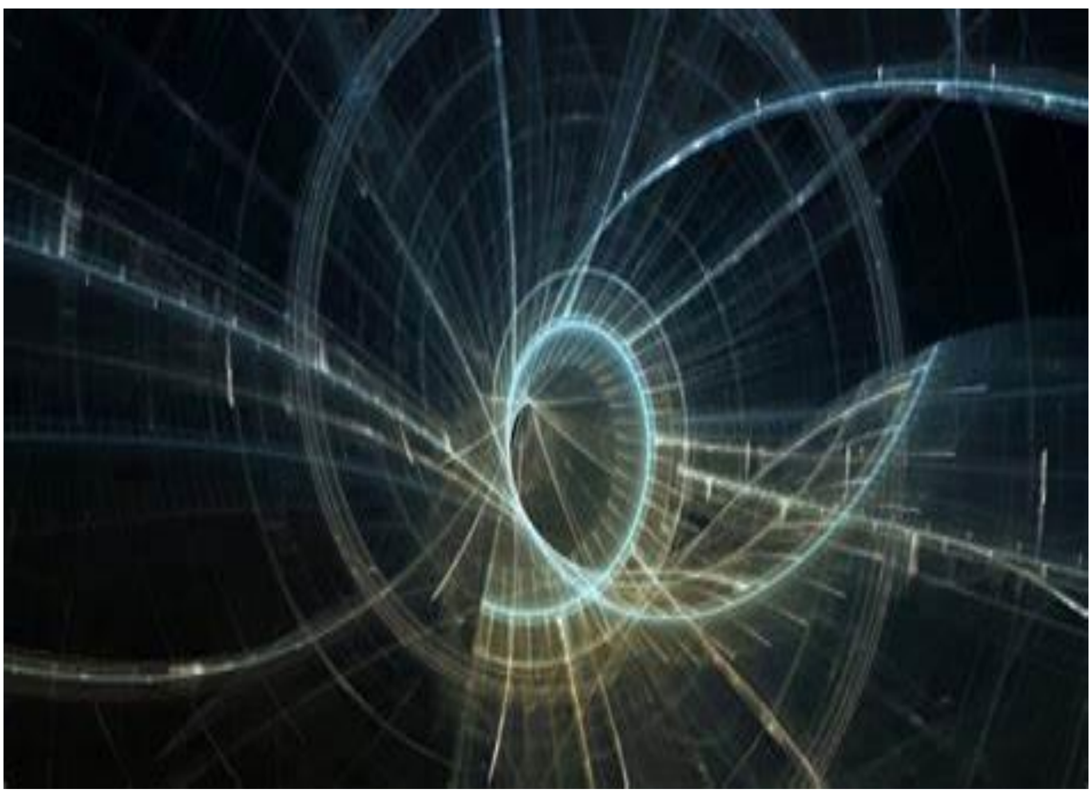
فيزياء الجوامد وتطبيقات نظرية الكم

للفرقة الرابعة عام- شعبة الطبيعة



د. حمدى توفيق & د. أسماء سيد

جامعة جنوب الوادي

2022-2023

فيزياء الجوامد

د. حمدى توفيق
جامعة جنوب الوادي

الباب الخامس

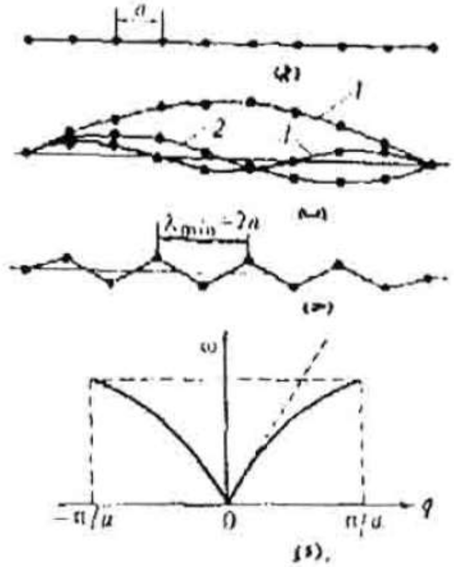
الخصائص الحرارية للجوامد

الباب الخامس
الخصائص الحرارية للجوامد
Thermal Properties of Solids

يتناول هذا الباب بالدراسة الخصائص الحرارية للجوامد ممثلة فى السـعة الحرارية للجوامد والتمدد الحراري والموصلية الحرارية. ونجد أنه من الأفضل ان نبدأ بعرض بعض الاساسيات.

(٥-١) تردد ديباى ودرجة حرارة ديباى
Debye frequency and Debye temperature

- لـذرات الجوامـد نصيب فى الاهتزازات الحرارية فى البلورة حـول مواضع اتزانها الأصلية و تنتقل الأهتزازات فى البلورتفى البـلورة علي هيئة موجة مرنة تتضمن كل الجسيمات المثارة فى البلورة. وتكون الموجات على شكل أمواج موقوفة ويوضح الشكل (١) نموذجـا أحـادي الأبعاد لسلسلة خطية من الذرات المسافات الفاصـلة بينها متساوية وتساوي a. وهي قادرة على الاهتزاز فى اتجـاه عمـودي عـلي طـول السلسلة (كما يحدث فى الاهتزاز المسـتعرض لوتر مشدود ثبت من نهايتيه). وكذلك الحال بالنسبة للسلسـلة فهـي مثبـتة الطرفين. المنحني 1 فى الشكل يوضح أن السلسـلة تهتز بأقل تردد زاوي ممكن ω_{min} وهو التردد الاساسي لموجـة موقوفـة، تتكون من عقدتين عند الطرفين وبطن بينهما. ويمـثل المنحني 2 موجة موقوفة تتميز بظهور عقدة إضافية عند مركز السلسلة وترددها ضعف التردد الأساسى.



الشكل (١)

