجة Ψ على محور x ، أي $\Psi(x)$ ، فتكتب بالشكل: $\langle x|\Psi\rangle = \Psi(x)$ ، وتمثل مركبة المتجه $|\Psi\rangle$ باتجاه x

٢- المتجه المرافق المعقد complex conjugate لدالة الموجة الذي يصف نظام معين على محور x :

$$\Psi^*(x) = \langle\Psi|x\rangle$$

إن الاتجاهين $|x\rangle$ و $\langle x|$ يمثلان مجموعة كاملة، حيث: $\int |x\rangle\langle x| dx = 1$

٣- التكامل على كل الفضاء:

$$\int \Phi^*(r)\Psi(r)d^3r \equiv \langle\Phi|\Psi\rangle$$

٤- تأثير مؤثر $\hat{A}$ على دالة موجية Ψ :

$$\hat{A}\Psi \rightarrow \hat{A}|\Psi\rangle$$

٥- القيمة المتوقعة للمؤثر $\hat{A}$:

$$\langle A \rangle = \int \Phi^* \hat{A} \Psi d^3r \equiv \langle\Phi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

٦- معادلة القيمة الذاتية:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \Leftrightarrow \hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$$

٧- شرط العيارية:

$$\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1 \Leftrightarrow \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$

٨- شرط التعامد:

$$\int \Phi^*(r)\Psi(r)dx = 0 \Leftrightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle = 0$$

٩- شرط المؤثر الهرميتي:

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 d^3r = \int \Psi_2 \hat{A}^* \Psi_1^* d^3r$$

$$\langle\Psi_1|\hat{A}\Psi_2\rangle = \langle\hat{A}\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

ومن التعريف: $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^*$

∴ يمكن كتابة شرط المؤثر الهرميتي بالصيغة: $\langle \Psi_1 | \hat{A} \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \hat{A} \Psi_1 \rangle^*$

٢-٢٣: تمثيل هايزنبرك Heisenberg Representation

وضع هايزنبرك طريقة لوصف حالة النظام باستخدام المصفوفات، حيث توصف حالة النظام Ψ بمصفوفة ذات عمود واحد، ويرمز لها بالرمز: $(\quad)$. وتوصف الدالة المعقدة المرافقة Ψ^* بمصفوفة ذات صف واحد، ويرمز لها بالرمز: $(\quad)$. أما المؤثر operator فيوصف بمصفوفة مربعة حجمها: $(n \times n)$.

مثال ١: إن كانت الدالة Ψ بالشكل التالي: $|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$ فجاء المرافق المعقد لها.

$$\therefore |\Psi\rangle = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}, \quad \therefore \langle \Psi| = [z_1^* \quad z_2^* \quad z_3^* \quad \dots \quad z_n^*] \quad \text{الحل :}$$

مثال ٢: يعرف متجهان كما يلي: $|A\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -7i \\ 1 \end{pmatrix}$, $|B\rangle = \begin{pmatrix} 1+3i \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}$ فأوجد $\langle A|B\rangle$.

$$\therefore |A\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -7i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \therefore \langle A| = (2^* \quad -7i^* \quad 1^*) = (2 \quad 7i \quad 1) \quad \text{الحل :}$$

$$\begin{aligned} \therefore \langle A|B\rangle &= (2 \quad 7i \quad 1) \begin{pmatrix} 1+3i \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix} \\ &= 2(1+3i) + 7i(4) + 1(8) = 2 + 6i + 28i + 8 = 10 + 34i \end{aligned}$$

أمثلة متنوعة:

(1) افرض أن جسيماً محصوراً في بئر جهد يمتلك جهداً مقداره: $V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$
 بين أن الدالة: $\Psi(x, t) = A \sin(kx) e^{-iEt/\hbar}$ تمثل حلاً لمعادلة شرودنجر بحيث: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

الحل: قيمة الجهد عند $(x = 0)$ وعند $(x = a)$ تبلغ ∞ ، ولهذا فلا يمكن أن يتواجد الجسيم خارج هذا المجال. وعليه فإننا نحتاج افتراض معادلة شرودنجر داخل الحيز فقط الذي يكون فيه $V=0$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{T.D.S.E. when } V = 0$$

بأخذ الطرف الأيسر لمعادلة شرودنجر وتطبيقه على الدالة المعطاة:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (A \sin(kx) e^{-iEt/\hbar}) \\ &= i\hbar (-iE/\hbar) A \sin(kx) e^{-iEt/\hbar} = EA \sin(kx) e^{-iEt/\hbar} = E\Psi(x, t) \end{aligned}$$

وبأخذ الطرف الأيمن لمعادلة شرودنجر وتطبيقه على الدالة المعطاة:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (A \sin(kx) e^{-iEt/\hbar}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} (kA \cos(kx) e^{-iEt/\hbar}) = -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 A \sin(kx) e^{-iEt/\hbar}) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(x, t) \end{aligned}$$

وبتعويض نتيجتي مساواة كل طرف في معادلة شرودنجر:

$$E\Psi(x, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(x, t) \quad \rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

(2) جد قيمة الثابت A بعد معايرة الدالة الموجية: $\Psi(x) = A e^{-|x|/2a} \cdot e^{i(x-x_0)}$ ضمن المجال $(-\infty \leq x \leq \infty)$

$$\Psi^*(x) = A^* e^{-|x|/2a} \cdot e^{-i(x-x_0)} \quad \text{الحل :}$$

$$\begin{aligned} \Psi^*(x)\Psi(x) &= A^2 (e^{-|x|/2a} \cdot e^{-i(x-x_0)}) \cdot (e^{-|x|/2a} \cdot e^{i(x-x_0)}) \\ &= A^2 e^{-\frac{|x|}{a}} (e^{-i(x-x_0)} \cdot e^{i(x-x_0)}) = A^2 e^{-\frac{|x|}{a}} \end{aligned}$$

ولكي نكامل المقدار $(e^{-\frac{|x|}{a}})$ علينا أن نتذكر أنه مُعرّف بدلالة القيمة المطلقة، وعندما $(x \leq 0)$ فإن هذا الحد سيكون $(e^{x/a})$ ، بينما لـ $(x \geq 0)$ يصير $(e^{-x/a})$. وبعد هذا نُجزئ التكامل بالصورة التالية:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = A^2 \left(\int_{-\infty}^0 e^{x/a} dx + \int_0^{\infty} e^{-x/a} dx \right)$$

ويُحل هذا التكامل بطريقة udv فنفرض (بالنسبة للحد الأول) أن $(u = x/a) \leftarrow (du = dx/a)$ ،
والحد الثاني يعامل بنفس الطريقة مع تغيير الإشارة بحيث $(u = -x/a) \leftarrow (du = -dx/a)$.

$$\int_{-\infty}^0 e^{x/a} dx = a \int_{-\infty}^0 e^u du = ae^u \Big|_{-\infty}^0 = a e^{\frac{x}{a}} \Big|_{-\infty}^0 = a(e^0 - e^{-\infty/a}) = a(1 - 0) = a$$

$$\int_0^{\infty} e^{-x/a} dx = a \int_0^{\infty} e^u du = -ae^u \Big|_0^{\infty} = -a e^{-\frac{x}{a}} \Big|_0^{\infty} = -a(e^{-\frac{\infty}{a}} - e^0) = -a(0 - 1) = a$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = A^2(a + a) = 2A^2a$$

وباستخدام شرط العيارية: $\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$

$$1 = 2A^2a \Rightarrow A^2 = \frac{1}{2a} \Rightarrow A = \pm \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

(3) جسيم يتحرك ببعد واحد بدالة موجة $\Psi(x) = Ae^{ix^2}$ ضمن المجال $(0 \leq x \leq 0.5)$ ، جد:

أ- ثابت العيارية A . ب- القيمة المتوقعة لـ x و p_x .

الحل : أ - شرط العيارية $\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx = \int |\Psi(x)|^2 dx = 1$

$$\Psi^*(x) = Ae^{-ix^2}$$

$$\therefore \int_0^{0.5} |\Psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^{0.5} e^{ix^2} e^{-ix^2} dx = A^2 \int_0^{0.5} dx = A^2 x \Big|_0^{0.5} = A^2(0.5 - 0) = 0.5A^2 = 1$$

$$\therefore A^2 = \frac{1}{0.5} = 2 \Rightarrow A = \pm\sqrt{2} \Rightarrow \Psi(x) = \pm\sqrt{2}e^{ix^2}$$

ب-

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx = \int_0^{0.5} (\pm\sqrt{2}e^{-ix^2}) x (\pm\sqrt{2}e^{ix^2}) dx = 2 \int_0^{0.5} x dx = 2 \frac{x^2}{2} \Big|_0^{0.5} = 0.25$$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_0^{0.5} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi dx = \int_0^{0.5} (\pm\sqrt{2}e^{-ix^2}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) (\pm\sqrt{2}e^{ix^2}) dx \\ &= -2i\hbar \int_0^{0.5} e^{-ix^2} \frac{\partial e^{ix^2}}{\partial x} dx = -2i\hbar \int_0^{0.5} e^{-ix^2} 2ix e^{ix^2} dx = 4\hbar \int_0^{0.5} x dx \\ &= 4\hbar \frac{x^2}{2} \Big|_0^{0.5} = 0.5\hbar \end{aligned}$$

(4) جسيم يتحرك ببعد واحد بدالة موجة $\Psi(x) = Ae^{-x^2}$ ضمن المجال $(0 \leq x \leq \infty)$ ، جد ثابت

العيارية A .

$$\Psi^*(x) = A^* e^{-x^2} = Ae^{-x^2} = \Psi(x)$$

الحل :

$$\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1 \quad \text{بتطبيق شرط العيارية :}$$

$$A^2 \int_0^\infty e^{-2x^2} dx = 1$$

$$\text{Let } u = 2x^2 \rightarrow x^2 = \frac{u}{2} \rightarrow x = \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{2}} \rightarrow dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} u^{-1/2} du$$

$$A^2 \int_0^\infty e^{-2x^2} dx = A^2 \int_0^\infty e^{-u} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} u^{-1/2} du \right) = \frac{1}{2\sqrt{2}} A^2 \int_0^\infty u^{-1/2} e^{-u} du$$

$$\text{But } \int_0^\infty u^{-1/2} e^{-u} du = \sqrt{\pi} = 1.77245$$

$$\therefore A^2 \int_0^\infty e^{-2x^2} dx = A^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} = 1 \rightarrow A^2 = 1.5957 \rightarrow A = \pm 1.2632$$

$$\therefore \Psi(x) = \pm 1.2632 e^{-x^2}$$

(5) افرض أن توزيع احتمالية معينة يُعطى بالعلاقة $P(x) = \frac{9}{4} \frac{1}{x^3}$ ضمن المجال $(1 \leq x \leq 3)$ ، جد الاحتمالية بحيث: $(2.5 \leq x \leq 3)$.

$$P = \frac{9}{4} \int_{2.5}^3 \frac{1}{x^3} dx = \frac{9}{4} \left(\frac{x^{-2}}{-2} \right) \Big|_{2.5}^3 = -\frac{9}{8} \left(\frac{1}{9} - \frac{1}{6.25} \right) = 0.055 = 5.5\% \quad \text{الحل :}$$

وعليه فإن كانت هذه دالة موجية فيوجد احتمال 5.5% لإيجاد الجسم ضمن المدى $2.5 \leq x \leq 3$.

(6) جسم حر بدالة موجة $\Psi(x) = e^{ikx}$ يتحرك على طول $(0 \leq x \leq 1)$ ، وفي ما عدا هذه المسافة فإن $\Psi(x) = 0$. احسب احتمالية إيجاد الجسم ضمن المسافة $(0.25 \rightarrow 0.75)$. ثم جد التفاوت في الموقع والانحراف القياسي.

$$P(x) = \int_a^b \Psi^*(x)\Psi(x)dx \quad \text{الحل :}$$

$$\Psi^*(x) = e^{-ikx}$$

$$P(x) = \int_{0.25}^{0.75} e^{-ikx} e^{ikx} dx = \int_{0.25}^{0.75} dx = x \Big|_{0.25}^{0.75} = 0.75 - 0.25 = 0.5 = 50\%$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx = \int_0^1 e^{-ikx} x e^{ikx} dx = \int_0^1 x dx = \frac{x^2}{2} \Big|_0^1 = 0.5 \Rightarrow \langle x \rangle^2 = 0.25 = \frac{1}{4}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int \Psi^* x^2 \Psi dx = \int_0^1 e^{-ikx} x^2 e^{ikx} dx = \int_0^1 x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_0^1 = \frac{1}{3} = 0.3333$$

$$\therefore \text{The variance } (\Delta x)^2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12} = 0.0833$$

$$\text{Standard deviation } \Delta x = \sqrt{0.0833} = 0.288$$

(7) افرض أن لدينا الدالة: $\Psi(x) = A(ax - x^2)$ for $0 \leq x \leq a$

أ- أجز معايرة للدالة. ب- جد الانحراف القياسي.

الحل: أ- هذه الدالة حقيقية، فلهاذا: $\Psi^* \Psi = \Psi^2$ ، وسينتج:

$$\begin{aligned} \int \Psi^2 dx &= \int_0^a A^2(ax - x^2)^2 dx = A^2 \int_0^a (a^2 x^2 - 2ax^3 + x^4) dx \\ &= A^2 \left(a^2 \frac{x^3}{3} - 2a \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} \right) \Big|_0^a = A^2 \left(\frac{a^5}{3} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{5} \right) = A^2 \frac{a^5}{30} \end{aligned}$$

$$A^2 \frac{a^5}{30} = 1 \Rightarrow A = \pm \sqrt{30/a^5}$$

ولأجل المعايرة:

ب- لحساب التفاوت:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \Psi^* x \Psi dx = \langle x \rangle = \int x \Psi^2 dx = \frac{30}{a^5} \int_0^a x(ax - x^2)^2 dx \\ &= \frac{30}{a^5} \int_0^a (a^2 x^3 - 2ax^4 + x^5) dx = \frac{30}{a^5} \left(a^2 \frac{x^4}{4} - 2a \frac{x^5}{5} + \frac{x^6}{6} \right) \Big|_0^a \\ &= \frac{30}{a^5} \left(\frac{a^6}{4} - \frac{2a^6}{5} + \frac{a^6}{6} \right) = \frac{30}{a^5} \frac{a^6}{60} = \frac{a}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int \Psi^* x^2 \Psi dx = \int x^2 \Psi^2 dx = \frac{30}{a^5} \int_0^a x^2(ax - x^2)^2 dx \\ &= \frac{30}{a^5} \int_0^a (a^2 x^4 - 2ax^5 + x^6) dx = \frac{30}{a^5} \left(a^2 \frac{x^5}{5} - 2a \frac{x^6}{6} + \frac{x^7}{7} \right) \Big|_0^a \\ &= \frac{30}{a^5} \left(\frac{a^7}{5} - \frac{a^7}{3} + \frac{a^7}{7} \right) = \frac{30}{a^5} \frac{a^7}{105} = \frac{2}{7} a^2 \end{aligned}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{2a^2}{7} - \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \sqrt{\frac{2a^2}{7} - \frac{a^2}{4}} = \frac{a}{\sqrt{28}} \quad (\text{standard deviation})$$

(8) جد كثافة التيار (تيار الاحتمالية) لجريان جسيم يتحرك بدالة موجية $\Psi(x) = 5e^{ix^2}$.

