2023-2024

كلية التربية

Quantum Mechanics

Faculty of Education

Physics Department

Fourth academic year

Prepared by:

Dr.Asmaa sayed ahmed

SOUTH VALLEY UNIVERSITY

Chapter Two

Elementary Properties of Quantum Mechanics

الصفات الاساسية لميكانيك الكم

دالة الموجة (Wave Function)

رأينا في الفصل السابق فشل اسخدام مفاهيم الميكانيك الكلاسيكي لوصف مسارالجسيم الذري بسبب مبدأ اللادقة، والسؤال الان كيف يمكننا ان نصف حركة الجسيم الذري ؟

استنادا الى فرضية دي برولي وتفسير اينشتاين للظاهرة الكهروضوئية يمكن ان نقول ان كل جسم متحرك يرافقه مجال مادي **(Matter field)**. فمثلا الالكترون في الذرة انه لايتحرك بعيدا ولايقترب الى مسافة قصيرة جدا من النواة، اي انه مقيد في منطقة فضائية صغيرة ابعادها تقدر بحدود 10^{-9} m لذالك فان المجال المادي المصاحب له يمكن ان يعبر عنه بدلالة موجة واقفة (هي الموجة المقيدة في منطقة محدودة كالموجة المتولدة في سلك مربوط الطرفين متمركز في هذه المنطقة بسعة متغيره من منطقة الى اخرى وتكون صفر خارج هذه المنطقة.

دالة الموجة:ـ سعة المجال المادي المصاحب لحركة الجسم ويرمز لها با لرمز ψ

Wave function: is the amplitude of the matter field which associated the moving particle, and denoted ψ.

يعبر في احيان كثيرة عن دالة الموجة ψ بدالة معقدة Complex Function ، اي تحتوي على المقدار $i=\sqrt{-1}$ ويمكن الحصول على دالة معقدة مرافقة Complex Conjugate Function من الدالة المعقدة باستبدال كل i باخر يحمل اشارة سالبة اي $-i$ ويرمز للدالة المعقده المرافقه للدالة ψ بالرمز ψ^*.

احتمال وجود الجسيم في مكان ما:

تحتل الدالة الموجية أو دالة الموجة مكانة مهمة في ميكانيكا الكم، حيث ينص مبدأ الشك على عدم قدرتنا بنفس اللحظة تحديد موضع وسرعة جسيم ما بنفس الدقة، لكن نعمد إلى دالة موجية مرافقة لكل جسيم حسب التصور الموجي الذي قدمه شرودنكر، وتقوم هذه الدالة الموجية بتحديد احتمال وجود الجسيم في أي نقطة من الفراغ التي يمكن للجسيم التواجد به، وذلك حسب اقتراح ماكس بورن 1926 (Max Born) والذي بين فيه أن مربع الدالة الموجية $\psi^* \cdot \psi = |\psi|^2$ يحمل معنىً فيزيائيا رائعا ألا وهو معرفة احتمالية وجود الجسيم في عنصر حجم مقدار dV بدلالة دالته الموجية، فالدالة الموجية ψ لإلكترون ذرة الهيدروجين (مثلا) المتواجد في مكان ما من الفضاء حول النواة يمكن معرفة احتمالية تواجده في الأمكنة المختلفة المحيطة بالنواة من خلال العبارة الرياضية التالية:

$$dp = \int |\psi(r,t)|^2 \, d\tau = \int \psi^*(r,t) \, \psi(r,t) \, d\tau \quad \text{.......................................} \quad (1)$$

حيث dp احتمال تواجد الجسيم بالحجم $d\tau$ ويأخذ دوما قيما حقيقية.

في العلاقة (1) عند تقسيم الطرفين على عنصر الحجم نحصل على أبعاد كثافة نسميها كثافة الاحتمال (Probability density) كما في العلاقة التالية:

$$dp = \frac{dp}{d\tau} = \int |\psi(r,t)|^2$$

أما احتمال تواجد الجسيم في الفضاء كله فإننا نكامل العلاقة (1) على الفضاء كله الممتد من اللانهاية والذي يعبر عن مجموع احتمالات تواجد الجسيم في كل عناصر الحجم المتراصة حول بعضها البعض مكونة الفضاء اللانهائي ، وهنا نحن متأكدون من تواجد الجسيم في هذا الفضاء المفروض وبالتالي فان احتمال تواجد الجسيم سيكون100 1=%

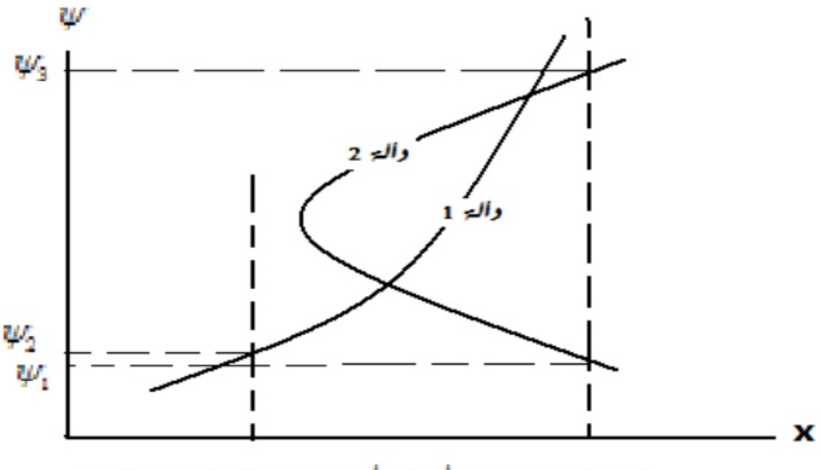
$$\int_0^1 dp = p_t = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(r,t)|^2 \, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(r,t)^* \psi(r,t) \, d\tau = 1 \quad \text{.......................................} \quad (2)$$

إن العلاقة التي تحقق الشرط في العلاقة (2) الاخيرة تسمى دالتها الموجية بالدالة العيارية وتسمى العلاقة بعلاقة المعايرة Normalization condition

Q) If $\psi(x) = \frac{N}{x^2+a^2}$, calculate the normalization constant N. ***(HW)***

يشترط بالدالة الموجية التي تحقق شرط المعايرة مايلي:

1. أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة أي أن كل قيمة محددة للموضع يقابلها قيمة وحيدة للدالة الموجية فقط وليس أكثر، وهذا شرط أساسي لان الدالة أحادية القيمة تعطي احتمال واحد لتواجد الجسيم بينما المتعددة القيمة تعطي أكثر من احتمال لتواجد الجسيم وهذا مرفوض لان الجسيم لايمكن أن يتواجد في أكثر من مكان في نفس اللحظة والعكس أيضا لايمكن لجسيم أن يكون له دالتان مختلفتان في نفس المكان ، انظر الشكل(1) يمثل دالتين أحداهما أحادية القيمة والثانية متعددة القيمة.



الشكل (1) يمثل دالتين أحداهما أحادية القيمة والثانية متعددة القيمة

2. أن تكون الدالة الموجية مستمرة (continuous) وكذلك مشتقاتها مستمرة ، لأن كون الدالة غير مستمرة (عندها انقطاع في الدالة في مكان ما) يصبح الجسيم غير في معرف في منطقة الانقطاع
3. يجب على الدالة أن تكون معرفة في كل نقطة ولا يجوز ان تكون قيمتها مالانهاية لان احتمال تواجد الجسيم يصبح مالانهاية وهو أمر غير مقبل فيزيائيا.

Mathematical Representation of W.F االتمثيل الرياضي لدالة الموجة

بما ان المجال المـادي المصـاحب لحركـة الجسيم يمكـن التعبيـر عنـه بموجـات واقفـة حيث يمكـن تمثيـل دالـة الموجـة بالصيغة الرياضية التالية:-

$$\psi(x,t) = \psi_\circ \, e^{i\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t\right)}$$

$$\because \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad , \quad p = \hbar k \quad , \quad E = \hbar\omega$$

$$\therefore \quad \psi(x,t) = \psi_\circ \, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - E\,t)} \qquad (3)$$

In three dimension

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_\circ \, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - E\,t)}$$

Time Dependent Schrödinger Equation (T.D.S.E) معادلة شرودنكرالمعتمدة على الزمن

باشتقاق معادلة (3) بالنسبة لـ (x)

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}(\psi_{\circ}\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)})=\psi_{\circ}\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}\,(\frac{i}{\hbar}p_x)$$

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=\frac{i}{\hbar}p_x\psi(x,t)$$

نضرب طرفي المعادله في $-i\hbar$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=p_x\,\psi(x,t) \qquad (4)$$

نشتق المعادلة (4) بالنسبة لـ(x)

$$-\hbar^2\,\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}=p_x^2\,\psi(x,t) \qquad (5)$$

نشتق المعادلة (3) بالنسبة لـ الزمن (t)

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}(\psi_{\circ}\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)})=\psi_{\circ}\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}\,(-\frac{i}{\hbar}E)$$

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}E\,\psi(x,t)$$

نضرب طرفي المعادله في $i\hbar$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=E\,\psi(x,t) \qquad (6)$$

$$\because\quad E=T+V$$

$$E=\frac{P^2}{2m}+V(x)\quad \ldots\ldots\ldots.*$$

نضرب طرفي المعادلة * بـ $\psi(x,t)$

$$E\psi(x,t)=\frac{P^2\psi(x,t)}{2m}+V(x)\psi(x,t) \tag{7}$$

بالتعويض عن (5) ، (6) في المعادلة (7) نحصل على العلاقة التالية

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t) \tag{8}$$

تدعى المعادلة (8) بمعادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن وهي معادلة ذات اهميه كبيرة في ميكانيك الكم وفي ثلاث ابعاد تصبح العلاقة (8) بالصيغة الرياضية التاليه.