- ويمـــثل المنحـــنى 3 موجة موقوفة تنقسم فيها السلسلة إلى ثلاثـــة أجـــزاء متساوية وترددها ثلاثة أمثال التردد الأساسي. وهكذا ويكون طول أقصر موجة فى مثل هذه السلسلة مساويا ضعف المسافة بين أى ذرتين فى السلسلة :

والنهاية العظمي للتردد المناظر ω_{max} هي :

$$\lambda_{min} = 2a \qquad (١)$$

حيث v سرعة انتشار الموجة علي طول السلسلة.

$$\omega_{max} = \frac{2\pi v}{\lambda_{min}} = \frac{\pi v}{a} \qquad (٢)$$

مثــــــــال:

إذا كـــانت $a=3.6\times10^{-10}m$ (بارامـــتر شبيكة النحاس) وإذا كانت ســـرعة الصوت فى النحاس $v=3550 \quad m/s$. احسب النهاية العظمي للتردد.

الحــــــــل:

$$\omega_{max} = \frac{\pi v}{a} = \frac{3.14\times3550}{3.6\times10^{-10}} = 3\times10^{13}\ \text{Hz}$$

وهى تـــناظر تـــردد الاهـــتزازات الذريـــة. وسنستعين فى وصف العمـــليات الموجيـــة بالمتجه الموجي q الذى ينطبق اتجاهه على اتجاه انتشار الموجة وقيمته هى :

$$q = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad (٣)$$

و نظرا لإن : فأن

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{\upsilon}$$

فإن:

$$q = \frac{\omega}{\upsilon}\ , \quad \omega = q\ v \qquad (٤)$$

يوضـــح المنحني 4 توقف الاهتزازات العادية فى سلسلة خطية تتكون من ذرات من نفس النوع على المتجه الموجي. ويتضح منه أنه بزيادة q من الصفر إلى π/a يزداد تردد الاهتزاز العادي حتى يصل إلى نهاية عظمي عند $w_{max} = \frac{\pi\upsilon}{a}$ أى عند $q = \frac{\pi}{a}$ $\lambda=2a$.