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad \text{الحل :}$$

$$\Psi = 5e^{ix^2} \rightarrow \Psi^* = 5e^{-ix^2}$$

$$\begin{aligned} j(x, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left[5e^{-ix^2} \frac{\partial (5e^{ix^2})}{\partial x} - 5e^{ix^2} \frac{\partial (5e^{-ix^2})}{\partial x} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [5e^{-ix^2} (10ixe^{ix^2}) - 5e^{ix^2} (-10ixe^{-ix^2})] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [5(10ix) - 5(-10ix)] = \frac{\hbar}{2mi} [50ix + 50ix] = \frac{50\hbar}{m} x \end{aligned}$$

(9) لدينا المؤثران: $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ and $\hat{B} = -i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}$

أ- بيّن أن: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

ب- أثبت أن الدالة: $f(x, y) = e^{-x+y}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ بقيمة ذاتية (-1).

ج- هل إن هذه الدالة هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{B}$ ؟ إن كانت كذلك فما هي القيمة الذاتية؟

الحل: أ-

$$[\hat{A}, \hat{B}]\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi = \frac{\partial}{\partial x}(-i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y})\Psi - (-i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y})\frac{\partial}{\partial x}\Psi$$

$$-i\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} + i\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial x} = 0$$

ب- $\hat{A}f(x, y) = \frac{\partial}{\partial x}(e^{-x+y}) = -e^{-x+y} = -f(x, y) \rightarrow \text{eigenvalue} = -1$

ج- $\hat{B}f(x, y) = \left(-i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)(e^{-x+y}) = -i\frac{\partial}{\partial x}(e^{-x+y}) + \frac{\partial}{\partial y}(e^{-x+y})$

$$= i(e^{-x+y}) + (e^{-x+y}) = (i+1)(e^{-x+y}) = (i+1)f(x, y)$$

$\therefore f(x, y)$ is an eigenfunction of $\hat{B}$, and the eigen value is $(i+1)$.

(10) جد ناتج $[\hat{x}, \hat{p}_y]$ ، وبيّن فيما إذا كان المؤثران تبادليين.

الحل: $[\hat{x}, \hat{p}_y]\Psi(r, t) = x\hat{p}_y\Psi(r, t) - \hat{p}_yx\Psi(r, t)$

$\therefore \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$

$\therefore [\hat{x}, \hat{p}_y]\Psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\Psi - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)x\Psi = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}\Psi - \frac{\partial}{\partial y}x\Psi\right)$

$= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}\Psi - x\frac{\partial}{\partial y}\Psi\right) = 0 \rightarrow \hat{x} \text{ and } \hat{p}_y \text{ are commutator operators.}$

(11) أثبت القاعدة التبادلية: $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$

الحل: $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}]\Psi = (\hat{A} + \hat{B})\hat{C}\Psi - \hat{C}(\hat{A} + \hat{B})\Psi$

$= \hat{A}\hat{C}\Psi + \hat{B}\hat{C}\Psi - \hat{C}\hat{A}\Psi - \hat{C}\hat{B}\Psi = (\hat{A}\hat{C}\Psi - \hat{C}\hat{A}\Psi) + (\hat{B}\hat{C}\Psi - \hat{C}\hat{B}\Psi)$

$= (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\Psi + (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})\Psi = [\hat{A}, \hat{C}]\Psi + [\hat{B}, \hat{C}]\Psi$

$\therefore [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$

(12) أثبت أن مؤثر الطاقة الحركية الذي يعطى بالعلاقة $(\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2})$ هو مؤثر هرميتي.

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = \hat{T}^* \quad \text{الحل :}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{T} \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \hat{T}^* \Psi_1^* dx \quad \text{Hermitian operator condition}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{T} \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi_2 dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi_2 dx$$

$$\text{Let } u = \Psi_1^* \rightarrow du = d\Psi_1^* \text{ and } dv = \frac{d^2}{dx^2} \Psi_2 dx \rightarrow v = \frac{d}{dx} \Psi_2$$

$$\begin{aligned} \therefore -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi_2 dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left| \Psi_1^* \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi_2}{dx} d\Psi_1^* \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left| \Psi_1^* \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi_2}{dx} \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx \end{aligned}$$

بما أن حاصل الضرب $\Psi_1^* d\Psi_2$ يتجه للصفر لأن الدالة الموجية تتلاشى في المالا نهائية، فإن الحد الأول

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left| \Psi_1^* \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad \text{سيساوي صفرًا:}$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi_2 dx = 0 + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi_2}{dx} \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx$$

وباستخدام التكامل بالتجزئة مرة ثانية وفق ما يلي:

$$\text{Let } u = \frac{d\Psi_1^*}{dx} \rightarrow du = \frac{d^2\Psi_1^*}{dx^2} = \frac{d^2\Psi_1^*}{dx^2} dx \text{ and } dv = \frac{d\Psi_2}{dx} dx \rightarrow v = \Psi_2$$

$$\begin{aligned} \therefore -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi_2 dx &= \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\Psi_1^*}{dx} \Psi_2 \right|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{d^2\Psi_1^*}{dx^2} dx \\ &= 0 - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{d^2\Psi_1^*}{dx^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi_1^* dx \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right)^* \Psi_1^* dx$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \hat{T} \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \hat{T}^* \Psi_1^* dx$$

(13) هل الدالة ($y = \cos x^2$) هي دالة ذاتية لمؤثر مربع الزخم $\hat{p}_x^2$.

الحل :

$$\begin{aligned}\hat{p}_x^2 \cos x^2 &= -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \cos x^2 = -\hbar^2 \frac{d}{dx} (-2x \sin x^2) \\ &= \hbar^2 (2 \sin x^2 + 2x \cdot 2x \cos x^2) = 2\hbar^2 \sin x^2 + 4\hbar^2 x^2 \cos x^2\end{aligned}$$

إذن هي ليست دالة ذاتية.

(14) أثبت أن الدالتين: $\left(\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a} x\right)$ و $\left(\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x\right)$ متعامدتان مع بعض.

الحل: لإثبات التعامد يجب تحقيق المعادلة:

$$\int_0^a \Psi_2^* \Psi_1 dx = 0$$

$$\begin{aligned}\int_0^a \Psi_2^* \Psi_1 dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{2\pi}{a} x \sin \frac{\pi}{a} x dx \\ &= \frac{4}{a} \int_0^a \sin^2 \frac{\pi}{a} x \cos \frac{\pi}{a} x dx \quad (\text{by using } \sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta)\end{aligned}$$

Let $u = \sin \frac{\pi}{a} x$, $\Rightarrow du = \frac{\pi}{a} \cos \frac{\pi}{a} x dx \Rightarrow u = 0$ for $x = 0$ and $u = 0$ for $x = a$

$$\therefore \frac{4}{a} \int_0^a \sin^2 \frac{\pi}{a} x \cos \frac{\pi}{a} x dx = \frac{4}{a} \frac{a}{\pi} \int_0^0 u^2 du = 0 = \int_0^a \Psi_2^* \Psi_1 dx$$

(15) تُعطى الدوال الموجية لجسيم يدور في حلقة دائرية بنصف قطر a بالعلاقة:

$$\Psi_m(\theta) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\theta}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2$$

حيث تصف θ الموقع الدائري للجسيم حول الحلقة، أي: $0 \leq \theta \leq 2\pi$. أثبت أن هذه الدوال تكون مجموعة عيارية تعامدية orthonormal.

الحل: لإثبات التعامد العياري يجب تحقق المعادلة:

$$\int \Psi_m^* \Psi_n dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases}$$

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \Psi_m^*(\theta) \Psi_n(\theta) d\theta &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\theta} e^{in\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta \\ \therefore e^{i\varphi} &= \cos \varphi + i \sin \varphi \\ \therefore \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^{2\pi} \cos(n-m)\theta d\theta + i \int_0^{2\pi} \sin(n-m)\theta d\theta \right)\end{aligned}$$

إذا جعلنا $m \neq n$ فإن التكاملين في الطرف الأيمن يتلاشيان بسبب أن كل منهما يمثل دائرة

مكتملة أو أكثر للجيب وللجيب تمام، وكما يلي:

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \Psi_m^*(\theta) \Psi_n(\theta) d\theta &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\sin(n-m)\theta}{(n-m)} \Big|_0^{2\pi} - i \frac{\cos(n-m)\theta}{(n-m)} \Big|_0^{2\pi} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi(n-m)} ((0-0) - i(1-1)) = 0 \quad \text{if } m \neq n\end{aligned}$$

أي إن الطرف الأيمن يساوي صفراً، وبالتالي سيتحقق شرط التعامد: $\int_0^{2\pi} \Psi_m^*(\theta) \Psi_n(\theta) d\theta = 0$
أما إذا كان $m = n$ فإن تكامل الجيب سيتلاشى لأن $\sin 0 = 0$ ، ولكن تكامل الجيب تمام سيساوي 2π لأن $[\cos(n-m)\theta = \cos(0)\theta = 1]$ أي إن:

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \cos(n-m)\theta d\theta &= \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi \\ \therefore \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta &= \frac{1}{2\pi} (2\pi) = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi} \Psi_m^*(\theta) \Psi_n(\theta) d\theta = 1\end{aligned}$$

وهذا يحقق شرط العيارية.

وإذا دمجنا الشرطين معاً (العيارية والتعامد) فستأخذ المعادلة الشكل التالي:

$$\int \Psi_m^* \Psi_n dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases}$$

ولهذا فإن الدوال $\Psi_m(\theta)$ تكون عيارية متعامدة.

الفصل الثالث الجسيم الحر The Free Particle

١-٣: مقدمة Introduction

سيكون الجسيم الحر التطبيق الاول لأسس الميكانيك الكمي التي عرضت في الفصل الثاني، وسنبحث في هذا الفصل الصفات الكمية للجسيم الحر في بعد واحد وفي ثلاثة أبعاد.

٢-٣: معادلة شرودنجر في بعد واحد Schrödinger Equation in One Dimension

من أسهل أنواع الحركة التي يمكن دراستها في مجالنا هذا هو حركة جسيم كتلته m يتحرك في اتجاه واحد حركة حرة، وليكن الاتجاه هو x ، وهذا يعني أنه ليس هناك أي نوع من القوى يؤثر على حركته. وبهذا فإن طاقته الكامنة V_x هي مقدار ثابت. وهنا نحاول إيجاد دوال الحالة لهذا النظام ومعرفة الطاقة المقابلة لكل منها عن طريق حل معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن:

$$H\Psi(r) = E\Psi(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad \text{أو :}$$

ولحالة الفضاء الحر يمكن أن نجعل الطاقة الكامنة تساوي صفراً ($V_x = 0$) خلال حركة الجسيم. وبالتالي فإن الطاقة الكلية هي طاقة حركية فقط.

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \left] \times -\frac{2m}{\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0 \quad \dots \dots 3.1$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}, \quad p = \hbar k \quad \rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

حيث k : العدد الموجي (wavenumber)

$$\therefore k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \dots \dots 3.2$$

$$\text{Sub. eq. 3.2 in eq. 3.1} \Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \quad \dots \dots 3.3$$

وهذه المعادلة مشابهة لمعادلة الحركة التوافقية البسيطة simple harmonic motion . ومن أمثلتها حركة الجسم في سلك مثبت من الطرفين بإحكام.

إن الحل العام للمعادلة 3.3 هو:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \dots \dots 3.4$$

ويمثل الحد الأول Ae^{ikx} موجة بسعة A تسير بالاتجاه الموجب لمحور x ، بينما يمثل الحد الثاني Be^{-ikx} موجة بسعة B تسير بالاتجاه السالب لمحور x .

ولإثبات أن كل حد في الطرف الأيمن للمعادلة 3.4 يمثل حلاً للمعادلة 3.3 يمكن التعبير عن هذه المعادلة بالصيغة التالية:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

وإذا أخذنا الحد الأول: ($\Psi_1 = Ae^{ikx}$) فإن مشتقته الأولى ستكون: $\left(\frac{d\Psi_1}{dx} = Aike^{ikx}\right)$ ومشتقته الثانية تصير:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} = Aik(ik)e^{ikx} = -k^2Ae^{ikx} = -k^2\Psi_1$$

وبعد تعويض هذه القيمة في المعادلة 3.3 سيكون من الواضح أن الحل العام للمعادلة سيكون:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = -k^2\Psi + k^2\Psi = 0$$

والحد الثاني ($\Psi_2 = Be^{-ikx}$) ستكون مشتقته الأولى: $\left(\frac{d\Psi_2}{dx} = -Bike^{-ikx}\right)$ ومشتقته الثانية:

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} = -Bik(-ik)e^{-ikx} = -k^2Be^{-ikx} = -k^2\Psi_2$$

وسيكون الحل العام للمعادلة 3.3:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = -k^2\Psi + k^2\Psi = 0$$

والآن نطبق الحل على بعض الحالات الخاصة للجسيم الحر:

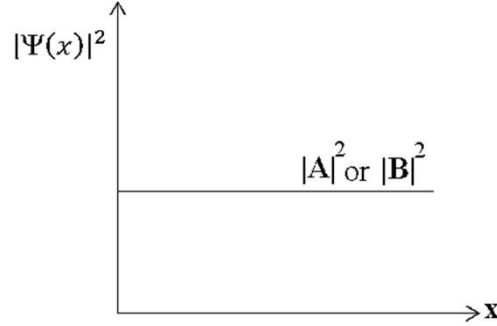
الحالة الأولى: إذا كان الجسم يتحرك بالاتجاه الموجب على المحور السيني x فإن الدالة التي تصف حركة هذا الجسم هي:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} \quad \dots \dots 3.5$$

وكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسم هي:

$$p = |\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x)\Psi(x) = A^*e^{-ikx}Ae^{ikx} = A^*A = |A|^2 \quad \dots \dots 3.6$$

وعند رسم $|\Psi(x)|^2$ مع x نحصل على الرسم البياني المبين في الشكل 1-3. وهذا يعني أن كثافة الاحتمالية عند أي نقطة تساوي مقداراً ثابتاً.



الشكل 1-3

الحالة الثانية: إذا كان الجسم يتحرك بالاتجاه السالب على المحور السيني x :

$$\Psi(x) = B e^{-ikx} \quad \dots \dots 3.7$$

وكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسم هي:

$$p = |\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x)\Psi(x) = B^* e^{ikx} B e^{-ikx} = B^* B = |B|^2 \quad \dots \dots 3.8$$

وكثافة الاحتمالية هذه عند أي نقطة تساوي مقداراً ثابتاً كما في الشكل 1-3.