In three dimension

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

Time Independent Schrödinger Equation (T.I.S.E) معادلة شرودنكرالغيرمعتمدة على الزمن

لايجاد معادلة شرودنكرالغيرمعتمدة على الزمن يمكن كتابة معادلة الموجة الواقفة على الشكل التالي:

$$\psi(x,t)=\psi_\circ\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}$$

$$=\psi(t)\,\psi(x)$$

$$\psi(x,t)=e^{\frac{-i}{\hbar}Et}\,\psi(x) \tag{9}$$

بتعويض المعادلة (9) في المعادلة (8) نحصل على:

$$i\hbar\cdot(\frac{-i}{\hbar})E\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}+V(x)\,\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)]\,\psi(x)=E\psi(x) \tag{10}$$

In three dimensions

$$\nabla^2\psi(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]\cdot\psi(r)=0$$

Observable and Operator   الكمية الملاحظه والمؤثر

Observable: any physical property which can be measured

Example: energy, momentum, position, angular momentum, total energy, potential energy ….etc

الكمية الملاحظه : كل كمية فيزياوية يمكن قياسها تسمى Observable او هو المتغير الديناميكي للنظام القابل للقياس مثل الطاقة، الزخم، الموضع، الزخم الزاوي .... الخ

في ميكانيك الكم يتم تمثيل كل كمية ملاحظة بمؤثر (Operator)

Operator: any mathematical entity which acts on a wave function and change it to another function.

المؤثر : هو الكمية التي اذا اثرت على دالة الموجة حولتها الى دالة موجية جديدة

الرمز المستخدم هو $\hat{A}$ للمؤثر

Example 1: $\hat{A} = \text{x} \quad , \quad \psi = x^3$

$$\hat{A}\psi = x \cdot x^3 = x^4 = \phi$$

Example 2: $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x} \quad , \quad \psi = x^3$

$$\hat{A}\psi = \frac{\partial}{\partial x} \cdot x^3 = 3x^2 = \phi$$

لاحظ ان ϕ هي دالة جديدة

Operator Equation معادلة المؤثر

يعتبر المؤثر التالي $\hat{A}(x,\frac{\partial}{\partial x})=\frac{\partial}{\partial x}x$ لاي دالة لـ x مثل ψ يمكن وضع العلاقة التالية:

$$(\frac{\partial}{\partial x}x)\,\psi(x)=\frac{\partial}{\partial x}(x\,\psi(x))$$

$$=\psi(x)+x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$$

$$=(1+x\frac{\partial}{\partial x})\,\psi(x)$$

بما ان المعادلة الاخيرة تصح لاي دالة لـ x عليه يمكن حذف ψ من الطرفين نحصل على :

$$\frac{\partial}{\partial x}x=(1+x\frac{\partial}{\partial x}) \qquad (11)$$

تدعى المعادلة (11) معادلة المؤثر

Observables		C.M.R التمثيل في الميكانيك الكلاسيكي	Q.M.R التمثيل في الميكانيك الكمي
1)	Position	x	$\hat{x}$
2)	Momentum	$p_x=m\dot{x}$	$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
3)	Kinetic energy	$T=\frac{p^2}{2m}$	$\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
4)	Total energy	$E=T+V(x)$	$\hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
5)	Hamilton	$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$	$\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$

Eigen value equation **معادلة القيمة الذاتية**

لاي مؤثر $\hat{A}$ هناك مجموعة من الاعداد (a_n) ومجموعة من الدوال $\psi_n(x)$ التي تعرف بالعلاقة التالية:

$$\hat{A}\,\psi_n(x) = a_n\,\psi_n(x) \tag{12}$$

حيث a_n هو القيمة الذاتيه للمؤثر $\hat{A}$ ، $\psi_n(x)$ هو الدالة الذاتيه المقابله للقيمة الذاتيه .

الدوال الذاتيه: هي تلك الدوال الخاصة التي تبقى بدون تغيير بعد عملية تـأثير المؤثر عند غض النظر عن القيمة الذاتيه.

Example 1: By using the eigen value equation show that the function $\psi_n(x) = e^{i4x}$ is an eigen function of the operator $\hat{A} = \dfrac{\partial}{\partial x}$

مثال 1: باستخدام معادلة القيمة الذاتية اثبت ان الدالة $\psi_n(x) = e^{i4x}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A} = \dfrac{\partial}{\partial x}$

Solution:

Let $\quad \hat{A} = \dfrac{\partial}{\partial x} \quad$ ، $\quad \psi_n(x) = e^{i4x}$

$$\hat{A}\,\psi_n(x) = a_n\,\psi_n(x)$$

$$\hat{A}\,\psi_n(x) = \frac{\partial}{\partial x}(e^{i4x})$$

$$= i4\,e^{i4x}$$

$$= a_n\,\psi_n(x)$$

$\therefore \quad a_n = i4 \qquad$ eigen value قيمه ذاتية

$\psi_n(x) = e^{i4x} \qquad$ eigen function دالة ذاتية

<u>Example</u> 2: By using the eigen value equation show that the function $\psi_n(x) = \cos(4x)$ is an eigen function of the operator $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

مثال 2 : باستخدام معادلة القيمة الذاتية اثبت ان الدالة $\psi_n(x) = \cos(4x)$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

<u>Solution:</u>

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n \psi_n(x)$$

$$\hat{A}\psi_n(x) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cos(4x)$$

$$4\frac{\partial}{\partial x}\sin(4x) = 16\cos(4x)$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\cos(4x)) = 16\cos(4x)$$

$$\hat{A}\psi_n(x) = 16\cos(4x)$$

$$a_n = 16$$

$$\psi_n(x) = \cos(4x)$$

$\because$ $\psi_n(x)$ remain unchanged, thus $\psi_n(x) = \cos(4x)$ is an eigen function for $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Example 3: By using the eigen value equation show that the function $\psi_n(x) = \sin(6x)$ is an eigen function of the operator $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

مثال 3: باستخدام معادلة القيمة الذاتية اثبت ان الدالة $\psi_n(x) = \sin(6x)$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Solution:

$$\hat{A}\,\psi_n(x) = a_n\,\psi_n(x)$$

$$\hat{A}\,\psi_n = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin(6x)$$

$$-6\frac{\partial}{\partial x}\cos(6x) = 36\sin(6x)$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin(6x) = 36\sin(6x)$$

$$\hat{A}\,\psi_n(x) = 36\sin(6x)$$

$$a_n = 36$$

$$\psi_n(x) = \sin(6x)$$

$\because$ $\psi_n(x)$ remain unchanged, thus $\psi_n(x) = \sin(6x)$ is an eigen function for $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Properties of Operators خواص المؤثرات

للمؤثرات عدة خواص هي:-

1. الصفة الخطية (linear operator)

يقال المؤثر $\hat{A}$ مؤثرا خطيا اذا حقق الشروط التالية

i. $\hat{A}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2$

ii. $\hat{A}(a\psi) = a\hat{A}\psi$ $\quad a$ is constant

2. صفة التبادل (Commutation)

يعرف تبادل مؤثرين $\hat{A}$, $\hat{B}$ كما يلي :

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

حيث ان $\hat{C}$ يسمى بالمؤثر المستبدل (Commutator operator)

i. If $\hat{C} = 0 \quad \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$

$\therefore \quad \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

في مثل هذه الحالة يسمى المؤثرين متبادلين Commute operator $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

ii. If $\hat{C} = 1$

$\hat{C} =$ Unit operator هو المؤثر الذي يمتلك وحدة واحدة

iii. If $\hat{C} \neq 0 \quad \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$