والمنحنيات التى من هذا النوع تسمي منحينات التفريق dispersion curves.

ويتعين الطول الموجي للاهتزازات العادية فى السلسلة الخطية فى أبسط حالاتها التى يمثلها المنحني أ من الشكل (٥) من العلاقة:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \qquad \text{حيث } (n=1,2,3,\dots N) \qquad (٥)$$

L, طول السلسلة ، N عدد ذراتها ويكون عدد الموقوفة Z والتى يكون طولها $\leq \lambda_n$ هو n.

$$Z = n = \frac{2L}{\lambda_n}$$

وبالمثل يكون عدد الأمواج الموقوفة فى بلورة ثلاثية الابعاد حجمها V $(=L^3)$ لبلورة مكعبة طول ضلعها L ويكون طولها الموجي $\leq \lambda$ هو :

$$Z = \left(\frac{2L}{\lambda}\right)^3 = \frac{8V}{\lambda^3}$$

وتؤدي الحسابات الدقيقة إلى ان

$$Z = \frac{4\pi V}{\lambda^3} \qquad (٦)$$

ونظرا لان $\lambda = \frac{2\pi \upsilon}{\omega}$ فإن :

$$Z = \frac{V}{2\pi^2 \upsilon^3}\omega^3 \qquad (٧)$$

وبالتفاضل نحصل على:

$$dz = g(\omega)\, d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 \upsilon^3}\omega^2\, d\omega \qquad (٨)$$

وتعبر العلاقة الأخيرة عن عدد الأمواج الموقوفة فى مدي التردد $(\omega, \omega + d\omega)$

وتعين الدالة $g(\omega)$ من العلاقة :

$$g(\omega) = \frac{dz}{d\omega} = \frac{3V}{2\pi^2 v^3}\omega^2 \qquad (٩)$$

وتدل على كثافة الاهتزازات العادية فى dw من الطيف.

ونظرا لأن عدد الاهتزازات العادية فى الشبيكة هو 3N (عدد درجات الحرية) فإن الدالة ستفى بشرط التسوية :

$$\int_{g}^{\omega_D} g(\omega)\, d\omega = 3N \qquad (١٠)$$

حيــث ω_D النهاية العظمي للتردد الذى يحد طيف الاهتزازات العادية. وباستخدام المعادلتين الأخيرتين معا والتكامل نحصل على :

$$\frac{V\,\omega_D^2}{2\pi^2 \upsilon^3} = 3N \qquad (١١)$$

لذلك يكون :

$$\omega_D = \upsilon\ (6\pi^2 \frac{N}{V})^{\frac{1}{3}} \qquad (١٢)$$

ويســمي الــتردد ω_D باسم تردد ديباي Debye frequency وتسمى درجة الحرارة

$$\theta = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \qquad (١٣)$$

باسم درجة حرارة ديباي

حيث $\hbar = \frac{h}{e\pi}$, h هو ثابت بلانك و k_B ثابت بولتزمان.

وعــند درجة حرارة ديباي لجامد تثار كل ترددات اهتزازات الطيــف فى هذا الجامد بما فيها تردد النهاية العظمي ω_D. وتبعا لذلك يكــون أى ارتفاع فى درجة الحرارة فوق درجة حرارة ديباي θ غير مصحوب بظهور اهتزازات جديدة وفى هذه الحالة يؤدي ارتفاع درجة

الحـــرارة إلى زيـــادة شـــدة كل من هيئات الاهتزاز مع زيادة متوسط الطاقة لها. ويمكن بالتعويض عن v^2 الحصول علي.