الحالة الثالثة: إذا أخذنا بالاعتبار حركة الجسم في كلا الاتجاهين الموجب والسالب معاً:

$$\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \dots \dots 3.9$$

وكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسم هي:

$$\begin{aligned} p = |\Psi(x)|^2 &= \Psi^*(x)\Psi(x) = (A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx})(A e^{ikx} + B e^{-ikx}) \\ &= A^* A + B B^* + A^* B e^{-2ikx} + B^* A e^{2ikx} \quad \dots \dots 3.10 \end{aligned}$$

وإذا جعلنا $A = B$ (أي فرضنا تساوي عدد الجسيمات في كلا الاتجاهين) تصبح المعادلة 3.10 كما يلي:

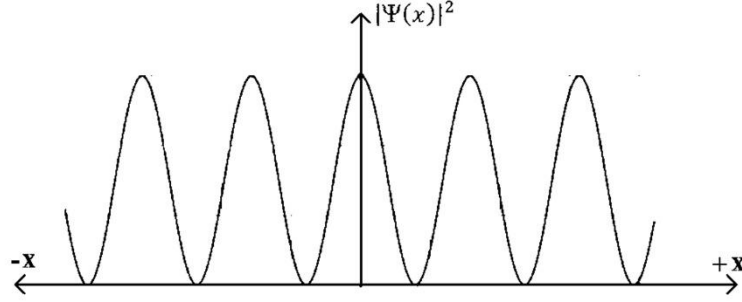
$$\begin{aligned} |\Psi(x)|^2 &= 2A^* A + A^* A (e^{-2ikx} + e^{2ikx}) = 2A^* A \left(1 + \frac{1}{2} (e^{2ikx} + e^{-2ikx}) \right) \\ &= 2A^* A (1 + \cos 2kx) = 4A^* A \cos^2 kx \quad \dots \dots 3.11 \end{aligned}$$

وعند رسم $|\Psi(x)|^2$ مع x نحصل على الشكل 2-3، وهذا يشير إلى أن الاحتمالية تتغير مع الموقع x .

ومن الملاحظ أنه لا توجد شروط حدودية على حل معادلة الجسم الحر (المعادلة 3.4) فإن

الثابت k يمكن أن يأخذ أية قيمة وكذلك الطاقة E ، وبذلك نحصل على طيف متصل لقيم الطاقة. ولذا نستطيع القول أن طاقة الجسم الحر تكون غير مكممة.

إن مسألة الجسيم الحر تدلنا على أحد التطبيقات لمبدأ اللادقة لهايزنبرك، ولما كانت الدالة $\Psi(x) = e^{ikx}$ تصف حالة الجسيم الذي زخمه $\hbar k$ الذي هو مقدار ثابت فإننا نعرف زخمه بدقة كاملة، أي إن اللادقة في زخم الجسيم هي $(\Delta p = 0)$ ، وهذا يعني وفق مبدأ اللادقة $(\Delta x \Delta p \geq \hbar)$ عدم معرفة موقع الجسيم بصورة كاملة، أي $(\Delta x = \infty)$.



الشكل 2-3

3-3. منخفض الجهد ذو الجدران الصلبة Square well potential with rigid walls

لنفرض أن جسيماً كتلته m يتحرك ببعد واحد بين $(x = 0)$ و $(x = a)$ داخل صندوق كما هو الحال لجزيء الغاز المحصور في صندوق ذي جدران صلبة، وفي هكذا حالة يكون الجهد (أو الطاقة الكامنة) داخل الصندوق صفراً $(V = 0)$ ، وفي باقي المناطق $(V = \infty)$ كما في الشكل 3-3:

$$V_x = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad \begin{array}{c} V = \infty \\ \Psi = 0 \end{array} \left| \begin{array}{c} V = 0 \\ \Psi = C \sin kx \end{array} \right| \begin{array}{c} V = \infty \\ \Psi = 0 \end{array} \quad \begin{array}{c} x = 0 \\ x = a \end{array}$$

الشكل 3-3: رسم تخطيطي لمنخفض جهد ذي بعد واحد عرضه a .

ولما كانت حركة الجسيم مقيدة في المنطقة المحصورة بين $(x = 0)$ و $(x = a)$ ونظراً لوجود جدران صلبة عند نهايتي الصندوق، أي إن $(V(x) = \infty)$ فإن الجسيم لا يستطيع أن يخترق الجدران وينفذ إلى الخارج عند اصطدامه بها، وعليه فإن حركته تكون مقيدة بين جدران الصندوق.

والمطلوب الآن هو تعيين دوال الحالة لهذا الجسيم والطاقة المصاحبة لكل دالة منها. ولحل هذه المسألة نحل معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن T.I.S.E. بعد أن نفرض عليها الشروط الحدودية

boundary conditions التي يجب على الدالة $\Psi(x)$ أن تحققها. ويمكن أن نميز في الشكل 3-3 منطقتين أساسيتين، وهما المنطقة خارج منخفض الجهد والمنطقة داخله.

١- المنطقة خارج الصندوق: هنا $(V = \infty)$ ، ومعادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن ستكون بالشكل:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi(x) = \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \infty)\Psi(x) = 0$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(\infty - E)\Psi(x) = \infty\Psi(x) \quad \dots \dots 3.12$$

والحل الوحيد لهذه المعادلة هو $(\Psi(x) = 0)$ ، وهذا يعني أن كثافة الاحتمالية $\Psi^*\Psi$ خارج الصندوق تساوي صفراً، أي إنه لا يوجد احتمال لتواجد الجسيم خارج الصندوق، ويعني هذا أن الجسيم يتحرك فقط داخل منخفض الجهد بين $(x = 0)$ و $(x = a)$.

٢- المنطقة داخل الصندوق: هنا $(V = 0)$ ، وتتخذ معادلة شرودنجر الشكل:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi(x) = 0$$

وهذه المعادلة مماثلة لمعادلة الجسيم الحر التي مرت علينا في الفقرة السابقة، وحلها يكون أيضاً بالصيغة التالية:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{where: } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

ولإيجاد المقدارين الثابتين A و B نستخدم الشرطين الحدوديين التاليين:

1. $\Psi(x = 0) = 0$
2. $\Psi(x = a) = 0$

إن هذين الشرطين سببهما أن الدالة الموجية Ψ تتلاشى وتصبح قيمتها صفراً عندما $(x = 0)$ و $(x = a)$ لأن $(V = \infty)$ عند الجدران فلا تسمح للجسيم باختراقها.

وبتطبيق الشرط الأول عندما $(x = 0)$:

$$\Psi(0) = 0 = Ae^{ik0} + Be^{-ik0} = A + B \quad \Rightarrow \quad A = -B$$

وعندئذ تأخذ الدالة $\Psi(x)$ الشكل التالي:

$$\Psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx})$$

$$\text{But } e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$$

$$\therefore \Psi(x) = A(\cos kx + i \sin kx - \cos kx + i \sin kx) = 2iA \sin kx$$

$$\text{Let } 2iA = C \rightarrow \Psi(x) = C \sin kx \quad \dots \dots 3.13$$

وبتطبيق الشرط الحدودي الثاني عندما $(x = a)$ وتعويضه في المعادلة 3.13:



$$\Psi(x = a) = C \sin ka = 0 \quad \dots \dots 3.14$$

وهنا المقدار الثابت C لا يساوي صفراً،

$$\therefore \sin ka = 0 \Rightarrow ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \quad \dots \dots 3.15$$

حيث n : عدد صحيح موجب $n = 1, 2, 3, \dots$

وبتعويز قيمة k في المعادلة 3.13 نحصل على الدالة الموجية وقيم طاقة الجسيم داخل صندوق الجهد:

$$\Psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi x}{a} \quad \dots \dots 3.16$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \dots \dots 3.17 \quad \text{where: } E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

تمثل المعادلة 3.16 الدوال الموجية المنتمية للطاقات المسموح بها في المعادلة 3.17، وهذه الدوال تحقق جميع شروط الدالة المقبولة (أحادية القيمة ومربعها قابل للتكامل وقابلة للاشتقاق ومستمرة هي ومشتقتها الأولى - راجع "شروط دالة الموجة" الفقرة ٢-٦).

استنتاجات: نستطيع أن نستنتج من معادلة الطاقة 3.17 عدة نقاط مهمة:

أولاً: تكون طاقة الجسيم داخل الصندوق كمومية quantized أي تأخذ قيماً محددة (كمومية)، وهذه القيم تشكل مستويات الطاقة كما مبين في الشكل 4-3:

$$\text{When } n = 1 \Rightarrow E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$n = 2 \Rightarrow E_2 = 4 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow E_2 = 4E_1$$

$$n = 3 \Rightarrow E_3 = 9 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow E_3 = 9E_1$$

ويمثل أوطاً مستوى طاقة ($n = 1$) الحالة الأرضية التي تمثل الحالة المستقرة. وأما الحالات (المستويات) الأخرى ($n = 2, 3, 4, \dots$) فتسمى بالحالات المتهيجة.

$$n = 4 \text{ ————— } E_4 = 16E_1$$

$$n = 3 \text{ ————— } E_3 = 9E_1$$

$$n = 2 \text{ ————— } E_2 = 4E_1$$

$$n = 1 \text{ ————— } E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

الشكل 4-3: مستويات الطاقة لجسيم داخل صندوق ذي بعد واحد.



ثانياً: لا يمكن للعدد الكمي n أن يساوي صفراً، وهذا يعني عدم وجود موجة أو جسيم (أي إن $\Psi = 0$)، وهذا مخالف لما فرضناه من وجود جسيم داخل الصندوق. أما من وجهة نظر الميكانيك التقليدي فتكون جميع قيم الطاقة مسموحة، ومن ضمنها الصفر.

ثالثاً: إن الطاقة تتناسب عكسياً مع m و a^2 ، لذا فإن زيادة عرض الصندوق a ستؤدي إلى قيم طاقة أكثر تقارباً وعندما تقترب a من المالا نهاية فإن مستويات الطاقة تقترب مع بعضها وتصبح متصلة، وهذه الحالة مشابهة للأطياف الذرية المستمرة. ونحصل على نفس الحالة عندما تكون كتلة الجسيم كبيرة جداً.

مثال ٣-١: أثبت أن الأطوال الموجية المتاحة للجسيم في صندوق الجهد ذي البعد الواحد تُعطى بالعلاقة $(\lambda = \frac{2a}{n})$.

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad \text{الحل :}$$

وبالتعويض عن قيمة p من معادلة دي برولي $(p = \frac{h}{\lambda})$ ينتج أن:

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad \dots \dots 3.18$$

ومن المعادلة 3.17:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2\pi^2(h/2\pi)^2}{2ma^2} = \frac{n^2h^2}{8ma^2} \quad \dots \dots 3.19$$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m \times \frac{n^2h^2}{8ma^2}}} = \frac{h}{\sqrt{\frac{n^2h^2}{4a^2}}} = \frac{h}{\frac{nh}{2a}} = \frac{2a}{n}$$

مثال ٣-٢: احسب الطاقة الأرضية والطول الموجي المصاحب لها للإلكترون يتحرك في جزيء خطي طوله (0.77658 nm) .

الحل: لإيجاد الطاقة الأرضية نعوض في المعادلة: $(E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2})$ حيث: $(n = 1)$ لأن الإلكترون في الحالة الأرضية، و $(a = 0.77658 \text{ nm} = 0.77658 \times 10^{-9} \text{ m})$ و $(m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})$.

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2} = \frac{(1)^2 \times (6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{8 \times (9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}) \times (0.77658 \times 10^{-9} \text{ m})^2} = \frac{4.39 \times 10^{-67}}{4.39 \times 10^{-48}} = 1 \times 10^{-19} \text{ J}$$

لإيجاد الطول الموجي المصاحب لهذه الطاقة نعوض في المعادلة 3.18:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{\sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 10^{-19} \text{ J}}} = 1.553 \times 10^{-9} \text{ m} = 1.553 \text{ nm}$$

حل آخر: بالتعويض المباشر في المعادلة $(\lambda = \frac{2a}{n})$ في المثال السابق لحساب الطول الموجي أولاً ثم استخدامه لحساب الطاقة:

$$\lambda = \frac{2a}{n} = \frac{2 \times 0.77658 \times 10^{-9} m}{1} = 1.553 \times 10^{-9} m = 1.553 \text{ nm}$$

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{(6.626 \times 10^{-34} J.s)^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-31} kg \times (1.553 \times 10^{-9} m)^2} = 1 \times 10^{-19} J$$

تطبيق شرط المعايرة: لإيجاد الثابت C للمعادلة $(\Psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi x}{a})$ نستخدم الشرط العياري للدوال الموجية، أي:

$$\int \Psi_n^*(x) \Psi_n(x) dx = 1$$

$$\int C^* \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) C \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = |C|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

وباستخدام العلاقة: $\sin^2 \theta = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta)$

$$\frac{1}{2} |C|^2 \int_0^a (1 - \cos 2 \frac{n\pi x}{a}) dx = 1$$

$$\frac{1}{2} |C|^2 \left\{ \int_0^a dx - \int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \right\} = \frac{1}{2} |C|^2 \left\{ [x]_0^a - \left(\frac{a}{2n\pi}\right) \left[\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_0^a \right\} = 1$$

$$= \frac{1}{2} |C|^2 \left\{ (a - 0) - \left(\frac{a}{2n\pi}\right) (0 - 0) \right\} = \frac{1}{2} |C|^2 a = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\therefore \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad \dots \dots 3.20$$

والاحتمالية داخل منخفض الجهد عند أي نقطة $\Psi^* \Psi$ تُعطى بالعلاقة:

$$|\Psi|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi x}{a} \quad \dots \dots 3.21$$

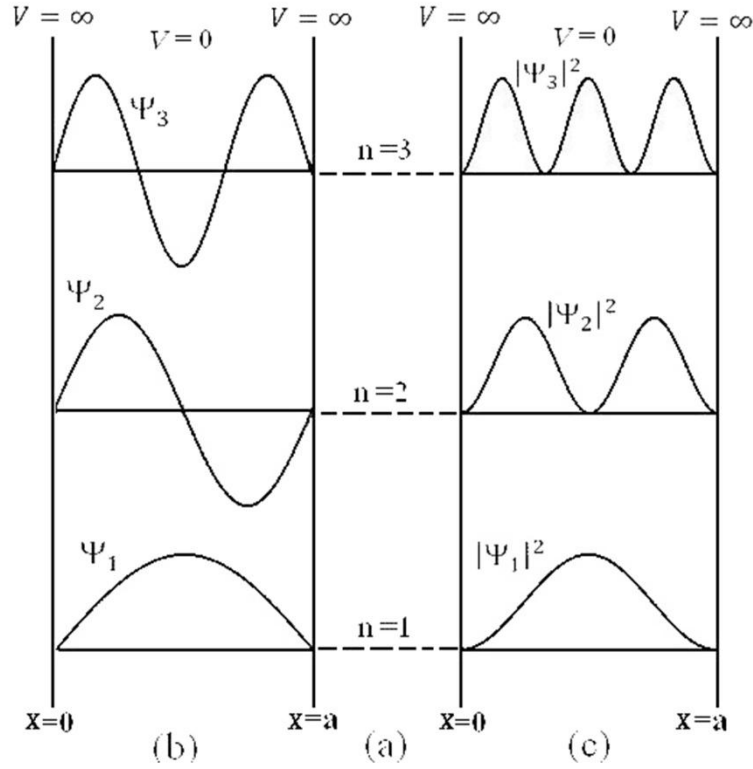
ويوضح الشكل 3-5 الدوال الموجية لمستويات الطاقة الثلاثة الأولى وكثافة الاحتمالية المناظرة لهذه الدوال.