$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ Not commutator operator

وهذه من أهم العلاقات في ميكانيكا الكم فلكي نلاحظ أو نقيس مقدارين فيزيائيين في آن واحد يكفي أن نثبت أن قوس التبادل للمؤثرين يساوي الصفر أو أن المؤثرين متبادليين ، وإذا كان قوس التبادل لا يساوي صفر فذلك يعني اننا لانستطيع قياس المقدارين الفيزيائيين في آن واحد حسب مبدا الادقة لهيزنبرك

اقرأ العبارة $\hat{F} = [\hat{C}, \hat{D}]$

ان المؤثر المستبدل $\hat{F}$ هو نتيجة تبادل المؤثر $\hat{C}$ مع المؤثر $\hat{D}$

مثال اثبت ان المؤثر $[\frac{\partial}{\partial x}, x]$ هو مؤثر وحده ؟

Solution:

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

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

$$\hat{C} = [\frac{\partial}{\partial x}, x] = \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{C}\psi(x) = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right\} \psi(x)$$ نضرب طرفي المعادلة في $\psi(x)$

$$= \frac{\partial}{\partial x} x(\psi(x)) - x \frac{\partial}{\partial x}(\psi(x))$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) - x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

$$= \psi(x) + x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

$$\hat{C}\psi(x) = \psi(x)$$

$$\hat{C} = 1$$

H .W (واجب بيتي) Prove that $\hat{C} = [x\ ,\ \frac{\partial}{\partial x}] = -1$

Example: Show that $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

Solution:

$$\hat{c} = [\hat{x}, \hat{p}_x]$$
$$\hat{c} = \hat{x}\,\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}$$
$$\hat{c} = \hat{x}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\hat{x})$$
$$\hat{c}\,\psi(x) = \left\{\hat{x}\,(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\hat{x})\right\}\psi(x) \qquad \psi(x) \text{ في } \text{نضرب طرفي المعادلة}$$
$$\hat{c}\,\psi(x) = \hat{x}(-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\hat{x}\;\psi(x)$$
$$\hat{c}\,\psi(x) = -i\hbar\,\hat{x}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}) + i\hbar\psi(x) + i\hbar\,\hat{x}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$$
$$\hat{c}\,\psi(x) = i\hbar\;\psi(x) \qquad \text{من طرفي المعادلة } \psi(x) \text{ بحذف}$$
$$\hat{c} = i\hbar \qquad \text{وهو المطلوب}$$

H .W (واجب بيتي) Prove that $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$

Hermitean operator — 3. المؤثر الهرميتي

Operator Â is said to be Hermitian when satisfying the relation:

المؤثر $\hat{A}$ يسمى مؤثر هرميتي اذا حقق العلاقة التالية :

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\,\hat{A}\psi_m\,d\tau = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m\,(\hat{A}\,\psi_n)^*\,d\tau \qquad (13)$$

خواص المؤثر الهرميتي

1. القيم الذاتية المقابلة للمؤثرات الهرميتيه حقيقية

1. The eigen value correspond to any Hermitean operator are real quantities

2. الدوال الذاتية المقابلة لقيم ذاتية مختلف تكون متعامدة اي تحقق الشرط التالي

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\,\psi_m\,d\tau = 0$$

2. Eigen function correspond to different eigen value are always orthogonal i.e.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\,\psi_m\,d\tau = 0$$

اثبات الصفة الاولى $a_n = a_n^*$

باستخدام معادلة القيمة الذاتية

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots * $$

نضرب المعادله * بـ ψ_n^*

$$\psi_n^*\hat{A}\psi_n = \psi_n^* a_n\ \psi_n$$

باجراء التكامل على كل الفضاء

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\hat{A}\psi_n\, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* a_n\ \psi_n\, d\tau \quad \ldots\ldots\ldots (a)$$

باخذ المرافق المعقد للمعادلة *

$$\hat{A}^*\psi_n^* = a_n^*\psi_n^* \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots ** $$

نضرب المعادله ** بـ ψ_n

$$\psi_n\hat{A}^*\psi_n^* = a_n^*\psi_n\psi_n^*$$

باجراء التكامل على كل الفضاء

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,\hat{A}^*\psi_n^* = \int_{-\infty}^{\infty} a_n^*\psi_n\psi_n^*\, d\tau \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (b)$$

بالطرح

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\,\hat{A}\psi_n\, d\tau - \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,\hat{A}^*\psi_n^*\, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* a_n\psi_n\, d\tau - \int_{-\infty}^{\infty} a_n^*\psi_n\psi_n^*\, d\tau$$

من تعريف المؤثر الهرميتي

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\,\hat{A}\psi_n\, d\tau - \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,\hat{A}^*\psi_n^*\, d\tau = 0$$

$$0 = \left(a_n - a_n^*\right)\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\psi_n\, d\tau}_{=1}$$

$=1$ شرط المعايرة

$$\therefore\ \ a_n = a_n^*$$

اثبات الصفة الثانية $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 0$

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n \qquad \text{i}$$

$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m \qquad \text{ii}$$

ψ_n ، ψ_m هي دوال ذاتية للمؤثر الهرميتي $\hat{A}$

نضرب المعادلة i ψ_m^* ونكامل نحصل على :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \hat{A} \psi_n \, d\tau = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, d\tau \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(a)}$$

ناخذ المرافق المعقد للمعادلة ii

$$\hat{A}^* \psi_m^* = a_m^* \psi_m^*$$

ضرب المعادلة بـ ψ_n

$$\psi_n \hat{A}^* \psi_m^* = \psi_n a_m^* \psi_m^*$$

باجراء التكامل على كل الفضاء

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \hat{A}^* \psi_m^* = \int_{-\infty}^{\infty} a_m^* \psi_n \psi_m^* \, d\tau \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(b)}$$

بالطرح

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \hat{A} \psi_n \, d\tau - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \hat{A}^* \psi_m^* \, d\tau = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, d\tau - a_m^* \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_m^* \, d\tau$$

من تعريف المؤثر الهرميتي الطرف الايسر يساوي صفر

$$0 = (a_n - a_m^*) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, d\tau$$

لايمكن ان يساوي صفر كونهما عددين مختلفين القيمة

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 0 \qquad \text{Orthogonal}$$ متعامده

Normalized Function **الدوال العياريه**

سبق ان بينا حسب فرضية بورن بان كثافة الاحتماليه

$p(x,t) = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)$ (Is the probability density)

اي حاصل ضرب الداله بمرافقها المعقد

وعليه تكون الكمية $p(x,t)dx$ هي عبارة عن احتماليه وجود جسيم في اللحظة t خلال المدى x ، $x+dx$

$|\psi(x,t)|^2\,dx$ Probability of finding particle between x and $x+dx$ at time t

ومن الطبيعي اذا كانت $\psi(x,t)$ تصف جسما في الفضاء في بعد واحد فان هذا الجسيم لابد ان يكون موجودا في نقطة من نقاط الفضاء لذلك فان

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x,t)\,dx = 1$$

اذ ان مجموع كل الاحتمالات الممكنه واحد دائما وحدود التكامل هنا على كل القيم المقبوله للمتغير x

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\cdot\psi(x,t)\,dx = 1$$

اذا كانت $\psi(x,t)$ تحقق المعادله اعلاه فيقال عنها دالة عيارية Normalized

Orthogonality of Wave Function **التعامد**

1. Tow different wave function ψ_n & ψ_m are said to be orthogonal if

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*\,\psi_n\,d\tau = 0$$

2. Wave function that are solution of given Schrödinger equation are usually orthogonal one to other

دالات الموجة التي تكون هي حل لمعادلة شرودنكر مشتركة تكون عادة متعامدة مع بعضها البعض

3. Wave function that are both orthogonal and normalized called (orthonormal) such that

اذا كانت الدالتين متعامدتين ومعيره بنفس الوقت عندها تدعى orthonormal

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*\,\psi_n\,d\tau = \delta_{mn}$$

Where the kroneker delta (δ_{mn}) is function with tow values

$$\delta_{mn} = 1 \qquad \text{at} \quad \mathrm{m = n}$$

$$\delta_{mn} = 0 \qquad \text{at} \quad \mathrm{m \neq n}$$

Q) Prove that p_x is Hermitian operator ?