$$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^2} \qquad (١٤)$$

لدرجات حرارة $T > \theta$

(٥-٢) الفونونات Phonons

تحمل كل موجة موقوفة قدرا من الطاقة يساوي طاقة متذبذب تساوي كتلته كتلة الذرات المهتزة بنفس الترددات. وإذا أخذنا واحدة i مـــن هيـــئات الاهتزاز ترددها ω_i وطاقتها $E_{in,m}$ ، هذه الطاقة تساوى طاقة متذبذب $E_{in,0}$ تردده ω_i أيضا ، عندئذ تكون الطاقة الكلية للبلورة

$$E = \sum_{i}^{3N} E_{\mathrm{in,o}}$$

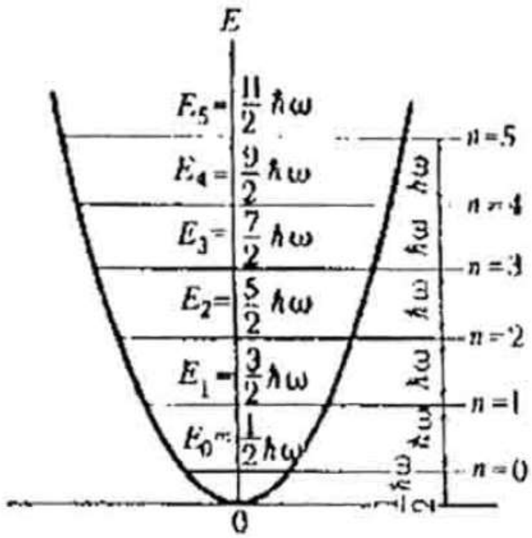
حيث 3N عدد درجات الحرية لعدد N من الذرات

وتعطي طاقة أى متذبذب كمي بالعلاقة :

$$\neq E_n = (n + \tfrac{1}{2})\, h\omega \qquad (١٥)$$

حيث ω تردد المتذبذب ، n عدد الكم.

ويوضـــح الشـــكل (٢) الطيف الطاقي لمتذبذب توافقي خطي. ويتكون كمـــا نـــري من مناسيب طاقة مميزة على فواصل متساوية من الطاقة $h\omega$. ونظرا لأن $E_{n,m} = E_{n,0}$ فإن العلاقة السابقة المعبرة عن الطاقة والطيف الطاقي سوف تتطابق مع ما هو موضح بالشكل (٢).



الشكل (٢)

وتناظر النهاية الصغري لجزء الطاقة الذى يمكن أن يمتص أو ينــبعث بواسطة الشبيكة فى عملية الاهزازات الحرارية انتقال هيئات **الاهتزاز من منسوب طاقة معين إلى المنسوب المجاور له ويساوي.**

$$\varepsilon_{ph} = \hbar\omega \qquad (١٦)$$

هــذا الجــزء أو الكــم من طاقة الاهتزازات الحرارية للشبيكة يسمي "الفونــون" Phonon وربمــا يســاعد التشابة التالي فى توضيح هذه الــنقطة. فالحيــز داخل جسم أسود ممتلىء باشعاع حراري فى حالة اتزان. حيث تتم معاملة هذا الاشعاع كغاز من الفونونات طاقتهــــا $\varepsilon = \hbar\omega = h\upsilon$ وكميــة $P = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{h}{\lambda}$ تحركه حيث c سرعة الضوء λ طوله الموجي.

ويمكــن معالجــة الأمواج المرنة فى البلورة بالمثل كغاز من الفونونات طاقتها $\varepsilon_{ph} = \hbar\,\omega = h\upsilon$ وكمية تحركها.