تطبيق شرط التعامد: ذكرنا في فقرة "٢-١٢: التعامد العياري" أن النظام له عدة حالات يمكن وصف كل منها بدالة موجة مستقلة عن الدوال الأخرى، أي إن هناك مجموعة كاملة من الدوال عناصرها $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_n$ تصف الحالات المختلفة للنظام، وكل دالة هي عيارية، وكل دالتين هما متعامدتان مع بعض. وقد أثبتنا في الفقرة السابقة عيارية الدالة $(\Psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi x}{a})$ ، أما التعامد بين الدوال Ψ_n

فقد أثبتناه في المثال 14 من "أمثلة متنوعة" في الفصل الثاني لدالتين كانت قيمة n لإحدهما تساوي 1 وللأخرى تساوي 2.

وبهذا يمكن التعبير عن العيارية والتعامد في صندوق الجهد ذي البعد الواحد بالصيغة:

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \int \Psi_i^* \Psi_j dx = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases} \quad \dots \dots 3.22$$



الشكل 3-5: لجسيم داخل صندوق ذي بعد واحد: (a) مستويات الطاقة المسموح بها، (b) دوال الموجة، (c) كثافة الاحتمالية.

تطبيق مبدأ التطابق (التقابل) Correspondence Principle: كما يلاحظ من الشكل 3-5 توجد نقاط على طول الصندوق تكون عندها الدالة الموجية $\Psi(x) = 0$ وبالتالي $|\Psi(x)|^2 = 0$ ، أي لا يوجد احتمال لوجود الجسيم عند هذه النقاط، وتعرف هذه النقاط بـ "العقد" nodes، ومن الملاحظ أن عدد العقد في كل دالة حالة يساوي $(n - 1)$ حيث n رقم الكم المميز للحالة (مع استبعاد العقد عند حدود الصندوق $(x = 0)$ و $(x = a)$ لأنها من شروط الحركة)، ويتناسب هذا العدد طردياً مع طاقة الحالة $(E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2})$. ويمكن تفهم هذا التناسب الطردي عن طريق علاقة دي برولي $(\lambda = \frac{h}{p})$ ، فزيادة عدد

العقد في نفس الطول تعني قصر الطول الموجي λ الذي يتناسب عكسياً مع الزخم الخطي p ، أي إن زيادة عدد العقد تعني زيادة الزخم وبالتالي زيادة الطاقة الحركية لأن الزخم يتناسب طردياً مع الطاقة الحركية $(E = \frac{p^2}{2m})$.

ويتضح من الشكل 3-5 أنه كلما زادت n زاد عدد النقاط المتساوية في الاحتمالية، وحيث إن طول الصندوق ثابت فإن هذه النقاط تتقارب مع بعضها البعض، وعند قيم كبيرة جداً لعدد الكم n فإن هذه النقاط متساوية الاحتمالية ستتقارب إلى الحد الذي لا يمكننا التفريق بينها، وبالتالي سيبدو وكأن الاحتمالية متساوية في جميع النقاط على طول الصندوق، وهذه النتيجة تقارب النتيجة في الميكانيك التقليدي. ويمكن تلخيص هذه النتيجة بأنه عند قيم كبيرة جداً لعدد الكم n تتطابق نتائج الميكانيك الكمي مع نتائج الميكانيك التقليدي. لاحظ المثال الثالث أدناه.

مثال 3-3: احسب طاقة الحالة الأرضية E_1 والفرق في الطاقة $(\Delta E = E_2 - E_1)$ بين الحالة $(n = 2)$ والحالة المستقرة $(n = 1)$ لكل من:

أ- إلكترون (كتلته $9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$) يتحرك على محور واحد في صندوق طوله 1 nm .

ب- كرة منضدة (كتلتها 1 gm) تتحرك على محور واحد في صندوق طوله 1 m .

الحل: يمكن استخدام المعادلة 3.19 لحساب الطاقة.

أ- بالنسبة للإلكترون:

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{8 \times (9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}) \times (10^{-9} \text{ m})^2} = 6.03 \times 10^{-20} \text{ J}$$

$$E_2 = 4E_1 = 4 \times 6.03 \times 10^{-20} = 2.41 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 2.41 \times 10^{-19} - 6.03 \times 10^{-20} = 1.807 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$= \frac{1.807 \times 10^{-19}}{1.6 \times 10^{-19}} = 1.129 \text{ eV}$$

ب- بالنسبة لكرة المنضدة:

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{8 \times 10^{-3} \text{ kg} \times (1 \text{ m})^2} = 5.49 \times 10^{-65} \text{ J}$$

$$E_2 = 4E_1 = 4 \times 5.49 \times 10^{-65} = 2.19 \times 10^{-64} \text{ J}$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 2.19 \times 10^{-64} - 5.49 \times 10^{-65} = 1.64 \times 10^{-64} \text{ J}$$

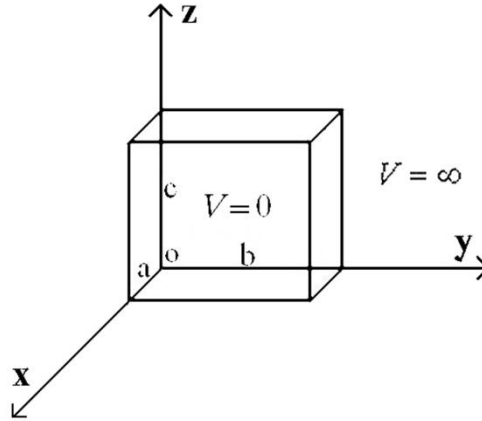
$$= \frac{1.64 \times 10^{-64}}{1.6 \times 10^{-19}} = 1.025 \times 10^{-45} \text{ eV}$$

من هذا المثال يتضح أنه في حالة الإلكترون فإن الفرق في الطاقة بين الحالة الأولى والثانية (1.129 eV) هو فرق محسوس ويمكن قياسه. أما بالنسبة لكرة المنضدة فإن هذا الفرق صغير جداً ($1.025 \times 10^{-45} \text{ eV}$) لا يُحسَّس ولا يقاس عملياً، ولهذا فإن الحالتين ($n = 1$) و ($n = 2$) تبدوان وكأنهما متطابقتان، وكذلك باقي الحالات. أي إن الطاقة تبدو وكأنها مستمرة وغير مكتمة، وهذه نتيجة تقليدية. ويمكن أن نعبر عن هذا الاستنتاج بما يلي: في حالة الأجسام الكبيرة حيث تكون ($h^2 \ll ma^2$) فإن النتائج الكمية والتقليدية تتطابق، وهذه إحدى صور قاعدة التطابق.

٤-٣: الجسيم الحر في صندوق الجهد ذي الأبعاد الثلاثة

The Free Particle in a Potential Box in Three Dimensions

نبحث الآن حالة الجسيم الحر في صندوق الجهد الذي أبعاده a و b و c على التوالي، ولنفرض أن أضلاع الصندوق مطابقة للمحاور الكارتيذية (x, y, z)، وتقع نقطة الاصل 0 في إحدى زواياه كما في الشكل 6-3. ويكون الجهد داخل الصندوق $V = 0$ ، أما خارج الصندوق فإن $V = \infty$.



الشكل 6-3: صندوق أبعاده a و b و c

وتكون معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن داخل الصندوق كما يلي:

$$\nabla^2 \Psi(x, y, z) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \Psi(x, y, z)$$

$$\text{From eq. 3.2: } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\therefore \nabla^2 \Psi(x, y, z) = -k^2 \Psi(x, y, z) \quad \dots \dots 3.23$$

$$\nabla^2 \Psi(x, y, z) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(x, y, z)$$

ولحل المعادلة 3.23 نستخدم طريقة فصل المتغيرات باعتبار أن الدالة $\Psi(x, y, z)$ تساوي حاصل ضرب ثلاث دوال بالشكل التالي:

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(x)\Psi(y)\Psi(z) \quad \dots \dots 3.24$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, y, z) &= \Psi(y)\Psi(z) \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(x, y, z) &= \Psi(x)\Psi(z) \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(x, y, z) &= \Psi(x)\Psi(y) \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} \end{aligned} \right\} \quad \dots \dots 3.25$$

Sub. eq. 3.25 in eq. 3.23 $\Rightarrow$

$$\Psi(y)\Psi(z) \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \Psi(x)\Psi(z) \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} + \Psi(x)\Psi(y) \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} = -k^2 \Psi(x, y, z) \quad \dots 3.26$$

وبالقسمة على $\Psi(x)\Psi(y)\Psi(z)$

$$\frac{1}{\Psi(x)} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\Psi(y)} \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} + \frac{1}{\Psi(z)} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} = -k^2 \quad \dots \dots 3.27$$

لا بد أن تتحقق المعادلة 3.27 لكل قيم المتغيرات (x, y, z) ، لكنه من الملاحظ أن الحدود الثلاثة في الطرف الأيسر مستقلة عن بعضها، أي عندما تتغير قيمة x فإن الحد الأول هو الذي يتأثر فقط ولا يتغير الحدان الثاني والثالث، وعند تغيير قيمة y فإن الحد الثاني فقط هو الذي يتغير ويبقى الحدان الأول والثالث ثابتين، والأمر نفسه لـ z في الحد الثالث، ولكي يتحقق هذا التساوي مع الاستقلال يجب أن تساوى الحدود من خلال ثابت، أي إن كل حد يجب أن يساوي ثابتاً، ولتكن هذه الثوابت $(-k_x^2, -k_y^2, -k_z^2)$ وبهذا يمكن فصل المعادلة 3.27 إلى ثلاث معادلات:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + k_x^2 \Psi(x) &= 0 \\ \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} + k_y^2 \Psi(y) &= 0 \\ \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + k_z^2 \Psi(z) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad \dots \dots 3.28 \quad (\text{where: } k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

والحل العام لكل من هذه المعادلات الثلاثة هو كما في المعادلتين السابقتين 3.4 و 3.13:

$$\left. \begin{aligned} \Psi(x) &= A_x e^{ik_x x} + B_x e^{-ik_x x} \rightarrow \Psi(x) = C_x \sin k_x x \\ \Psi(y) &= A_y e^{ik_y y} + B_y e^{-ik_y y} \rightarrow \Psi(y) = C_y \sin k_y y \\ \Psi(z) &= A_z e^{ik_z z} + B_z e^{-ik_z z} \rightarrow \Psi(z) = C_z \sin k_z z \end{aligned} \right\} \quad \dots \dots 3.29$$

From eq. 3.24 $\Rightarrow$

$$\Psi(x, y, z) = C_x \sin k_x x \cdot C_y \sin k_y y \cdot C_z \sin k_z z \quad (\text{where } C_x, C_y, C_z \text{ are constants})$$

$$\text{From eq. 3.16} \Rightarrow \Psi(x, y, z) = C_x \sin \frac{n_x \pi x}{a} \cdot C_y \sin \frac{n_y \pi y}{b} \cdot C_z \sin \frac{n_z \pi z}{c} \quad \dots \dots 3.30$$

حيث (n_x, n_y, n_z) أعداد كمية صحيحة موجبة تأخذ القيم $(1, 2, 3, \dots)$

$$\Psi(x, y, z) = C \sin \frac{n_x \pi x}{a} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{b} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{c} \quad \dots \dots 3.31 \quad (\text{where } C = C_x C_y C_z)$$

ومن المعادلة 3.20 فإن قيم ثوابت المعايرة (C_x, C_y, C_z) هي على الترتيب $\left(\sqrt{\frac{2}{a}}, \sqrt{\frac{2}{b}}, \sqrt{\frac{2}{c}}\right)$

وبالتالي فإن قيمة C ستساوي: $\left(C = \sqrt{\frac{8}{abc}}\right)$ ، وبهذا تصير المعادلة 3.31:

$$\Psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{b} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{c} \quad \dots \dots 3.32$$

سؤال: جد طاقة جسيم في صندوق جهد ذي ثلاثة أبعاد.

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad \text{and} \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad (\text{from eq. 3.15}) \Rightarrow k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \quad \text{الحل:}$$

$$\text{and} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{from eq. 3.2})$$

$$\therefore k^2 = \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \dots \dots 3.33$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

وعندما يكون الصندوق مكعباً فإن $(a = b = c = L)$

$$\therefore E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad \dots \dots 3.34$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 (h/2\pi)^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad \dots \dots 3.35$$

وبذلك تكون طاقة الحالة الأرضية التي تقابل $(n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1)$ للصندوق مكعب الشكل

هي:

$$E_{111} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2} \quad \dots \dots 3.36$$

$$\text{From eq. 3.19: } E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \rightarrow E_{111} = 3E_1$$

أما في الحالات التالية:

$$\begin{array}{lll} n_x = 2 & n_x = 1 & n_x = 1 \\ n_y = 1 & n_y = 2 & n_y = 1 \\ n_z = 1 & n_z = 1 & n_z = 2 \end{array}$$

فإن هذا يعني وجود ثلاث دوال موجية حسب المعادلة 3.32 ولها نفس الطاقة حسب المعادلة 3.34 ، أي:

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{6\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 2E_{111} = 6E_1$$

إذن توجد ثلاث دوال منحلة تعود لمستوى طاقة واحد. وإن درجة الانحلال N لمستوى طاقة معين يساوي عدد الدوال الموجية المختلفة (المستقلة) لطاقة معينة، أي يساوي عدد التراكيب الممكنة لمجموعة الأعداد الكمية التي تعود لنفس القيمة $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ أو لنفس الطاقة. لاحظ الجدول 1-3 والشكل 7-3.

مثال 3-4: جسيم كتلته m يتحرك في صندوق مكعب طول ضلعه L ، فإذا كانت إحدى مجموعات أعداد الكم هي: $(n_x = 2, n_y = 1, n_z = 3)$ فاحسب طاقة هذا المستوى وبيّن عدد الدوال الموجية المختلفة التي لها نفس الطاقة.