يسمى المؤثر A هرميتيا اذا حقق العلاقة التالية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \hat{A} \psi_m \, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m (\hat{A}\, \psi_n)^* \, d\tau$$

والان لنرى اذا كان p_x مؤثرا هرميتيا:-

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\, \psi_m \, dx$$

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\psi_n^*}_{\mathrm{u}} \, \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \psi_m \, dx}_{\mathrm{dv}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{u\, dv} = \mathrm{uv}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{v\, du}$$ وباستخدام التكامل بالتجزئه

$$\mathrm{u} = \psi_n^* \quad ، \quad \mathrm{dv} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_m \, dx$$ نفرض ان

$$\mathrm{du} = \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} dx \quad ، \quad \mathrm{v} = \psi_m$$ اذن

$$= -\mathrm{i}\hbar\, \psi_{\mathrm{n}}^* \psi_m \Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} \, dx$$

$$=0 \qquad x \to \infty \qquad \to \psi = 0$$

$$= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \, (i\hbar \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x}) \, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \, (-i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial x})^* \, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \, (\hat{p}_x \psi_n)^* \, dx$$

اذن المؤثر p_x هوهرميتي

واجب بيتي هل ان المؤثر $\frac{\partial}{\partial x}$ هرميتي ام لا ؟

التفسير الفيزياوي لمعادلة القيمة الذاتية — Physical Interpretation

$$\hat{A} \psi_n(x) = a_n \, \psi_n(x)$$

التفسير الفيزياوي لمعادلة القيمة الذاتية هو كما يلي :-

المؤثر $\hat{A}$ يقوم بقياس الصفة الفيزياوية التي يمثلها النظام الموصوف بدالة الموجة ψ والمتواجد في الحالة الكمية n ، نتيجة عملية القياس هي القيمة الذاتية a_n .

$$\hat{A} \psi_n(x) = a_n \, \psi_n(x)$$

Make Measurement

Result of Measurement

on a system in State n

وعلى غرار ذلك نقول عندما يؤثر مؤثر الزخم $\hat{p}$ على النظام الموصوف بالدالة ψ_n والموجود في الحالة الكمية n فانه يقوم بقياس الزخم للنظام في تلك الحالة

$$\left.\begin{aligned} \hat{p} \psi_n &= p_n \psi_n \\ \hat{p}^2 \psi_n &= p_n^2 \psi_n \\ \hat{H} \psi_n &= E_n \psi_n \\ \hat{r} \psi_n &= r_n \psi_n \end{aligned}\right\} \qquad (14)$$

اذا تذكرنا المعادلة (4) ، (5) ، (6) ، (10)

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = p\psi \qquad (4)$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = p^2\psi \qquad (5)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \qquad (6)$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\psi = E\psi \qquad (10)$$

صيغة مؤثر الطاقة له صيغتان هما :

$$\left.\begin{aligned}\hat{H} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\end{aligned}\right\} \qquad (15)$$

وعلى هذا الاساس يمكن ايجاد الصيغة الرياضية لاي مؤثر مقابل لصيغة فيزياوية معينه.

واجب بيتي

1. مستخدما العلاقة الكلاسيكية $p_x = m\dot{x}$ جد الصيغة الرياضية لمؤثر السرعة

2. Q 2) By using the classical relation $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ show that;

3. مستخدما العلاقة الكلاسيكية $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ اثبت ان مؤثرات مركبات الزخم الزاوي هي على التوالي

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

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

Expectation Value and Variance القيمة المتوقعة والتغاير (التفاوت)

If the system is in state ψ which is not an eigen state of a such observable, then it is not possible to say with certainty what measured value will be found for A. Therefore, one has to use the average value $\overline{A}$ which called in Q.M. expectation value of A. It is defined mathematically as:

اذا كان النظام في الحالة ψ اي موصوف بدالة الموجة ψ والتي هي دالة غير ذاتيه للمؤثر $\hat{A}$ فانه لايمكن التنبؤ بنتيجة عملية القياس في مثل هذه الحالة نستخدم معدل القيمة والذي يسمى في ميكانيك الكم بالقيمة المتوقعة والذي يمثل رياضيا بالعلاقة الرياضية التالية:

$$\overline{A} = \langle A \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau}{\int \psi^* \psi \, d\tau} \tag{16}$$

For normalized اذا كانت الدالة عيارية

$$\overline{A} = \langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau$$

Example:

1. الموضع (Position)

$$\langle x \rangle = \int \psi^* \hat{x} \, \psi \, dx$$ القيمة المتوقعة للموضع

2. الزخم (Momentum)

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^* p_x \psi \, dx$$ القيمة المتوقة للزخم

$$\because \quad p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \, dx$$

3. القيمة المتوقعة للطاقة الكلية (Total energy)

$$\langle E\rangle = \int \psi^* \hat{E} \psi \, d\tau \quad , \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\langle E\rangle = i\hbar \int \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi \, d\tau$$

4. القيمة المتوقعة للطاقة الحركية (Kinetic energy)

$$\langle T\rangle = \int \psi^* \hat{T} \, \psi \, dx$$

$$\because \qquad \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad ، \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad ، \quad \hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\therefore \qquad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \, dx$$

(Variance) **(التفاوت)**

Variance: The deviation in the measured of the operator $\hat{A}$ from its expected value $\langle A\rangle$

التفاوت : هو مقدار الانحراف بقيمة القياس عن القيمة المتوقعه لذلك المؤثر .

ورياضيا يعطى بجذر معدل مربع القيمة المتوقعه

$$\Delta A = \{\langle (A - \langle A\rangle)^2 \rangle\}^{1/2}$$

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

$$= \int \psi^* (A - \langle A\rangle)^2 \psi \, d\tau$$

$$= \int \psi^* (A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2) \, \psi \, d\tau$$

$$= \int \psi^* A^2 \psi \, d\tau - \int \psi^* (2A\langle A\rangle) \psi \, d\tau + \int \psi^* \langle A\rangle^2 \psi \, d\tau$$

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

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \qquad \ldots\ldots\ldots \qquad (17)$$

معادلة التفاوت

Example:

1. **(Position)** التفاوت في الموضع

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

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi^* \hat{x}^2 \psi \; dx$$

$$\langle x \rangle^2 = (\int \psi^* \hat{x} \, \psi \; dx)^2$$

2. **(Momentum)** التفاوت في الزخم

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

$$\langle p_x^2 \rangle = \int \psi^* p_x^2 \psi \; dx$$

$$\langle p_x \rangle^2 = (\int \psi^* p_x \psi \; dx)^2$$

Eigen function and constant of motion الدوال الذاتية وثوابت الحركه

If the Eigen function ψ of the operator $\hat{A}$ with Eigen value (a), then all measurements of the observable (A) lead to the Eigen value (a) i.e. $\langle A \rangle = a$ then the observable A is called (constant of motion) and it is conserved quantity

$$(\frac{\partial A}{\partial t} = 0)$$

اذا كانت الدالة ψ دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ بقيمة ذاتية مقابله (a) فان في مثل هذه الحالة كل عمليات القياس التي تجري لايجاد الكمية الملاحظة (A) ستؤدي الى القيمة الذاتية a اي ان $\langle A \rangle = a$ في مثل هذه الحالة يقال للقيمة

الملاحظه (A) بثابت حركة او كميه محافظه conserved وذلك يعني بان الكمية الملاحظة A ثابتة لاتتغير مع الزمن $\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t} = 0$

لاثبات ذلك رياضيا لاحظ مايلي

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau$$

باخذ مشتقة الطرفين بالنسبة للزمن

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \dot{\bar{A}} = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d\tau \ \ldots\ldots\ldots\ldots \text{(a)}$$

$$\left. \begin{array}{l} i\hbar \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \\ -i\hbar \dfrac{\partial \psi^*}{\partial t} = (\hat{H} \psi)^* \end{array} \right\} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(b)}$$ باستخدام المعادلة

بالتعويض من المعادلة (b) عن $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ ، $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ في المعادلة (a) يكون

$$\dot{\bar{A}} = \int \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\psi)^* \hat{A} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* A \hat{H} \psi \right\} d\tau$$

ومن تعريف المؤثر الهرميتي لدينا

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

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \dot{\bar{A}} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) \, \psi \, d\tau$$

In Q.M we assume that $\dot{\bar{A}} = \bar{\dot{A}}$

$$\therefore \quad \bar{\dot{A}} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) \, \psi \, d\tau$$

$$\bar{\dot{A}} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{A} \right] \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(18)}$$

Motion equation معادلة الحركة

و $\hat{A}$ يسمى ثابت الحركة Constant of motion

The equation of motion (18) show that the fact the observable $\hat{A}$ to be motion constant if its operator are commute with the Hamilton operator.

اي ان المؤثر $\hat{A}$ يكون ثابت حركة اذا كان متبادلا مع المؤثر الهاملتوني

Example: Show that the momentum p_x of free particle is constant of motion?

اثبت ان الزخم الخطي p_x لجسيم حر هو ثابت حركه ؟

Solution

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

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\bar{\dot{p}} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{p}\right]$$

$$\bar{\dot{p}} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H})$$

$$\bar{\dot{p}}\psi = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H})\psi$$ نضرب طرفي المعادلة في ψ

$$\bar{\dot{p}}\psi = \frac{i}{\hbar}\{(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})\cdot(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}) - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\cdot(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2})\}$$

$$\bar{\dot{p}}\psi = \frac{i}{\hbar}\{\frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\}$$

$\bar{\dot{p}} = 0 \longrightarrow \bar{\dot{p}} = 0 \quad p = \text{constan of motion}$ اذن الزخم هو ثابت حركة

Prove that:

a) $\langle E\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle$

القيمة المتوقعة للطاقة الكلية تساوي القيمة المتوقعة للطاقة الحركية مضاف اليها القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة.

البرهان : نكتب معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن (T.D.S.E)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$$

وبدلالة المؤثرات يمكن كتابة المعادلة على النحو التالي

$$\hat{E}\psi = \hat{T}\psi + \hat{V}\psi \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(a)}$$

وبضرب طرفي المعادلة (a) من اليسار في ψ^* واجراء التكامل بالنسبة للحجم نحصل على :

$$\int \psi^* \hat{E} \psi \, d\tau = \int \psi^* \hat{T} \psi \, d\tau + \int \psi^* \hat{V} \psi \, d\tau$$

$\therefore \quad \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ وهو المطلوب

b) $\dfrac{d}{dt}\langle x \rangle = \dfrac{1}{m}\langle p_x \rangle$

تغير القيمة المتوقعة لـ x في وحدة الزمن يساوي القيمة المتوقعة للزخم في اتجاه x مقسومة على الكتله

البرهان: لما كان

$$\langle x \rangle = \int \psi^* \hat{x} \psi \, dx$$

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{d}{dt}\int \psi^* \hat{x} \psi \, dx$$

$$= \int x(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}) \, d\tau \ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \text{(a)}$$

من معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن From T.D.S.E

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

بالقسمة على $i\hbar$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi + \frac{V(r)\psi}{i\hbar} \ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \text{(b)}$$

وباخذ المرافق المعقد لطرفيها

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{-i\hbar}{2m}\nabla^2\psi^* - \frac{V(r)\psi^*}{i\hbar} \ \dots\dots\dots\dots \text{(c)}$$

وبتعويض قيمتي $\dfrac{\partial \psi}{\partial t}$ ، $\dfrac{\partial \psi^*}{\partial t}$ من المعادلتين b ، c في المعادلة a نحصل على:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int (\psi^* x \nabla^2 \psi - \psi \ x \nabla^2 \psi^*) \ d\tau \ \dots\dots\dots\dots \text{(d)}$$

باستخدام نظرية كرين From Greens Theorem:

$$\int (\psi^* \nabla^2 x\psi - x\psi \nabla^2 \psi^*) \ d\tau = \int (\psi^* \nabla x\psi - x\psi \nabla \psi^*) \cdot ds = 0$$

The boundary condition imposed on ψ make the surface integral equal to zero

الشرط المحدد على ψ يجعل التكامل السطحي يساوي صفر

The probability of finding the particle outside the volume is equal to zero i.e. the wave function ψ is equal to zero on the surface

اي ان احتمالية بوجود الجسيمات خارج الحجم مساوي للصفر اي ان دالة الموجة $\psi = 0$ على السطح

$$\therefore \quad \int (\psi^* \nabla^2 x\psi \, d\tau = \int x\psi \nabla^2 \psi^* d\tau$$

وبالتعويض في المعادلة d يكون

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int (\psi^* x\nabla^2\psi - \psi^* \nabla^2 x\psi) \; d\tau \; \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(e)}$$

ولما كان

$$\nabla^2 x\psi = \nabla \cdot \nabla x \, \psi$$

$$= x\nabla^2\psi + \nabla\psi + \nabla\psi$$

$$\therefore \; \nabla^2 x\psi = x\nabla^2\psi + 2\frac{\partial}{\partial x}\psi \; \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(f)}$$

نعوض معادلة (f) في معادلة (e)

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int (\psi^* x\nabla^2\psi - \psi^* x\nabla^2\psi - 2\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x}) \; d\tau$$

$$= \frac{-i\hbar}{m}\int \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} d\tau$$

$$= \frac{1}{m}\int \psi^* (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi \; d\tau$$

$$= \frac{1}{m}\int \psi^* \hat{p}_x \psi \, d\tau$$

$$\therefore \quad \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\langle p_x\rangle}{m}$$ وهو المطلوب

c) $\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\langle\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$

تغيرالقيمـة المتوقعـة لــ p_x فـي وحـدة الـزمن يسـاوي سـالب القيمـة المتوقعـة لمشـتقة الطاقـة الكامنـة V بالنسـبة للاحداثي x

البرهان

لما كان

$$\langle p_x\rangle = \int \psi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\ \psi\ d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -i\hbar\frac{d}{dt}\int \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = i\hbar\int(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial t}+\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\frac{\partial \psi}{\partial x})\ d\tau \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(a)}$$

من معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن From T.D.S.E

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

بالقسمة على $i\hbar$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar}{2mi}\nabla^2\psi + \frac{V(r)\psi}{i\hbar}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(b)}$$

باخذ المرافق المعقد

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi}\nabla^2\psi^* - \frac{V(r)\psi^*}{i\hbar}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(c)}$$

نعوض معادلة (b) ، (c) في المعادلة (a) نحصل :

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -i\hbar\int[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\frac{-\hbar}{2mi}\nabla^2\psi + \frac{V}{i\hbar}\psi) + (\frac{\hbar}{2mi}\nabla^2\psi^* - \frac{V}{i\hbar}\psi^*)\frac{\partial \psi}{\partial x}]d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \int[\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}V\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} + V\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}]d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\int(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}V\psi - V\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x})\ d\tau - \frac{\hbar^2}{2m}\int[\frac{\partial \psi}{\partial x}\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2(\frac{\partial \psi}{\partial x})]d\tau$$

Apply Greens theorem on the second term

بتطبيق نظرية كرين على الحد الثاني وتحويله الى تكامل سطحي والذي يساوي صفر كما بينا سابقا. اي ان

$$\int[\frac{\partial\psi}{\partial x}\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\frac{\partial\psi}{\partial x}]d\tau = \int[\frac{\partial\psi}{\partial x}\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\frac{\partial\psi}{\partial x}]\cdot ds$$

$$= 0$$

اما تكامل الحد الاول فهو يساوي

$$= -\int(\psi^*(V\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\frac{\partial V}{\partial x}) - V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\ \ d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\int\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi\ d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = -\langle\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$$ وهو المطلوب

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t)+V(r)\,\psi(r,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} \qquad \text{..} (8)$$

بما ان معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن هي معادلة تفاضليه جزئية من الرتبة الثانية فان طريقة فصل المتغيرات يمكن ان تستخدم لحل هذه المعادلة : اي ان

$$\psi(r,t)=\psi(r)\,\psi(t)$$

$$\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t}=\psi(r)\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \qquad \text{................} (a)$$

$$\nabla^2\psi(r,t)=\psi(t)\nabla^2\psi(r) \text{..............} (b)$$

نعوض من (a) ، (b) في معادلة 8 نحصل على

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

نقسم على $\psi(r,t)$ نحصل على

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

نلاحظ الان ان الطرف الايسر يعتمد على الزمن بينما الطرف الايمن يعتمد على الموضع، وكل طرف يجب ان يبقى ثابتا لكي تبقى المعادلة صحيحه اذاً كل طرف يساوي المقدار الثابت نفسه

$$i\hbar\frac{1}{\psi(t)}\frac{d\psi(t)}{dt}=E \qquad \text{..} (19)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+V\,\psi(r)=E\psi(r)$$

والان اجراء التكامل على المعادلة 19

$$\int_0^t\frac{d\psi(t)}{\psi(t)}=\frac{-i}{\hbar}E\int_0^t dt$$

$$\ln\psi(t)\Big|_0^t=-\frac{i}{\hbar}Et$$

$$\ln\frac{\psi(t)}{\psi(\circ)}=-\frac{i}{\hbar}Et$$

$$\psi(t)=\psi(\circ)\ e^{\frac{-i}{\hbar}Et} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (20)$$

$$\psi(r,t)=\psi(r)\{\psi(\circ)\ e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (20')$$

Let $\psi(\circ)=1$

$$\psi(r,t)=\psi(r)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}$$

$$\int\psi^*(r,t)\psi(r,t)d\tau=\int\psi^*(r)\ e^{\frac{i}{\hbar}Et}\ \psi(r)\ e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\ d\tau=1$$

ومنه نستنتج

$$\int\psi^*(r)\ \psi(r)\,d\tau=1$$

اي ان الدالـة $\psi(r)$ يجـب ان تكـون عياريـة ايضـا . ولمـا كانـت احتماليـة الحصـول علـى جسـيم تتناسـب مـع $\psi^*(r,t)\psi(r,t)$ وان الاخيرة تساوي $\psi^*(r)\ \psi(r)$ وهذا يعني فيزياويا ان احتماليـة الحصـول علـى الجسيم في نقطة لاتعتمد على الزمن .