الحل: تُحسب طاقة الجسيم الذي يتحرك في ثلاثة أبعاد وفق المعادلة 3.35:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

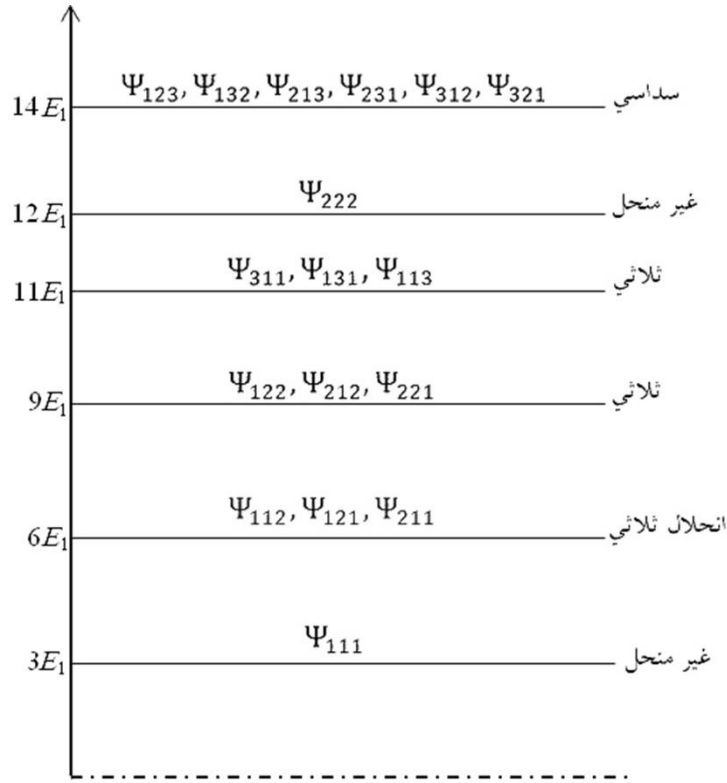
$$E_{213} = \frac{h^2}{8mL^2} (2^2 + 1^2 + 3^2) = 14 \frac{h^2}{8mL^2} \text{Joul}$$

وباستخدام تبادلات الأرقام يتبين وجود ست مجموعات للأعداد (n_x, n_y, n_z) تعطي نفس الطاقة، ولهذا فإن درجة الانحلال تساوي ٦، أي يوجد ست دوال مختلفة لها نفس القيمة الذاتية (نفس الطاقة).

الجدول 1-3: مستويات الطاقة الستة الأولى ودرجة الانحلال المقابلة لها لجسيم

كتلته m يتحرك في صندوق مكعب طول ضلعه L .

الطاقة $E_{n_x n_y n_z}$	التراكيب الممكنة لـ n_x, n_y, n_z	درجة الانحلال N
$E_{111} = 3E_1$	(1,1,1)	1
$E_{112} = 6E_1$	(1,1,2) (1,2,1) (2,1,1)	3
$E_{122} = 9E_1$	(1,2,2) (2,1,2) (2,2,1)	3
$E_{311} = 11E_1$	(3,1,1) (1,3,1) (1,1,3)	3
$E_{222} = 12E_1$	(2,2,2)	1
$E_{123} = 14E_1$	(1,2,3) (1,3,2) (2,1,3) (2,3,1) (3,1,2) (3,2,1)	6



الشكل 3-7: مستويات الطاقة ودرجة انحلالها ودوالها الذاتية لجسيم في صندوق.

3-5: كثافة الحالات Density of States

في هذا البند نناقش عدد مستويات الطاقة لمدى صغير من الطاقة لجسيم في داخل صندوق كبير جداً، وهذا الموضوع له تطبيقات عديدة في مجال فيزياء الحالة الصلبة والثرموديناميك والفيزياء النووية. وتصف كثافة الحالات لنظام (أو كثافة المستويات) عدد الحالات لمدى طاقة عند كل مستوى طاقة قابل لأن يكون مشغولاً.

يُعطى عدد مستويات الطاقة في صندوق مكعب الشكل وفق المعادلة 3.34 كما يلي:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

حيث n_x, n_y, n_z أعداد صحيحة موجبة. وقد كان الكلام في البند السابق عن صندوق صغير جداً، أي إن طول الضلع L صغير جداً، ولهذا تكون مستويات الطاقة متباعدة عن بعضها مما يشكل طيفاً خطياً. أما في حالة صندوق كبير (أي L كبير) فتكون مستويات الطاقة متقاربة مع بعضها لدرجة يمكن اعتبارها عملياً طيفاً متصلاً (مستمراً) كما هو الحال لجزيئات الغاز في وعاء أو الإلكترونات في معدن.

لنحسب الآن عدد الحالات في مدى صغير للطاقة مقداره dE عندما يكون صندوق الجهد كبيراً جداً، وندخل المحاور x, y, z لتمثل فضاءً معيناً كما في الشكل 8-3 حيث تمثل النقطة الواحدة في هذا الفضاء مستوى طاقة معين، وكل نقطة تقابل خلية لوحدة الحجم في هذا الفضاء. ولنفرض النقطة P في هذا الفضاء التي لها الاحداثيات n_x, n_y, n_z وتقع على سطح كرة نصف قطرها k بحيث:

$$k^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

ولهذا يكون عدد النقاط التي لها احداثيات بأعداد صحيحة موجبة وتقع على سطح الكرة التي نصف قطرها k مساوياً لعدد الحالات المرافقة لذلك المستوى من الطاقة:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} k^2 \quad \dots \dots 3.37$$

ولإيجاد عدد الحالات $N(E)$ ذات طاقة بين الصفر و E فإن هذا يستوجب حساب جزء الكرة الذي تمتلك فيه الأعداد الكمية n_x, n_y, n_z قيمة موجبة فقط، وهذا الجزء يشكل ثمن حجم الكرة التي نصف قطرها k وعليه يكون:

$$N(E) = \frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi k^3 \right) = \frac{\pi}{6} k^3 \quad \dots \dots 3.38$$

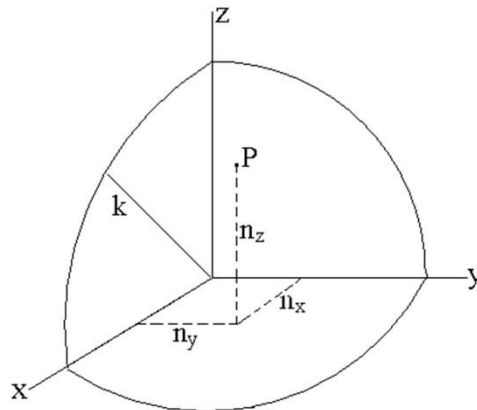
$$\text{From eq. 3.37: } k^2 = \frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \rightarrow k^3 = \left(\frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \quad \dots \dots 3.39$$

Sub eq. 3.39 in eq. 3.38 $\Rightarrow$

$$N(E) = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2mL^2 E}{\pi^2 \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2} \right)^{3/2} = \frac{8\pi L^3}{3h^3} (2m^3)^{1/2} E^{3/2}$$

$$N(E) = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m^3)^{1/2} E^{3/2} \quad \dots \dots 3.40$$

حيث $V = L^3$ هو حجم الصندوق المكعب.



الشكل 8-3

وللحصول على عدد الحالات بطاقة محصورة بين E و $E + dE$ نفاضل المعادلة الأخيرة:

$$dN(E) = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m^3)^{1/2} dE^{3/2} = \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} dE \quad \dots \dots 3.41$$

ليكن $dN(E) = g(E)dE$

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} \quad \dots \dots 3.42$$

حيث $g(E)$: كثافة الحالات، وهي عدد الحالات لكل وحدة من الطاقة عند الطاقة E ، وتُستخدم المعادلة 3.42 في موضوع الميكانيك الإحصائي الكمي الذي يدخل في مواضيع فيزياء الحالة الصلبة والحسابات النظرية لاضمحلال بيتا في الفيزياء النووية.

في بعض الحالات يُفضل كتابة عدد الحالات ضمن مدى الزخم dP المحصور بين الزخم P والزخم $P + dP$ بدلاً من مدى الطاقة سالف الذكر. ويمكن الحصول على ذلك باعتبار أن الجسيم داخل الصندوق هو جسيم حر وطاقته $E = \frac{p^2}{2m}$. فإذا عرفنا $g(P)$ بحيث:

$$dN = g(P)dP = g(E)dE \quad \dots \dots 3.43$$

$$\frac{dN}{dP} = g(P) = g(E) \frac{dE}{dP} \quad \dots \dots 3.44 \quad \text{فإن :}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow E^{1/2} = \frac{P}{(2m)^{1/2}} \quad \text{and} \quad \frac{dE}{dP} = \frac{d\left(\frac{P^2}{2m}\right)}{dP} = \frac{P}{m}$$

From eq. 3.42 and eq. 3.44 $\Rightarrow$

$$g(P) = \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} \frac{P}{(2m)^{1/2}} \frac{P}{m}$$

$$g(P) = \frac{4\pi V}{h^3} P^2 \quad \dots \dots 3.45$$

ويمكن استخدام هذه المعادلة أيضاً لحساب الأنماط modes لتذبذب الموجات الكهرومغناطيسية

في تجويف cavity حجمه V . ونستخدم في مثل هذه الحالة التردد f وسرعة الطور للموجة v حيث:

$$P = \frac{h}{\lambda} = \frac{hf}{v} \rightarrow P^2 = \frac{h^2 f^2}{v^2}, \quad \frac{dP}{df} = \frac{h}{v}$$

$$g(f)df = g(P)dP \quad \dots \dots 3.46$$

From eq. 3.45 $\Rightarrow$

$$g(f) = g(P) \frac{dP}{df} = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{h^2 f^2}{v^2} \frac{h}{v}$$

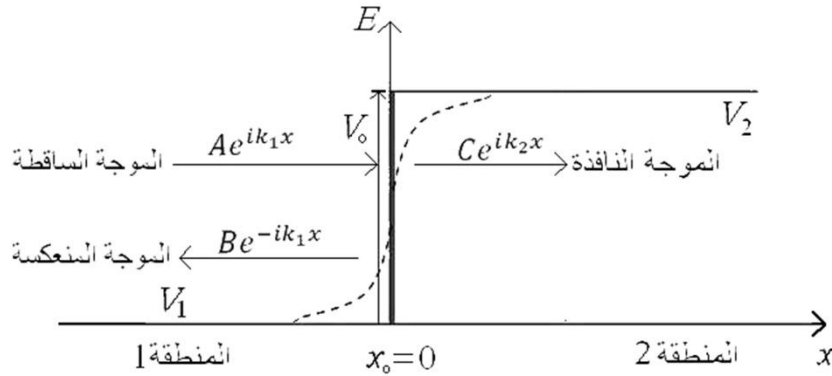
$$g(f) = \frac{4\pi V}{v^3} f^2 \quad \dots \dots 3.47$$

٦-٣: الانعكاس والنفاذ عند حاجز جهد

Reflection and Transmission at a Potential Barrier

حينما تطرقنا إلى صندوق الجهد ذي البعد الواحد فقد كان الصندوق ذا ارتفاع لا نهائي أي إن الطاقة الكامنة عنده $(V = \infty)$. وفي هذه الفقرة نناقش نفاذية وانعكاس جسيم ساقط على عتبة جهد (مدرج جهد) potential step ذي ارتفاع محدود. ووفق الميكانيك التقليدي فإن جسيماً كتلته m سينفذ خلال العتبة أو الحاجز إذا كانت طاقته أكبر من جهد العتبة وينعكس ويرتد إن كانت طاقته أقل من جهد العتبة. وتختلف الحالة في الميكانيك الكمي فليس من الضروري أن ينفذ الجسيم من الحاجز حتى لو كانت طاقته أكبر من جهد العتبة.

لنفرض وجود جسيم ذي طاقة E وكتلة m يسقط من جهة اليسار على عتبة جهد ذات طاقة عند x_0 $\{V_0(x) = V_2(x) - V_1(x)\}$ ، وتساوي قيمة الطاقة الكامنة صفراً عندما $(x < 0)$ أي عند V_1 ، وتساوي V_2 عندما $(x > 0)$. وتحدث عتبة الجهد أحادي البعد عند الحد بين المنطقة ١ والمنطقة 2. وفي الواقع فإن الجهد لا يتغير بصورة فجائية وإنما بصورة متدرجة كما موضح بالمنحنى المنقط في الشكل، وسبب معالجتنا للموضوع على أساس الخط المتصل (التغيير الفجائي) هو لتجنب التعقيدات الرياضية.



الشكل 9-3

عند النقطة x_0 تتغير الطاقة الكامنة تغيراً محدوداً من $(V(x) = 0)$ إلى $(V(x) = V_0)$ حيث V_0 هنا تمثل مقداراً ثابتاً. وينبغي في هذه النقطة أن تكون الدالة الموجية $\Psi(x)$ متصلة، وكذلك مشتقتها $\Psi'(x)$. كما يجب أن تتصرف الدالة الموجية $\Psi(x)$ تصرفاً مقبولاً بحيث:

$$\Psi(x) = 0 \quad \text{when } x \rightarrow \pm\infty$$

ويُعتبر الجسيم حراً في المنطقتين ما عدا بالقرب من نقطة الأصل x_0 حيث يتعرض عند اصطدامه بحاجز الجهد عند هذه النقطة لقوة دفع تتجه نحو اليسار بسبب القوة التي تمثلها العلاقة:

$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad \dots \dots 3.48$$

وباستعمال معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن للمنطقتين:

في المنطقة الأولى، عندما $(x < 0)$ ، أي: $(V(x) = 0) \leftarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} = E \Psi_1(x) \quad \dots \dots 3.49$$

في المنطقة الثانية، عندما $(x > 0)$ ، أي: $(V(x) = V_2(x)) \leftarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_2(x)}{dx^2} + V_2(x) \Psi_2(x) = E \Psi_2(x) \quad \dots \dots 3.50$$

$$\therefore \frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} + k_1^2 \Psi_1 = 0 \quad \dots \dots 3.49'$$

$$\therefore \frac{d^2 \Psi_2}{dx^2} + k_2^2 \Psi_2 = 0 \quad \dots \dots 3.50'$$

$$\left\{ \text{where: } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ and } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2) \right\}$$

وحل هاتين المعادلتين هو:

$$\Psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (x < 0) \quad \dots \dots 3.49''$$

$$\Psi_2(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad (x > 0) \quad \dots \dots 3.50''$$

والآن نميز بين حالتين للطاقة:

الحالة الأولى $(E < V_0)$: عندما تكون طاقة الجسيم الحر الساقط أقل من ارتفاع حاجز الجهد. وفي هذه

الحالة يكون حل معادلة شرودنجر في المنطقتين 1 و 2 كما يلي:

$$\Psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (x < 0) \quad \dots \dots 3.51$$

$$\Psi_2(x) = C e^{-k_2' x} + D e^{k_2' x} \quad (x > 0) \quad \dots \dots 3.52$$

تشير k_2' في المعادلة 3.52 إلى أن الجذر $\sqrt{(E - V_2)}$ في العلاقة $\left(k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_2)}}{\hbar}\right)$ سيكون

سالِباً لأن $(E < V)$ مما يؤدي إلى جذر خيالي $\sqrt{-1}$ ، وبالتالي سيُسبَدل i الموجود في المعادلة 3.50''

بـ (-1) لأن $(i \cdot i = -1)$. أي: $\left(k_2' = \frac{\sqrt{2m(V_2 - E)}}{\hbar}\right)$.