الجسيم الذي دالته الموجية بالصيغة $(20')$ يقال عنه انه في حالة مستقرة Stationary state

Properties of Energy Level and Wave Function –Degeneracy

صفات مستويات الطاقة ودوال الموجة ـ الانحلال

Degeneracy: is the case when there are more than one wave function corresponds to the same eigen value

الانحلال :ـ هي الحالة التي يكون فيها اكثر من دالة ذاتيه تقابل نفس القيمة الذاتية.

في حالات معينه يرافق مستوى طاقة معين مثل E_n اكثر من دالة موجة واحده ψ_n بحيث تكون هذه الدوال مستقلة خطيا عن بعضها البعض (linearly independent) وفي مثل هذه الحلات يسمى مستوى الطاقة منحلا Degeneracy ودرجة الانحلال degree of Degeneracy تساوي عدد الدوال الموجية المستقله المرافقه لذلك المستوى. فمثلا اذا كان مستوى الطاقة E_n منحلا بدرجة انحلال تساوي N فان عدد الدوال المسقله سيكون مساويا لـ N

$$\psi_n^1 \;\; , \;\; \psi_n^2 \;\; , \;\; \psi_n^3 \;\; , \;\; \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots , \psi_n^N$$

التركيب الخطي لهذه الدوال هي

$$\phi_n^p = \sum_{i=1}^{N} c_{pi}\,\psi_n^i \qquad\qquad 1 \le p \le N \tag{21}$$

ان مجموعة الدوال الموضحة بالعلاقة اعلاه تخضع لشرط العيارية والتعامد

$$\int \{\psi_n^p\}^* \{\psi_m^q\}\, d\tau = \delta_{nm}\delta_{pq} \tag{22}$$

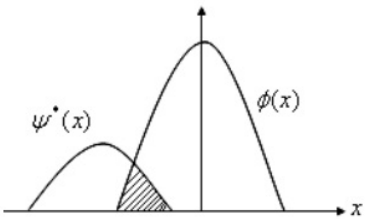
❖ ان احتمالية ان عملية القياس ستؤدي الى القيمة الذاتية a_n تعرف بالعلاقة التالية :

$$p_n = \frac{\left|\psi_n^* \phi\, d\tau\right|^2}{\left|\phi^* \phi\, d\tau\right|}$$

For normalized

$$p_n = \left|\psi_n^* \phi\, d\tau\right|^2$$

ملاحظة ان التكامل في العلاقة الرياضية الاخيرة يسمى بتكامل التداخل (Overlap integral) ان قيمة لهذا التكامل 1 واقل قيمة له صفر



ملاحضة : اذا كان لدينا مجموعة من الدوال ψ_1 , ψ_3 , ψ_2..... تصف حالات نظام فهذه الدالات تدعى بالدالات الذاتية للنظام والقيم الذاتية لهذا النظام هي a_1 , a_3 , a_2 ..... على التوالي . فعندئذ يمكن كتابة الدالة الجديدة ϕ التي تمثل المجموع الخطي للدالات الذاتية بالشكل الاتي

$$\phi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \dots\dots\dots + c_n\psi_n = \sum_n c_n\psi_n$$

تسمى هذه العلاقة مبدأ التركيب الخطي (linear superposition principle)

هنا ϕ هي دالة لموجة العيارية المقابلة للقيمة الذاتية a_n و c_n هو معامل الحد في تلك اللحظة

س / اثبت ان الاحتمالية الكلية تساوي مجموع الاحتماليات الجزئية

نبدأ بشرط المعايرة

$$\int_{\text{allspace}} \phi^*\phi \, d\tau = 1$$

$$\int \sum_n c_n^* \psi_n^* \cdot \sum_m c_m \psi_m = 1$$

$$\sum_n \sum_m c_n^* c_m \int \psi_n^* \psi_m \, d\tau = 1$$

$$\sum_n \sum_m c_n^* c_m \, \delta_{nm} = 1 \qquad \text{if} \quad \delta_{nm} = 1 \quad \text{for} \quad n = m$$

$$\sum_n c_n^* c_n = 1$$

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

اي ان الاحتمالية الكلية تساوي مجموع مربعات القيم المطلقه للمعاملات داخل المفكوك (الاحتمالية الجزئيه) ويجب ان تساوي واحد في كل الاوقات

2) اثبت ان القيمة المتوقعة لكمية ملاحظة تساوي مجموع حاصل ضرب الاحتمالات الجزئية في القيمة الذاتية المقابلة لها

$$\langle A\rangle = \sum_n |c_n|^2 \ a_n$$

$$= |c_1|^2 a_1 + |c_2|^2 a_2 + \cdots\cdot$$

البرهان

$$\langle A\rangle = \int \phi^* \hat{A}\phi \ d\tau$$

$$= \int \{\sum_n c_n \psi_n\}^* A\{\sum_m c_m \psi_m\} d\tau$$

$$= \int \sum_n c_n^* \psi_n^* \cdot \sum_m c_m A \psi_m d\tau$$

$$= \sum_n c_n^* \sum_m c_m \ a_m \int \psi_n^* \psi_m d\tau$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \ a_m \ \delta_{nm} \qquad \text{when } n = m \ \Rightarrow \ \delta_{nm} = 1$$

$$= \sum_n c_n^* c_n \ a_n$$

$$\therefore \quad \langle A\rangle = \sum_n |c_n|^2 \cdot a_n$$

التفسير الفيزياوي للمعادلة اعلاه هو

The expectation value of A is the sum of each eigen value a_n times the partial probability $|c_n|^2$ of the system to be in that state n

3) اثبت ان احتمالية ان تؤدي عملية القياس الى القيمة الذاتية (p_n) مساوية الى الاحتمالية الجزئية كي يتواجد النظام في الحالة الكمية n

البرهان

$$p_n = \left|\int \psi_n^* \phi \, d\tau\right|^2 = |c_n|^2$$

$$= \left|\int \psi_n^* (c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots)\, d\tau\right|^2$$

$$= \left|c_n \int \psi_n^* \psi_n \, d\tau\right|^2$$

$$= |c_n \, \delta_{nn}|^2 \qquad\qquad n = m \;\Rightarrow\; \delta_{nm} = 1$$

$$\therefore \; p_n = |c_n|^2$$

انحفاض الاحتمالية وكثافة تيار الاحتمالية
Conservation of Probability and Probability Current density

بما ان الاحتمالية الكلية يجب ان تساوي الواحد الصحيح اي ان

$$P_t = \int \psi^* \psi \; d\tau = 1$$

To proof conservation of probability

$$\frac{dp_t}{dt} = \text{Must be equal zero}$$

لاثبات ان الاحتمالية الكلية يجب ان لا تتغير مع الزمن فان المشتقة P_t مع الزمن يجب ان تساوي صفر

$$\frac{dp_t}{dt} = \frac{d}{dt}\int \psi^* \psi \; d\tau$$

$$= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) \, d\tau$$

باستخدام المعادلة

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar}\hat{H}\psi$$

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

$$\frac{dp_t}{dt}=\frac{i}{\hbar}\int[(\hat{H}\psi)^*\psi-\psi^*(\hat{H}\psi)]\ d\tau$$

$\because\ \hat{H}$ Is Hermitian operator i.e.

$$\int(\hat{H}\psi)^*\psi d\tau=\int\psi^*(\hat{H}\psi)\ d\tau$$

$$\frac{dp_t}{dt}=\frac{i}{\hbar}\int(\psi^*\hat{H}\psi-\psi^*\hat{H}\psi)\ d\tau$$

$$\therefore\ \frac{dp_t}{dt}=0$$

هذا يعني ان الاحتمالية الكلية لاتعتمد على الزمن وترينا النتيجة ايضا حاجتنا للمؤثرات الهرميتية ، حيث الصفة الهرميتية هي بقاء الاحتمالية الكلية ثابته مع الزمن.

كثافة تيار الاحتمالية — Probability Current density

ان فكرة كثافة الاحتمال المعطاة من حاصل ضرب $p_d=\psi^*\psi$ تؤدي الى التفكير بوجود مايمكن ان يصطلح عليه بتيار الاحتمالية. والسبب في ذلك هو اننا لو تفحصنا المبادئ الكلاسيكية نجد انه حينما وجد مفهوم الكثافة وجد مفهوم التيار مرتبطا معه فتغير كثافة شحنات كهربائية مع الزمن ضمن حجم معين يؤدي الى سريان تيار كهربائي خارج السطح المحيط بذلك الحجم.

ان الفكرة يمكن تعميمها على مبدأ كثافة الاحتمالية في الميكانيك الكمي **لاشتقاق معادلة الاستمرارية** على غرار معادلة الاستمرارية في الكهربائية.

لنعتبرالان كثافة الاحتمالية $p_d=\psi^*\psi$

$$\frac{\partial p_d}{\partial t}=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\because\ i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi\quad,\quad -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=(\hat{H}\psi)^*$$

وبحذف المشتقات

$$\frac{\partial p_d}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\psi^*\psi+\psi^*(\frac{-i}{\hbar})\hat{H}\psi$$

$$=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}^*\psi^*\psi-\psi^*\hat{H}\psi)$$

وبالتعويض عن $\hat{H}$

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

$$=\frac{i}{\hbar}[\psi(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r))\psi^*-\psi^*(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r))\psi]$$

$$=\frac{-i\hbar}{2m}\psi\ \nabla^2\psi^*+\frac{i}{\hbar}\psi\ V(r)\psi^*+\frac{i\hbar}{2m}\psi^*\nabla^2\psi-\frac{i}{\hbar}\psi^*V(r)\psi$$

$$=\frac{-i\hbar}{2m}\psi\ \nabla^2\psi^*+\frac{i\hbar}{2m}\psi^*\nabla^2\psi$$

$$=\frac{\hbar}{2mi}\psi\ \nabla^2\psi^*-\frac{\hbar}{2mi}\psi^*\nabla^2\psi$$

$$=\frac{-\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\ \nabla^2\psi^*)$$

ولما كان

$$\psi^*\nabla^2\psi-\psi\ \nabla^2\psi^*=\vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\ \vec{\nabla}\psi^*)$$

$$\frac{dp_d}{dt}=-\vec{\nabla}.\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\ \vec{\nabla}\psi^*)$$

$$\frac{dp_d}{dt}+\vec{\nabla}.\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\ \vec{\nabla}\psi^*)=0$$

ولنعرف الكمية j بالعبارة

$$j=\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^*)$$

ونسميها متجه تيار الاحتمالية

$$\therefore\quad \frac{dp_d}{dt}+\vec{\nabla}.j=0 \qquad (23)$$

تسمى المعادلة 23 بمعادلة الاستمرارية وهي شبيهة لتلك الموجودة في الكهربائيه والثرمودابنمك.

التفسير الفيزياوي للمعادلة اعلاه تعني بان المعدل الزمني لتغير كثافة الاحتمالية ناتج بسبب جريان كثافة تيار الاحتمالية والذي تكامله حول سطح مغلق يجب ان يساوي معدل تغيير تواجد الجسيم داخل السطح.

الحالات المكممة **Quantized States**

تتخذ بعض الكميات الداينميكية (مثل الطاقة والزخم الزاوي)، لنفسها وبصورة دقيقة قيم معرفه متميزة فيقال عنها انها مكممة. هذا السلوك يستحيل في اكثر الاحيان لان تطبيق اسس الميكانيك الكمي على منظومة معينة يعطي غالبا توزيع لهذه القيم التي نحصل عليها نتيجة القياسات (قيم متوقعة)

اذا هنالك نوع من دوال الموجة تقابل الحالة التي تكون فيها كمية داينميكية معرفة القيمة تماما وهذه الدوال تحقق المعادلة التالية

$$A\psi = a\psi$$

حيث a ثابت حقيقي عندئذ تكون الكمية A معرفه تماما بالكمية a

وللبرهنه على ذلك نحسب القيمة المتوقعه

$$\langle A\rangle = \int \psi^* A\psi \; d\tau$$

$$= \int \psi^* a\psi \; d\tau$$

$$= a\int \psi^* \psi \; d\tau$$

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

وكذلك فان

$$\langle A^2\rangle = \int \psi^* \hat{A}(\hat{A}\psi) \; d\tau$$

$$= \int \psi^* \hat{A} a\psi \; d\tau$$

$$= a\int \psi^* \hat{A}\psi \; d\tau$$

$$= a\int \psi^* a\psi \; d\tau$$

$$= a^2\int \psi^* \psi \; d\tau$$

$$\therefore \; \langle A^2\rangle = a^2$$

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

$$= a^2 - a^2 = 0$$

بعبارة اخرى فليس هنالك اي شك (او لادقة) في قيمة A بل ان A معرفة بالقيمه الدقيقه a

التماثل **Parity**

تتصف دوال الموجة في اكثر الاحيان بصفة مهمة تلعب دورا اساسيا في الظواهر الفيزياويه مفادها ان الدوال تمتلك على التناوب تناظرا زوجيا (even) وفرديا (odd) بالنسبة للانعكاس في الاحداثيات خلال نقطة الاصل

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi(-x) & \text{even parity} \\ \\ -\psi(-x) & \text{odd parity} \end{cases}$$

Example 1

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

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

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

Example 2

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

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

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

اذا كانت $V(x)$ متناظرة اي ان $V(-x) = V(x)$ ومستويات الطاقة غير منحله فتكون كل الحلول لمعادلة شرودنكر الغير معتمدة على الزمن تأخذ الشكلين

اما $\psi(-x) = \psi(x)$

او $\psi(-x) = -\psi(x)$

ولما كانت $\psi(x)$ تحقق معادلة شرودنكر الغير معتمدة على الزمن

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

وعند استبدال x بـ $-x$.

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(-x)+V(x)\psi(-x)=E\psi(-x)$$

وبما ان $\psi(-x)$ ، $\psi(x)$ تحقق معادلة تفاضلية واحدة وهي معادلة شرودنكر غير معتمدة على الزمن وجب ان يكون

$$\psi(-x)=r_n\,\psi(x)\,\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots*$$

حيث r_n ثابت وباستبدال x بـ $-x$

$$\psi(x)=r_n\,\psi(-x)$$

وباستخدم المعدلة * نجد ان

$$\psi(x)=r_n r_n\,\psi(x)$$

$$\psi(x)=r_n^2\,\psi(x) \Longrightarrow r_n=\pm 1$$

وبالرجوع الى المعادلة (*) وبالعويض عن r_n يكون

$$\psi(-x)=\pm\psi(x)$$

وفي الحالة التي يكون فيها $\psi(-x)=\psi(x)$ يقال للدالة ψ تماثل زوجي بينما في الحالة الاخرى $\psi(-x)=-\psi(x)$ يقال ان لها تماثل فردي.

ويمكننا الان ان نعرف مؤثر الانعكاس $\hat{R}$ (Reflection operator) الذي حاصل تأثيره على الدالة $\psi(x)$ هو استبدال x بـ $-x$

$$\hat{R}\psi(x)=\psi(-x)$$

<u>Reflection operator:</u> is that operator when operate on such function convert it around the origin i.e. $\hat{R}\psi(x)=\psi(-x)$

بتحوير بسيط يمكن كتابة المعادلة (*) بالشكل التالي

$$\hat{R}\psi(x)=r_n\,\psi(x)=\psi(-x)$$

حيث r_n تمثل القيم الذاتية للتماثل، ولو اثرنا الان مرة اخرى بالمؤثر $\hat{R}$ على طرفي المعادلة اعلاه يكون

$$\hat{R}(\hat{R}\psi(x))=\hat{R}\,r_n\psi(x)$$
$$=r_n\hat{R}\psi(x)$$

$$= r_n^2\,\psi(x)$$

وبنفس الوقت

$$\hat{R}(\hat{R}\psi(x)) = \hat{R}\psi(-x)$$

$$= \psi(x)$$

$$\therefore \quad r_n^2 = 1 \rightarrow r_n = \pm 1$$

اي ان القيم الذاتية للتماثل هي ± 1 وهذا يعني ان دوال الموجة للتماثل اما ان تكون زوجية في x او فردية, هنا $r_{n=} \pm 1$ هي القيم الذاتية للمؤثر $\hat{R}$ بينما $\psi(x)$ هي الدالة الذاتية

<u>Example</u>

Let $\psi(x) = x^2$

$$\hat{R}\psi(x) = (-x)^2 = x^2 \rightarrow r_n = 1$$

س) اذا كان المؤثر $\hat{H}(x)$ (المؤثر الهاملتوني) دالة زوجية في x اي ان $\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$ فبرهن انه يتبادل مع المؤثر $\hat{R}$ (مؤثر الانعكاس)

<u>البرهان:</u>

$$\hat{R}(\hat{H}(x)\psi(x)) = \hat{H}(-x)\psi(-x)$$

$$= \hat{H}(x)\psi(-x)$$

$$= \hat{H}(x)\hat{R}\psi(x)$$

وعليه فان

$$\hat{R}\hat{H}(x)\psi(x) = \hat{H}(x)\hat{R}\psi(x)$$

اذن

$$(\hat{R}\hat{H}(x) - \hat{H}(x)\hat{R})\psi(x) = 0$$

اي ان المستبدل $\hat{C}$ للمؤثرين $\hat{R}$ ، $\hat{H}$ يساوي صفر

$$\hat{C} = \hat{R}\hat{H} - \hat{H}\hat{R} = 0$$

Q1) Establish the operator equation

a) $\frac{\partial}{\partial x}x^n = nx^{n-1} + x^n \frac{\partial}{\partial x}$

b) and hence show that :