إن A, B, C, D ثوابت تحدّد قيمها من تطبيق الشروط الحدودية للمسألة التي نبحث فيها، وهي:

١- إن الدالة الموجية $\Psi(x)$ ذات قيمة محددة بحدود، ويجب أن تتلاشى في الما لا نهاية وتساوي صفراً.

وهذا ما لا يتوفر في الدالة $\Psi_2(x)$ بسبب الحد $(D e^{k_2' x})$ الذي سيزداد بزيادة x وتصير قيمته ما لا نهاية

عند $(x = \infty)$ ، ولهذا نضع قيمة الثابت D مساوية للصفر كي تصبح الدالة مقبولة. أما الحد الأول في

المعادلة 3.52 فهو يمثل تناقص قيمة الدالة الموجية للجسيم $(\Psi_2(x \rightarrow \infty) = Ce^{-k'_2x}|_{x \rightarrow \infty} = 0)$ وكما مبين في الشكل 10-3 .

$$\therefore \Psi_2(x) = Ce^{-k'_2x} \quad \dots \dots 3.53$$

إن حقيقة كون Ψ_2 لا تساوي صفراً تعني أن هنالك احتمالاً لتواجد الجسيم في المنطقة المحظورة وفق الميكانيك التقليدي، وإن هذه الاحتمالية تقل مع زيادة x .

٢- إن الدالة $\Psi(x)$ ومشتقتها الأولى مستمرتان في جميع نقاط الفضاء. وينتج عند نقطة الاتصال ($x = 0$) أن:

$$1) \Psi_1(x = 0) = \Psi_2(x = 0)$$

$$2) \left. \frac{d\Psi_1(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_2(x)}{dx} \right|_{x=0}$$

$$\therefore \text{at } x = 0 \rightarrow \text{eq. 3.51} = \text{eq. 3.53}$$

$$Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} = Ce^{-k'_2x} \Rightarrow Ae^0 + Be^0 = Ce^0 \Rightarrow$$

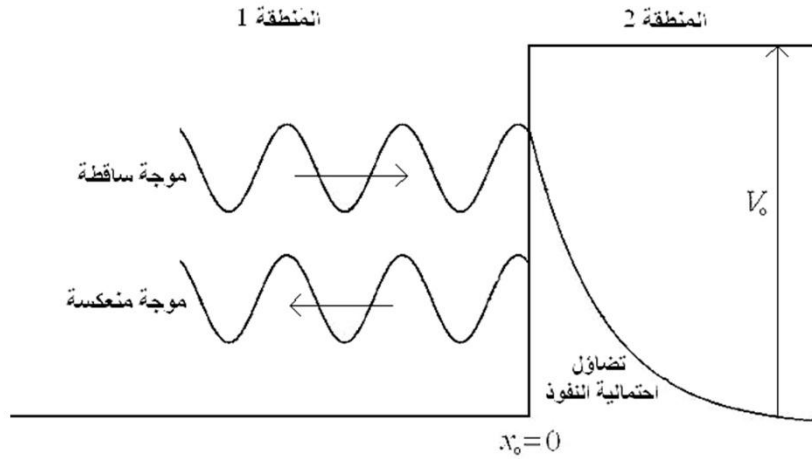
$$A + B = C \quad \dots \dots 3.54$$

وبعد الاشتقاق والمساواة وفق الشرط الحدودي الثاني:

$$Aik_1e^{ik_1x} + B(-ik_1)e^{-ik_1x} = C(-k'_2)e^{-k'_2x}$$

$$Aik_1e^0 + B(-ik_1)e^0 = C(-k'_2)e^0 \Rightarrow Aik_1 + B(-ik_1) = C(-k'_2) \Rightarrow$$

$$ik_1(A - B) = -k'_2C \quad \dots \dots 3.55$$



الشكل 10-3: جسيم ينتقل من اليسار لليمين ويصطدم بعتبة جهد ارتفاعها V_0 .

* لإيجاد النسبة $\left(\frac{B}{A}\right)$ بين الموجة المنعكسة إلى الموجة الساقطة:

$$\text{By sub. eq. 3.54 in eq. 3.55} \Rightarrow$$

$$ik_1(A - B) = -k'_2(A + B) \Rightarrow ik_1A - ik_1B = -k'_2A - k'_2B \Rightarrow$$

$$ik_1A + k'_2A = ik_1B - k'_2B \Rightarrow (ik_1 + k'_2)A = (ik_1 - k'_2)B$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{ik_1 + k'_2}{ik_1 - k'_2} \quad \dots \dots 3.56$$

* لإيجاد احتمالية انعكاس الموجة عن عتبة الجهد:

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{B}{A} \right)^* \left(\frac{B}{A} \right) = \left(\frac{ik_1 + k'_2}{ik_1 - k'_2} \right)^* \left(\frac{ik_1 + k'_2}{ik_1 - k'_2} \right) = \left(\frac{-ik_1 + k'_2}{-ik_1 - k'_2} \right) \left(\frac{ik_1 + k'_2}{ik_1 - k'_2} \right) = 1$$

إذن نسبة الانعكاسية 100%، أي (R = 1)

* لإيجاد النسبة $\left(\frac{C}{A} \right)$ بين الموجة النافذة من عتبة الجهد والموجة الساقطة على العتبة:

From eq. 3.54: $B = C - A$ and sub. in eq. 3.55 $\Rightarrow$

$$ik_1(A - C + A) = -k'_2 C \Rightarrow 2ik_1 A - ik_1 C = -k'_2 C \Rightarrow 2ik_1 A = (ik_1 - k'_2) C$$

$$\therefore \frac{C}{A} = \frac{2ik_1}{ik_1 - k'_2} \quad \dots \dots 3.57$$

* لإيجاد احتمالية عبور الموجة من عتبة الجهد:

$$\left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left(\frac{C}{A} \right)^* \left(\frac{C}{A} \right) = \left(\frac{2ik_1}{ik_1 - k'_2} \right)^* \left(\frac{2ik_1}{ik_1 - k'_2} \right) = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k'^2_2} \neq 0$$

وهذا المقدار لا يساوي صفرًا لأن $\left(k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \neq 0 \right)$ و $\left(k'^2_2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_2 - E) \neq \infty \right)$. وبما أن احتمالية اختراق عتبة الجهد لا تساوي صفرًا فهذا يعني إمكانية نفاذ الجسيم من عتبة الجهد وبدون أن يحصل على الطاقة الكافية، حيث طاقته أقل من طاقة عتبة الجهد ($E < V$)، وهذا مخالف لمفاهيم الميكانيك التقليدي. وتتناقض هذه الاحتمالية بسرعة خلف الحاجز حتى تتلاشى بعد مسافة قصيرة بسبب العامل $(e^{-k'_2 x})$ ، وتزداد هذه المسافة قصرًا كلما زاد الفرق بين الطاقة وجهد العتبة ($V_2 - E$)، أي كلما قلت طاقة الجسيم الساقط أو زاد ارتفاع العتبة.

سؤال: جد تيار الاحتمالية للموجات الساقطة والمنعكسة والنافذة ومعامل الانعكاس عندما يسقط جسيم طاقته E وكتلته m على عتبة جهد ارتفاعها V_0 عندما ($E < V_0$). ثم بين ماذا تستنتج من هذه الحسابات..
الحل: من المعادلة العامة لحساب تيار الاحتمال (راجع الفصل الثاني):

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

* الموجة الساقطة يمثلها الحد الأول في الطرف الأيمن للمعادلة 3.51 $(Ae^{ik_1 x})$.

$$\therefore J_I = \frac{\hbar}{2mi} \left((A^* e^{-ik_1 x}) \frac{d(Ae^{ik_1 x})}{dx} - (Ae^{ik_1 x}) \frac{d(A^* e^{-ik_1 x})}{dx} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left((A^* e^{-ik_1 x}) (Aik_1) e^{ik_1 x} - (Ae^{ik_1 x}) (A^* (-ik_1)) e^{-ik_1 x} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} (A^* A i k_1 + A A^* i k_1) = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2$$

* الموجة المنعكسة يمثلها الحد الثاني في الطرف الأيمن للمعادلة 3.51: $(B e^{-ik_1 x})$

$$J_R = \frac{\hbar}{2mi} \left((B^* e^{ik_1 x}) \frac{d(B e^{-ik_1 x})}{dx} - (B e^{-ik_1 x}) \frac{d(B^* e^{ik_1 x})}{dx} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left((B^* e^{ik_1 x}) (B (-ik_1)) e^{-ik_1 x} - (B e^{-ik_1 x}) (B^* i k_1) e^{ik_1 x} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} (-B^* B i k_1 - B B^* i k_1) = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2$$

$$Refl. = -\frac{J_R}{J_I} = -\frac{-\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k_1}{m} |A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

وتشير الإشارة السالبة في علاقة معامل الانعكاس إلى سريان التيار بالاتجاه السالب لمحور x . وقد تقدم

عند إيجاد احتمالية انعكاس الموجة عن عتبة الجهد أن $\left(\left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1 \right)$

$$\therefore Refl. = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1$$

وهذا يعني أن تيار الاحتمال الساقط والمنعكس متساويان، وهذا يتلاءم مع الميكانيك التقليدي الذي يُحتم أن يكون الانعكاس كلياً في هذه الحالة.

* الموجة النافذة تمثلها المعادلة 3.53.

$$J_T = \frac{\hbar}{2mi} \left((C^* e^{-k'_2 x}) \frac{d(C e^{-k'_2 x})}{dx} - (C e^{-k'_2 x}) \frac{d(C^* e^{-k'_2 x})}{dx} \right) = 0$$

ومساواة تيار الاحتمال للموجة النافذة $(C e^{-k'_2 x})$ للصفر يعني أنه لكل جسيم ساقط على العتبة سيكون لدينا جسيم منعكس عنه. أي إن الجسيم لا ينفذ.

قد يبرز سؤال هنا، وهو أن نسبة الانعكاسية تبلغ 100% مما يوحي أن الموجة تنعكس كلياً ولا

يحدث أي اختراق لعتبة الجهد، ولكننا لاحظنا أن هنالك احتمالاً للاختراق مقداره $\left(\frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2'^2} \right)$ على يمين الحاجز، كما إن تيار الاحتمال للجهة اليمنى أيضاً يساوي صفراً. فكيف نوفق بين الأمرين؟

لتوضيح الأمر نقول إن الجسيم ككل يمثل حزمة موجية بينما الدالة الموجية $(C e^{-k'_2 x})$ ما هي إلا إحدى مركبات هذه الحزمة. فحينما يسقط الجسيم على العتبة فإن جزءاً من الحزمة الموجية يخترقها، إلا أن تضائل الاحتمالية بسرعة كبيرة يمين العتبة وكون تيار الاحتمال يساوي صفراً يؤدي إلى انعكاس الحزمة الموجية بكاملها (أي ارتداد الجسيم) وعودتها بالاتجاه المعاكس لسقوطها.

وتسرّب الجسيم هذا من خلال عتبة الجهد هو ظاهرة كمية، وكلما بعد النظام عن النمط التقليدي زادت احتمالية التسرب أو التنفّق. وكلما قلت كتلة الجسيم ازدادت طبيعته الموجية أهمية، وبالتالي أصبح الوصف الكمي له أكثر وضوحاً، وبالتالي تزداد قدرته على التنفّق tunneling. فالإلكترون مثلاً له قدرة تنفق أعلى من ذرة الهيدروجين والتي لها قدرة تنفق أعلى من الذرات الأثقل منها. وهذه الظاهرة تلعب دوراً أساسياً في العديد من الظواهر الفيزيائية مثل خروج جسيمات ألفا أو بيتا من الذرات المشعة بدون أن تحصل على الطاقة الكافية للتغلب على طاقة الجذب مع النواة الأم. وعند تقريب طرف معدني من سطح فإن الإلكترونات يمكن أن تسرب من السطح إلى الطرف المعدني. كما ولها تطبيقات هامة في الأجهزة الحديثة مثل الصمام الثنائي النفقي tunnel diode والحوسبة الكمية quantum computing ومجهر التنفق الماسح scanning tunneling microscope.

الحالة الثانية ($E > V$): عندما تكون طاقة الجسيم الحر الساقط أكبر من ارتفاع حاجز الجهد. وفي هذه الحالة يفترض الميكانيك التقليدي أن هذا الجسيم وجميع الجسيمات الساقطة على الحاجز بهذه الطاقة ستجتازه، أي إن احتمالية المرور عبر الحاجز هي 100%. إلا أن للميكانيك الكمي رأياً آخر سنعرفه مما يلي:

يكون حل معادلة شرودنجر في المنطقتين 1 و 2 كما يلي:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad \dots \dots 3.58$$

$$\Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (x > 0) \quad \dots \dots 3.59$$

$$\left(\text{where: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ and } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_2)}}{\hbar} \right)$$

وبما أننا فرضنا أن الجسيم يسقط من اليسار إلى اليمين فهذا يعني عدم وجود دالة موجية منعكسة في المنطقة الثانية (المنطقة اليمنى) عند ($x > 0$)، ولهذا يجب أن يساوي الثابت D صفراً ويُغلى الحد De^{-ik_2x} في المعادلة 3.59. وتصبح المعادلة 3.59 بالشكل التالي:

$$\Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \quad (x > 0) \quad \dots \dots 3.60$$

وبتطبيق الشروط الحدودية، حيث إن الدالة $\Psi(x)$ ومشتقتها الأولى مستمرتان في جميع نقاط الفضاء:

$$1) \Psi_1(x=0) = \Psi_2(x=0)$$

$$2) \left. \frac{d\Psi_1(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_2(x)}{dx} \right|_{x=0}$$

$$\therefore \text{at } x = 0 \rightarrow \text{eq. 3.58} = \text{eq. 3.60}$$

$$\therefore A + B = C \quad \dots \dots 3.61$$

وبعد الاشتقاق والمساواة وفق الشرط الحدودي الثاني:

$$Aik_1e^{ik_1x} + B(-ik_1)e^{-ik_1x} = C(ik_2)e^{ik_2x}$$

$$Aik_1e^0 + B(-ik_1)e^0 = C(ik_2)e^0 \Rightarrow Aik_1 + B(-ik_1) = C(ik_2) \Rightarrow$$

$$ik_1(A - B) = ik_2C \quad \dots \dots 3.62$$

By sub. eq. 3.61 in eq. 3.62 $\Rightarrow$

$$ik_1(A - B) = ik_2(A + B) \Rightarrow ik_1A - ik_1B = ik_2A + ik_2B \Rightarrow$$

$$ik_1A - ik_2A = ik_1B + ik_2B \Rightarrow (ik_1 - ik_2)A = (ik_1 + ik_2)B$$

$$\therefore \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \dots \dots 3.63$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad \dots \dots 3.64$$

ويكون مُعامل انعكاس الموجة عن عتبة الجهد:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad \dots \dots 3.65$$

ويكون مُعامل نفاذ الموجة من عتبة الجهد:

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad \dots \dots 3.66$$

$$R + T = 1 \quad \dots \dots 3.67$$

وهذه النتيجة مفهومة لأن مجموع الاحتمالات يساوي واحداً دوماً. وهي تشبه عملية مرور شعاع ضوئي من وسط إلى وسط آخر يختلفان بمعامل الانكسار، فينتج شعاع منعكس وآخر منكسر نافذ من الوسط الأول للثاني. ويُستنتج من ذلك أن الجسم يتصرف كموجة ولا يتصرف كجسيم لأن فكرة انعكاس الجسم يرفضها الميكانيك التقليدي.

سؤال: احسب معامل الانعكاس R ومُعامل النفاذ T عندما يسقط جسيم طاقته E وكتلته m على عتبة جهد ارتفاعها V_0 عندما $(E > V_0)$. ثم جد ناتج $(R + T)$

الحل: كما تقدم فإن معامل الانعكاس يُعطى بالعلاقة: $Refl. = -\frac{J_R}{J_I}$

حيث J_I يمثل تيار الاحتمالية للموجة الساقطة و J_R يمثل تيار الاحتمالية للموجة المنعكسة.

و من المعادلة العامة لحساب تيار الاحتمال:

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

* الموجة الساقطة يمثلها الحد الأول في الطرف الأيمن للمعادلة 3.58. (Ae^{ik_1x})

$$\therefore J_I = \frac{\hbar}{2mi} \left((A^*e^{-ik_1x}) \frac{d(Ae^{ik_1x})}{dx} - (Ae^{ik_1x}) \frac{d(A^*e^{-ik_1x})}{dx} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{2mi} \left((A^* e^{-ik_1 x}) (A i k_1) e^{ik_1 x} - (A e^{ik_1 x}) (A^* (-ik_1)) e^{-ik_1 x} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2mi} (A^* A i k_1 + A A^* i k_1) = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \\
&\quad * \text{الموجة المنعكسة يمثلها الحد الثاني في الطرف الأيمن للمعادلة 3.58} : (B e^{-ik_1 x})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_R &= \frac{\hbar}{2mi} \left((B^* e^{ik_1 x}) \frac{d(B e^{-ik_1 x})}{dx} - (B e^{-ik_1 x}) \frac{d(B^* e^{ik_1 x})}{dx} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \left((B^* e^{ik_1 x}) (B (-ik_1)) e^{-ik_1 x} - (B e^{-ik_1 x}) (B^* i k_1) e^{ik_1 x} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2mi} (-B^* B i k_1 - B B^* i k_1) = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \\
R &= -\frac{J_R}{J_I} = -\frac{-\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k_1}{m} |A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2
\end{aligned}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} : \text{ومن معادلة 3.63}$$

$$\therefore R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

* أما معامل النفاذ فيعطى بالعلاقة: $T = \frac{J_T}{J_I}$ ، والموجة النافذة تمثلها المعادلة 3.60.

$$\begin{aligned}
J_T &= \frac{\hbar}{2mi} \left((C^* e^{-ik_2 x}) \frac{d(C e^{ik_2 x})}{dx} - (C e^{ik_2 x}) \frac{d(C^* e^{-ik_2 x})}{dx} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \left((C^* e^{-ik_2 x}) C i k_2 e^{ik_2 x} - (C e^{ik_2 x}) C^* (-ik_2) e^{-ik_2 x} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2mi} (C^* C i k_2 - C C^* (-ik_2)) = \frac{\hbar}{2mi} (2i k_2 C C^*) = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2
\end{aligned}$$

$$T = \frac{J_T}{J_I} = \frac{\frac{\hbar k_2}{m} |C|^2}{\frac{\hbar k_1}{m} |A|^2} = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{C}{A} \right|^2 =$$

$$\therefore \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (\text{from eq. 3.64})$$

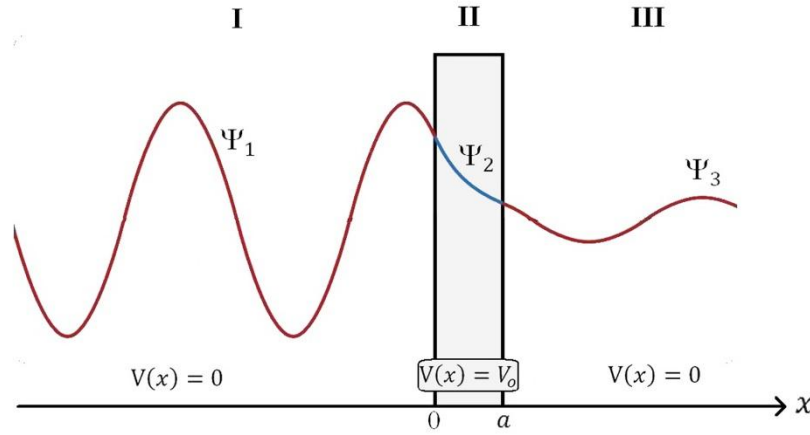
$$\therefore T = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$\begin{aligned}
R + T &= \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_1^2 - 2k_1 k_2 + k_2^2 + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \\
&= \frac{k_1^2 + 2k_1 k_2 + k_2^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_1 + k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = 1
\end{aligned}$$

٧-٣: حاجز الجهد المستطيل بارتفاع محدود

Rectangular Potential Barrier with Finite Height

يتضمن هذا الموضوع حاجز جهد ذا عرض محدود a وارتفاع محدود V_0 يعترض حركة جسيم حر أو مجموعة جسيمات حرة ضمن بعد واحد بطاقة E ، ويتحرك الجسيم من اليسار لليمين باتجاه محور x كما في الشكل 11-3. وفي مثل هذه الحالة فإن الميكانيك التقليدي يفرض أمرين لا ثالث لهما. فإذا كانت طاقة الجسيم الساقط E أكبر من طاقة حاجز الجهد V_0 فإنه سيجتاز الحاجز حتماً، ولا يمكنه الاجتياز إذا كانت طاقته أقل من V_0 . وهذه الحتمية لا يُقرُّ بها الميكانيك الكمي كما يأتي.



الشكل 11-3: الدالة الموجية لجسيم ساقط على حاجز جهد محدود الارتفاع والعرض.

وهنا نميز بين حالتين للطاقة:

الحالة الأولى ($E < V_0$): عندما تكون طاقة الجسيم الحر الساقط أقل من ارتفاع حاجز الجهد. وتكون دالة الجهد كما يلي:

$V(x) = 0$	when	$x < 0$	(region I)
$V(x) = V_0$	when	$0 \leq x \leq a$	(region II)
$V(x) = 0$	when	$x > a$	(region III)

ونكتب الآن معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن للمناطق الثلاث:

في المنطقة الأولى، عندما ($x < 0$)، أي: ($V(x) = 0$) ←

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 = 0 \quad \dots \dots 3.68$$

في المنطقة الثانية، عندما ($0 \leq x \leq a$)، أي: ($V(x) = V_0$) ←

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 = 0 \quad \dots \dots 3.69$$

في المنطقة الثالثة، عندما $(x > a)$ ، أي: $(V(x) = 0) \leftarrow$

$$\frac{d^2\Psi_3}{dx^2} + k_1^2\Psi_3 = 0 \quad \dots\dots 3.70$$

$$\left\{ \text{where: } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ and } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \right\}$$

و Ψ_1 و Ψ_2 و Ψ_3 هي الدوال الموجية التي تصف الجسم في المناطق I و II و III على التوالي. وحل المعادلات الثلاث أعلاه هو:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad \dots\dots 3.68'$$

$$\Psi_2(x) = Ce^{-k_2'x} + De^{k_2'x} \quad (0 \leq x \leq a) \quad \dots\dots 3.69'$$

$$\Psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} \quad (x > a) \quad \dots\dots 3.70'$$

وهنا في المعادلة 3.69' استبدلنا (ik_2) بـ $(-k_2')$ لنفس السبب الذي مرّ في الموضوع السابق. و

$$\left(k_2' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)$$

يُلاحظ أن Ψ_1 في المعادلة 3.68' تمثل رياضياً موجة ساقطة وأخرى منعكسة عن حاجز الجهد عند $(x = 0)$. وكذلك Ψ_2 في المعادلة 3.69' فإنها تمثل موجتين أيضاً إحداهما ساقطة على الحاجز عند $(x = a)$ والأخرى منعكسة عنه (لاحظ الشكل 12-3). ولما كانت Ψ_2 لا تساوي صفراً عند $(x = a)$ فإنها تستمر في المنطقة III متمثلة بالدالة الموجية Ψ_3 في المعادلة 3.70' والتي فيها موجتان واحدة نافذة بالاتجاه الموجب لمحور x والأخرى منعكسة تسير عكس اتجاه الموجة النافذة، وبما أننا فرضنا أن الجسم يسقط على الحاجز من جهة اليسار فلا وجود لموجة منعكسة في المنطقة III، ولهذا نضع قيمة الثابت G مساوية للصفر. وتصبح معادلة دالة الموجة في المنطقة الثالثة بالشكل الآتي:

$$\Psi_3(x) = Fe^{ik_1x} \quad (x > a) \quad \dots\dots 3.70''$$

والمحصلة أنه حتى لو كانت طاقة الجسم الواحد الساقط اقل من طاقة حاجز الجهد فإنه يمكن أن يحدث اختراق للحاجز، أي يوجد احتمال لهذا الاختراق. وإذا كانت هناك جسيمات متعددة تسقط بطاقة أقل من طاقة حاجز الجهد فيمكن أن يخترق بعضها حاجز الجهد وينعكس البعض الآخر. وهذا الاختراق هو التسرب الكمي أو التنفق الذي تكلمنا عنه في الفقرة السابقة ٣-٦، وسُمّي هكذا لأن الجسم يبدو وكأنه اخترق حاجز الجهد من خلال نفق فيه لأن طاقته غير كافية.

الحالة الثانية ($E > V_0$): عندما تكون طاقة الجسيم الحر الساقط أكبر من ارتفاع حاجز الجهد.

ان نتائج الميكانيك التقليدي لهذه الحالة تشير الى أن جميع الجسيمات الساقطة على حاجز الجهد سوف تعبر الحاجز الى المنطقة الثالثة، ولكن ميكانيك الكم يشير إلى احتمالية انعكاس بعض الجسيمات بعد اصطدامها بالحاجز عند النقطتين ($x = 0$) و ($x = a$) وارتدادها الى الخلف كما يأتي. وحلٌ معادلة شرودنجر في المناطق الثلاث هو:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad \dots \dots 3.71$$

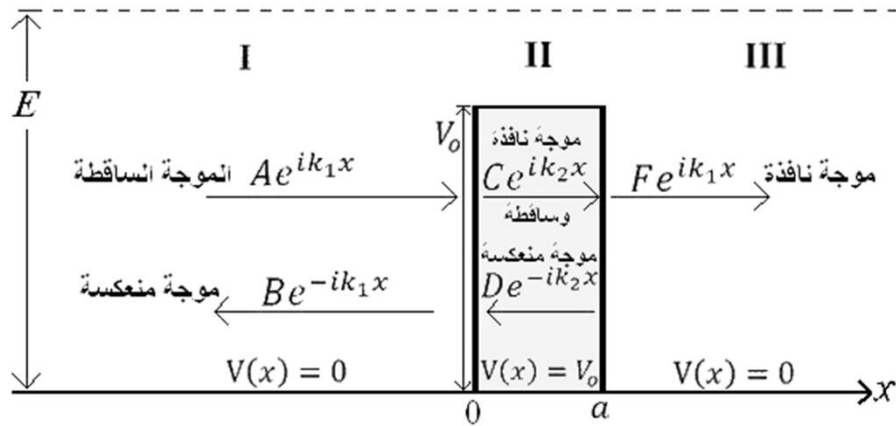
$$\Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (0 \leq x \leq a) \quad \dots \dots 3.72$$

$$\Psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} \quad (x > a) \quad \dots \dots 3.73$$

$$\left\{ \text{where: } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ and } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \right\}$$

ولعدم وجود موجة منعكسة في المنطقة الثالثة نضع قيمة الثابت G مساوية للصفر. وتصبح معادلة دالة الموجة بالشكل الآتي:

$$\Psi_3(x) = Fe^{ik_1x} \quad (x > a) \quad \dots \dots 3.73'$$



الشكل 3-12: الدالة الموجية الساقطة والمنعكسة والنافذة

لجسيم أو جسيمات ساقطة بطاقة E على حاجز جهد ارتفاعه V_0 وعرضه a .

أمثلة متنوعة:

(1) احسب فرق الطاقة بين مستويي طاقة الأصغر ($n = 2$) والحالة الأرضية ($n = 1$) بوحدة الجول وبوحدة الإلكترون-فولت لكل مما يأتي:

أ- كرة كتلتها $50g$ تتحرك على محور واحد من ملعب طوله $100m$.

ب- دقيقة ألفا متحركة في أنبوب طوله $10m$ داخل معجل، (كتلة دقيقة ألفا $= 6.644 \times 10^{-27} kg$).

ج- إلكترون في حيز طوله $0.15nm$. ثم قارن بين النتائج.

الحل: أ- بالنسبة للكرة:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \rightarrow E_1 = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34} J.s)^2}{8 \times (50 \times 10^{-3} kg) \times (100m)^2} = 1.097 \times 10^{-70} J$$

$$E_2 = 2^2 E_1 = 4 \times 1.097 \times 10^{-70} = 4.39 \times 10^{-70} J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 4.39 \times 10^{-70} - 1.097 \times 10^{-70} = 3.293 \times 10^{-70} J$$

$$= \frac{3.293 \times 10^{-70}}{1.6 \times 10^{-19}} = 2.05 \times 10^{-51} eV$$

ب- لدقيقة ألفا:

$$E_1 = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34} J.s)^2}{8 \times (6.644 \times 10^{-27} kg) \times (10m)^2} = 8.26 \times 10^{-44} J$$

$$E_2 = 4E_1 = 4 \times 8.26 \times 10^{-44} = 3.30 \times 10^{-43} J$$

$$\Delta E = 3.30 \times 10^{-43} - 8.26 \times 10^{-44} = 2.47 \times 10^{-43} J = \frac{2.47 \times 10^{-43}}{1.6 \times 10^{-19}} = 1.54 \times 10^{-24} eV$$

ج- للإلكترون:

$$E_1 = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34} J.s)^2}{8 \times (9.1 \times 10^{-31} kg) \times (0.15 \times 10^{-9} m)^2} = 2.68 \times 10^{-18} J$$

$$E_2 = 4E_1 = 4 \times 2.68 \times 10^{-18} = 1.07 \times 10^{-17} J$$

$$\Delta E = 1.07 \times 10^{-17} - 2.68 \times 10^{-18} = 8.04 \times 10^{-18} J$$

$$= \frac{8.04 \times 10^{-18}}{1.6 \times 10^{-19}} = 50.25 eV$$

في حالة الإلكترون فإن الفرق في الطاقة بين الحالة الأولى والثانية ($50.25 eV$) هو فرق محسوس ويمكن قياسه، والطاقة متقطعة ومكممة. أما بالنسبة للكرة ولدقيقة ألفا فإن هذا الفرق صغير جداً، ولهذا فإن الحالتين ($n = 1$) و ($n = 2$) تبدوان وكأنهما متطابقتان. أي إن الطاقة تبدو وكأنها مستمرة وغير مكممة، وهذه نتيجة تقليدية. أي: عندما يكون ($h^2 \ll ma^2$) فإن النتائج الكمية والتقليدية تتطابق، وهذه إحدى صور قاعدة التطابق.