$[\frac{\partial}{\partial x}, x^n] = nx^{n-1}$

<u>Solution:</u>

a) For any function of x, say $\psi(x)$ one can write:

$$(\frac{\partial}{\partial x}x^n)\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x^n\psi(x))$$

$$= nx^{n-1}\psi(x) + x^n \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

Since this equation must valid for any function of x, thus the operator equation is :

$$\frac{\partial}{\partial x}x^n = nx^{n-1} + x^n \frac{\partial}{\partial x}$$

b)

$$[\frac{\partial}{\partial x}, x^n]\psi(x) = (\frac{\partial}{\partial x} x^n\psi(x)) - (x^n \frac{\partial}{\partial x})\psi(x)$$

$$= nx^{n-1}\psi(x) + x^n \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - x^n \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

$$= nx^{n-1}\psi(x)$$

Hence the tow operators $\frac{\partial}{\partial x}$, x^n are not commute, and the corresponding commutator operator is, i.e. $[\frac{\partial}{\partial x}, x^n] = nx^{n-1}$

Q2) Evaluate $[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^n}{\partial x^n}]$

Solution:

$$[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^n}{\partial x^n}]\psi(x) = (\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial^n}{\partial x^n})\,\psi(x) - (\frac{\partial^n}{\partial x^n}\frac{\partial}{\partial x})\psi(x)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial^n \psi(x)}{\partial x^n}) - \frac{\partial^n}{\partial x^n}(\frac{\partial \psi(x)}{\partial x})$$

$$= \frac{\partial^{n+1}\psi(x)}{\partial x^{n+1}} - \frac{\partial^{n+1}\psi(x)}{\partial x^{n+1}}$$

$$= 0$$

The tow operators $\frac{\partial}{\partial x}$ and $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$ are not commute

Q3) Show that $\psi(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ is an eigen function of the operator $\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2$ and find the corresponding eigen value?

Solution:

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n \psi_n(x)$$

$$= (\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2)\, e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}(-x e^{-\frac{1}{2}x^2}) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= -e^{-\frac{1}{2}x^2} + x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= -e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$= -\psi_n(x)$

Since the function $\psi(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ remain unaltered under the operator, thus it is an eigen function of $\hat{A}$ and its corresponding eigen value is $a_n = -1$

Q4) Show that $[p_x, V(x)] = -i\hbar \dfrac{\partial V(x)}{\partial x}$

$$[p_x, V(x)] = (p_x V(x) - V(x) p_x)$$

$$[p_x, V(x)]\psi(x) = (p_x V(x) - V(x) p_x)\psi(x) \qquad \text{نضرب في } \psi(x)$$

$$= p_x V(x)\psi(x) - V(x) p_x \psi(x)$$

$$\because \quad p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(V(x)\,\psi(x)) - V(x)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi(x)$$

$$= -i\hbar V(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - i\hbar\psi(x) \frac{\partial V(x)}{\partial x} + i\hbar\, V(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

$$= -i\hbar \frac{\partial V(x)}{\partial x}\, \psi(x)$$

$$\therefore \quad [p_x, V(x)] = -i\hbar \frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

س 5) برهن ان المؤثر الهملتوني للجسيم الحر $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ هو مؤثر هرميتي

الجواب:

اذا كان $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ هرميتيا فسوف يحقق العلاقة:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \hat{A} \psi_m \; dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \, (\hat{A}\psi_n)^* \, dx$$

من الطرف الايسر

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, (\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}) \psi_m \; dx = \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, \frac{d^2\psi_m}{dx^2} \; dx$$

وباستخدام التكامل بالتجزئة نفرض ان

$$u = \psi_n \qquad ، \qquad dv = \frac{d^2\psi_m}{dx^2}\, dx$$

$$\Rightarrow \quad du = \frac{d\psi_n}{dx}\, dx \qquad ، \qquad v = \frac{d}{dx}\,\psi_m$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u\, dv = uv\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} v\, du$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m} \psi_n^* \frac{d}{dx} \psi_n^* + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} (\frac{d\psi_m}{dx}) \, (\frac{d\psi_n^*}{dx}) \; dx$$

وبما ان دالة الموجة محددة فان الحد الاول يتلاشى

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} (\frac{d\psi_m}{dx}) \, (\frac{d\psi_n^*}{dx}) \; dx$$

وبتطبيق التكامل بالتجزئة مرة ثانية

$$u = \frac{d\psi_n^*}{dx} \qquad ، \qquad dv = \frac{d\psi_m}{dx}\, dx$$

$$\Rightarrow \quad du = \frac{d^2\psi_n^*}{dx^2}\, dx \qquad ، \qquad v = \psi_m$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi_m \frac{d\psi_n^*}{dx}\Bigg|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m \; \frac{d^2\psi_n^*}{dx^2} \; dx$$

ومرة اخرى يتلاشى الحد الاول لنفس السبب السابق

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n^*}{dx^2}\right) \; dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}\right)^* \; dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m \, (\hat{H}\psi_n)^* \, dx$$

اذن المؤثر الهملتوني $\hat{H}$ للجسيم الحر هو مؤثر هرميتي

س 6) اثبت ان الدالة $\psi = Ae^{-\alpha x}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$ حيث ان A ، α ثوابت

الحل:

$$\hat{F}\psi = \frac{d^2}{dx^2}(Ae^{-\alpha x}) + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}(Ae^{-\alpha x}) + \frac{2\alpha}{x}(Ae^{-\alpha x})$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 Ae^{-\alpha x} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}(-\alpha Ae^{-\alpha x}) + \frac{2\alpha}{x}(Ae^{-\alpha x})$$

$$\hat{F}\psi = \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{x} + \frac{2\alpha}{x}\right) Ae^{-\alpha x}$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 Ae^{-\alpha x}$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 \psi$$

اي ان الدالة ψ هي دالة ذاتية وبقيمة ذاتية α^2

Q7) Verify the operator equation

1. $(\frac{d}{dy}-y)(\frac{d}{dy}+y)=\frac{d^2}{dy^2}-y^2+1$

2. $(\frac{d}{dy}+y)(\frac{d}{dy}-y)=\frac{d^2}{dy^2}-y^2-1$ ***H.W*** واجب بيتي

Solution:

1) $$(\frac{d}{dy}-y)(\frac{d}{dy}+y)\ \psi_n(y)$$

$$=(\frac{d}{dy}-y)\{(\frac{d}{dy}+y)\ \psi_n(y)\}$$

$$=(\frac{d}{dy}-y)\{\frac{d\psi_n(y)}{dy}+y\psi_n(y)\}$$

$$=\frac{d}{dy}\{\frac{d\psi_n(y)}{dy}+y\psi_n(y)\}-y\{\frac{d\psi_n(y)}{dy}+y\psi_n(y)\}$$

$$=\frac{d^2\psi_n(y)}{dy^2}+\frac{d}{dy}y\psi_n(y)-y\frac{d\psi_n(y)}{dy}-y^2\psi_n(y)$$

$$=\frac{d^2\psi_n(y)}{dy^2}+\psi_n(y)+y\frac{d\psi_n(y)}{dy}-y\frac{d\psi_n(y)}{dy}-y^2\psi_n(y)$$

$$\frac{d^2\psi_n(y)}{dy^2}-y^2\psi_n(y)+\psi_n(y)=(\frac{d^2}{dy^2}-y^2+1)\ \psi_n(y)$$

Since $\psi(y)$ is an arbitrary function of y, so we can write the operator equation as:

$$(\frac{d}{dy}-y)(\frac{d}{dy}+y)=\frac{d^2}{dy^2}-y^2+1$$ وهو المطلوب

Q8) Show that $[\hat{H}\ ,\ \hat{x}] = \frac{-i\hbar}{m}\hat{p}_x$

<u>Solution:</u>

$[\hat{H}\ ,\ \hat{x}] = \hat{H}\,\hat{x} - \hat{x}\,\hat{H}$ Where $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)$ and

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$[\hat{H}\ ,\ \hat{x}]\psi = (\hat{H}\,\hat{x} - \hat{x}\,\hat{H})\,\psi$ بالضرب في ψ

وبالتعويض عن قيمة $\hat{H}$

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

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 x\psi + V(x,y,z)\,x\psi + x\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - xV(x,y,z)\psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 x\psi + x\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$$

$$\nabla^2 x\psi = \nabla(\nabla x\,\psi)$$

$$= \nabla(x\nabla\psi + \psi)$$

$$= x\nabla^2\psi + \nabla\psi + \nabla\psi$$

$$= x\nabla^2\psi + 2\nabla\psi$$

$$= -x\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m}2\nabla\psi + x\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$$

$\left[\hat{H}\,,\,\hat{x}\right]\psi = -\frac{\hbar^2}{m}\nabla\psi$ وبحدف ψ من الطرفين

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