(2) إذا تحرك جسيم كتلته ($1 \times 10^{-27} g$) داخل صندوق على خط واحد طوله $0.3nm$ ، وقفز من المستوى ($n = 2$) إلى المستوى ($n = 1$) فجد الطول الموجي للضوء المنبعث.

الحل: تُعطى طاقة الفوتون المنبعث عند انتقال جسيم بين مستويي طاقة بالعلاقة:

$$\Delta E = hv \Rightarrow hv = E_2 - E_1 = \frac{2^2 h^2}{8ma^2} - \frac{1^2 h^2}{8ma^2} = \frac{3h^2}{8ma^2}$$

$$\therefore v = \frac{3h}{8ma^2}$$

$$\therefore \lambda = \frac{c}{v}$$

$$\therefore \lambda = \frac{8ma^2 c}{3h} = \frac{8 \times (1 \times 10^{-27} \times 10^{-3} kg) \times (0.3 \times 10^{-9} m)^2 \times (3 \times 10^8 m/s)}{3 \times 6.626 \times 10^{-34} J.s}$$

$$= 1.086 \times 10^{-7} m = 108.6 nm$$

(3) يتواجد جسيم في الحالة الأرضية داخل منخفض جهد ارتفاعه لا نهائي وطوله L . احسب احتمالية تواجد الجسيم في النصف المتوسط من بئر الجهد هذا، أي بين $x = L/4$ و $x = 3L/4$.

الحل: تُعطى كثافة الاحتمالية للحالة الأرضية بالعلاقة

$$P = \int_{L/4}^{3L/4} |\Psi_n|^2 dx = \left(\frac{2}{L}\right) \int_{L/4}^{3L/4} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

وباستخدام العلاقة: $\sin^2 \theta = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta)$

$$P = \left(\frac{1}{L}\right) \int_{L/4}^{3L/4} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right] dx = \left(\frac{1}{L}\right) \left[x \Big|_{L/4}^{3L/4} - \left(\frac{L}{2\pi}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \Big|_{L/4}^{3L/4} \right]$$

$$= \left(\frac{1}{L}\right) \left[\frac{L}{2} - \frac{L}{2\pi} (\sin 1.5\pi - \sin 0.5\pi) \right] = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} (-1 - 1) = 0.818$$

وهذه النتيجة أكبر بكثير من القيمة المتوقعة لجسيم تقليدي يقضي أوقاتاً متساوية في كل أجزاء البئر.

(4) سقطت الإلكترونات بعضها طاقته $1eV$ والبعض الآخر طاقته $2eV$ على حاجز جهد ارتفاعه $10eV$ وعرضه $0.5nm$. (أ) جد احتماليات عبور هذه الإلكترونات من الحاجز إذا كانت احتمالية النفاذ تُعطى

بالعلاقة: ($T = e^{-2k_2 L}$) و L تمثل عرض الحاجز و ($k_2 = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$). (ب) كيف ستتغير هذه الاحتماليات عند مضاعفة عرض الحاجز؟

الحل: (أ) للإلكترونات ذات الطاقة $1eV$:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2 \times (9.1 \times 10^{-31} kg) [(10-1)eV] \times (1.6 \times 10^{-19} J/eV)}}{1.054 \times 10^{-34} J.s}$$

$$\approx 1.54 \times 10^{10} m^{-1}$$

$$\therefore L = 0.5nm = 5 \times 10^{-10}m$$

$$\therefore 2k_2L = 2 \times (1.54 \times 10^{10}m^{-1}) \times (5 \times 10^{-10}m) = 15.4$$

$$T_1 = e^{-2k_2L} = e^{-15.4} \approx 2 \times 10^{-7}$$

وهذا يعني (كمعدل) أن إلكترونات واحد فقط من كل خمسة ملايين إلكترون يمكن أن يمر من خلال حاجز ارتفاعه $10eV$ وعرضه $0.5nm$. وبنفس الطريقة يمكن حساب احتمالية نفاذ الإلكترونات ذات الطاقة $2eV$:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2 \times (9.1 \times 10^{-31}kg)[(10-2)eV] \times (1.6 \times 10^{-19}J/eV)}}{1.054 \times 10^{-34}J.s}$$

$$\approx 1.45 \times 10^{10}m^{-1}$$

$$\therefore 2k_2L = 2 \times (1.45 \times 10^{10}m^{-1}) \times (5 \times 10^{-10}m) = 14.5$$

$$T_2 = e^{-14.5} \approx 5 \times 10^{-7}$$

وهذه الإلكترونات لها احتمالية أكثر من الضعف لتلك التي طاقتها $1eV$. أي يمكن أن ينفذ إلكترون واحد من خلال الحاجز من بين مليوني إلكترون ساقط عليه.

(ب) عندما يكون عرض الحاجز $1nm$ فستكون احتمالية النفاذ كالتالي:

$$k_2 \approx 1.54 \times 10^{10}m^{-1}$$

$$2k_2L = 2 \times (1.54 \times 10^{10}m^{-1}) \times (1 \times 10^{-9}m) = 30.8$$

$$T_1 = e^{-2k_2L} = e^{-30.8} \approx 4.2 \times 10^{-14}$$

وللإلكترونات ذات الطاقة $2eV$:

$$k_2 \approx 1.45 \times 10^{10}m^{-1}$$

$$2k_2L = 2 \times (1.45 \times 10^{10}m^{-1}) \times (1 \times 10^{-9}m) = 29$$

$$T_2 = e^{-29} \approx 2.5 \times 10^{-13}$$

إذن فإن تأثير مضاعفة عرض الحاجز على احتمالية النفاذ أكثر من تأثير مضاعفة طاقة الإلكترونات الساقطة.

وكما نرى فهي دالة معقدة. أي تحوي على المقدار الخيالي ($i = \sqrt{-1}$)، وبالتالي لا يمكن قياسها مباشرة، ولا يمكن استخدامها لتمثيل الجسيمات مباشرة لأنها عدد معقد، وهذا بخلاف المؤلف لدينا في التجارب اليومية من أن الكميات كموقع الجسيم وزخمه وطاقته هي مقادير حقيقية. وبالتالي فإن دالة الموجة ليس لها معنى فيزيائي مباشر. والطريقة الأنسب لمعرفة القيمة الحقيقية هي قياس كثافة الاحتمالية $|\Psi(x, t)|^2$ كما ذكرنا. وكما هو الحال في تجربة شقوك يونغ Young's slits فإن الشدة intensity تُنتج مقياساً لاحتمال وجود الجسيم (إلكترون أو فوتون) في مناطق مختلفة من الفضاء، كما إن احتمال العثور على الجسيم في الموقع r في الفضاء عند الزمن t يتناسب مع $|\Psi(x, t)|^2$. ومع أننا ندرك أن الجسيم موجود في مكان ما في الفضاء فيمكن تعبير الاحتمالية $|\Psi(x, t)|^2$ normalize of probability بحيث تكون قيمة التكامل على كل الفضاء تساوي 1. وبالنسبة لمحور x تكون المعادلة كالتالي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1 \quad \dots \dots 2.4$$

وهذه الاحتمالية المساوية لـ 1 تعني أن الجسيم متواجد أكيداً ضمن حدود التكامل. وإذا كانت النتيجة صفراً فهذا يعني أن الجسيم غير موجود ضمن هذا النطاق.

في الحالة العامة يمكن التعبير عن الحركة الموجية للجسيم في الفضاء بدلالة الاحداثيات المتعامدة x, y, z بحيث يكون عنصر الحجم $d^3r = dx dy dz$. ويُعبر عن احتمالية تواجد الجسيم (مثل إلكترون ذرة الهيدروجين المتواجد في مكان ما من الفضاء حول النواة في الأمكنة المختلفة المحيطة بالنواة) بالصيغة:

$$dP(r, t) = \int |\Psi(r, t)|^2 d^3r = \int \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) d^3r \quad \dots \dots 2.5$$

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t)} \quad \text{والآن نرجع للمعادلة 2.3}$$

$$\because E = h\nu = \hbar\omega \rightarrow \omega = E/\hbar \quad \text{and} \quad \hbar = h/2\pi \quad \text{and} \quad \lambda = h/p$$

$$\therefore \frac{2\pi}{\lambda} x = \frac{2\pi xp}{h} = \frac{xp}{h/2\pi} = \frac{xp}{\hbar} \quad \text{and} \quad \omega t = \frac{E}{\hbar} t$$

إذن تصبح المعادلة 2.4 كما يلي:

$$\Psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad \dots \dots 2.6$$



٢-٢: معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن Time Dependent Schrödinger Equation

يمكن التوصل لمعادلة شرودنجر باستخدام دالة الموجة التي تتحرك باتجاه المحور السيني x التي

يمكن تمثيلها بالمعادلة 2.6 بأخذ المشتقة الجزئية لطرفيها بالنسبة لـ x :

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = \frac{i}{\hbar} p \left[A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \right] = \frac{i}{\hbar} p \Psi(x, t)$$

وبضرب الطرفين بـ $(-i\hbar)$ $\Leftrightarrow$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = p \Psi(x, t) \quad \dots \dots 2.7$$

وبتربيع الطرفين $\Leftrightarrow$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = p^2 \Psi(x, t) \quad \dots \dots 2.8$$

ولنأخذ الآن المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة 2.6 بالنسبة للزمن t :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \left[A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \right] = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = E \Psi(x, t) \quad \dots \dots 2.9 \quad \Leftrightarrow \text{وبضرب الطرفين بـ } (i\hbar)$$

ومن قانون حفظ الطاقة: $E = T + V$

وحيث إن الطاقة الحركية T تساوي: $\left(T = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} \right)$ فإن:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad \dots \dots 2.10$$

وبضرب طرفي المعادلة 2.10 بـ $\Psi(x, t)$:

$$E \Psi(x, t) = \frac{p^2 \Psi(x, t)}{2m} + V \Psi(x, t) \quad \dots \dots 2.11$$

وبالتعويض من المعادلتين 2.8 و 2.9:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) \quad \dots \dots 2.12$$

وهذه هي معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن (T.D.S.E.) لبعد واحد. أما لثلاثة أبعاد three

dimensions فمن الممكن وصف تصرف الجسيمات وفق المعادلة:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + V(r) \Psi(r, t) \quad \dots \dots 2.12'$$

حيث ∇^2 : مؤثر لابلاس Laplacian operator $= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

٣-٢: معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن Time Independent Schrödinger Equation

$$\Psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \quad \text{من معادلة 2.6:}$$

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)\Phi(t) \quad \text{ليكن:}$$

$$\begin{aligned} \therefore Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} &= Ae^{\frac{i}{\hbar}(px)} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(-Et)} \\ \therefore \Psi(x, t) &= \Psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad \dots \dots 2.13 \end{aligned}$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad \text{T. D. S. E.}$$

بإدخال المعادلة 2.13 في T. D. S. E. $\Leftrightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + V(x)\Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}E\right) \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + V(x)\Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

وبعد اختصار الحد $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ من الطرفين $\Leftrightarrow$

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) \quad \dots \dots 2.14$$

وهذه هي معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن لبعد واحد (T.I.S.E.).

ولثلاثة أبعاد تصبح المعادلة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad \dots \dots 2.15$$

$$\Leftrightarrow \nabla^2 \Psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))\Psi(r) = 0$$

وإذا عوضنا عن E بقيمتها من المعادلة 2.9 $\Leftrightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + V(r)\Psi(r) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r) \quad \dots \dots 2.16$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad \text{مثال: جسيم كتلته } m \text{ محصور ببعده واحد في صندوق بجهد مقداره:}$$

جد حل معادلة شرودنجر لهذا الجهد.

الحل: يكون الجهد V صفرًا داخل الصندوق، وتأخذ معادلة شرودنجر الشكل التالي:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$



وقد بينا في معادلة 2.13 أن الحل لهذه المسألة هو بفصل المتغيرات، فينتج:

$$\therefore \Psi(x, t) = \Psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

وتكون معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن للجهد الصفري: $E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)$ وبالصرب بـ $\frac{2m}{\hbar^2}$ ونقل الحدود في طرف واحد $\Leftarrow$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0$$

وإذا فرضنا: $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ سنحصل على:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0$$

وحل هذه المعادلة هو:

$$\Psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

٢-٤: المؤثرات Operators

إن الكميات التي يمكن قياسها تجريبياً مثل الموضع والزخم والطاقة تُسمى بالكميات الملاحظة أو الظاهرة observables، وتُمثل هذه الكميات في الميكانيك التقليدي بالمتغيرات الاعتيادية مثل r و p و T . أما في الميكانيك الكمي فالكميات ذاتها تُمثل بمؤثرات. والمؤثر هو الكمية التي إذا أثرت على دالة الموجة حولتها إلى دالة موجية جديدة. ويمكن التمييز بين الكمية الظاهرة F والمؤثر المقابل لها في الميكانيك الكمي بالرمز $\hat{F}$. وقد مر علينا بعض الأمثلة على هذه المؤثرات الكمية، فلو لاحظنا المعادلة 2.7 فسنجد أنه يمكن كتابتها بالشكل التالي: $\hat{p}\Psi(x, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x, t)$ ، والتي تُقرأ هكذا: إذا أثر المؤثر $\hat{p}$ على دالة الموجة Ψ فالنتيجة هي دالة جديدة تساوي العدد الثابت $(-i\hbar)$ مضروباً في المشتقة الجزئية لـ Ψ بالنسبة لـ x . وهذا يعني أيضاً أن الزخم الخطي الملاحظ p يمكن تمثيله بالمؤثر $\hat{p}$ وفق العلاقة التالية:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \dots\dots 2.17$$

ولثلاثة أبعاد $\Leftarrow$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad \dots\dots 2.18$$

ويلاحظ هنا أن مؤثر الزخم يتضمن التفاضل، لذا فهو مؤثر تفاضلي، وهو مثل الزخم كمية اتجاهية. ومن الجدير بالذكر أن المؤثرات للكميات الظاهرة لا تكون بالضرورة تفاضلية، فالمؤثر المقابل لمتجه الموضع

$$\hat{r} = r, \hat{y} = y, \hat{x} = x \text{ أو } \hat{r} = r, \text{ أي: } \hat{r}\Psi(r, t) = r\Psi(r, t) \quad \dots\dots 2.19$$