$$P_{Ph} = \frac{\hbar\omega}{v} = \frac{h}{\lambda} = \hbar q \qquad (١٧)$$

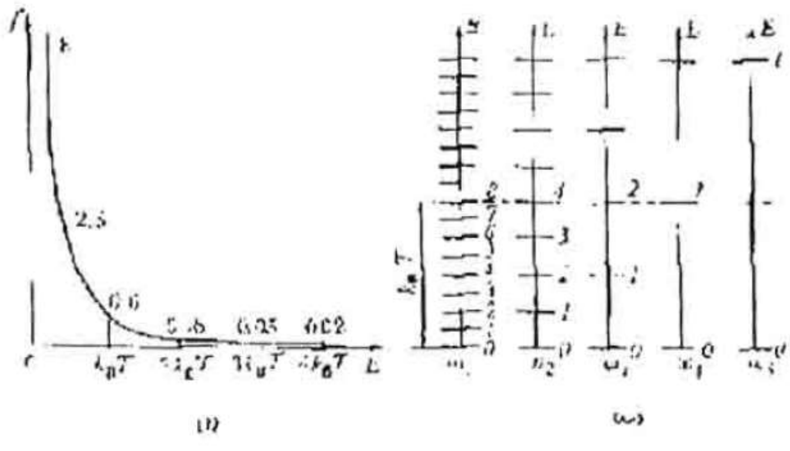
حيــث v سرعة الصوت ، λ الطول الموجي للموجة المرنة ، q المــتجه الموجي. وتوصف الفونونات كالفوتونات بدالة توزيع بوز -اينشتين Bose-Einstein distribution function.

$$F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon_{ph}/k_B T}} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T}}$$

ويــتوقف هــذا التوزيع على شدة إثارة هيئة الاهتزاز العادية لعــدد محــدد من الفونونات الذى يمكن إنبعاثه. وعند إثارتها أى إثارة هيئة الاهتزاز إلى المنسوب الثالث (الشكل (٧-أ) تصبح الطاقة

$$\varepsilon_3 = (n+\tfrac{1}{2})\,\hbar\,\omega$$

وهذا يعني تولد ثلاثات فونونات متماثلة طاقة كل منها $\hbar\,\omega$.



الشكل (٣)

ويوضـــح الشــكل (٣) العلاقة بين دالة التوزيع $f(E)$ وطاقة الفونونـــات. ونـــري أنــــه عند درجة حرارة معينة T فإن كل هيئات الاهـــتزاز فى الشـــبيكة حتى تلك التى تكون طاقتها $\hbar\omega \approx K_B\tau$ ستثار. وعندما تكون $\hbar w > K_B\tau$ لن تثار الفونونات التى تكون تردداتها أكبر. يتضـــح هـــذا فى الشـــكل (٣) وترمز الخطوط الافقية فى الشكل إلى أطياف طاقية تردداتها $\omega_1 = k_B T/8\hbar$ ،

$$\omega_5 = \frac{2k_B T}{\hbar}, \omega_4 = \frac{k_B T}{\hbar}, \omega_3 = \frac{k_B T}{2\hbar}, \omega_2 = \frac{k_B T}{4\hbar}$$

والمنسوب المناظر للمقدار $k_B T$ موضح فى الشكل بخط متقطع.

يـــترتب عـــلى ذلك أن تثار عند درجة حرارة معينة T هيئة الاهـــتزاز التى ترددها ω_1 إلى المنسوب الثامن . وهذا يعني أن ثمانية فونونـــات متمثـــلة طاقـــتها كل منها. $\hbar\omega_2 \frac{k_B T}{8}$ تثار إلى المنسوب الـــثامن . وبالمـــثل تـــثار أربعة فونونات متماثلة إلى المنسوب الرابع

تـــرجداتها تكون طاقتها $\frac{K_B T}{8}$ $\hbar\omega_1$ ويكون من النادر إثارة فونونات ثرواتها ω_5 عند الدرجة T لأن طاقة إثارتها $\hbar\omega$ عالية جداً.

(٥-٣) السعة الحرارية للجوامد Heat capacity of Solids

إن الطاقـــة الحرارية لجامد $E_{lattice}$ هى مجموع طاقات هيئات اهتزازه العادي. وكما سبق أن ذكرنا فإن عدد هيئات الاهتزاز العادى لكل مدي تردد $d\omega$ هو $g(\omega)\,d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 \upsilon^3}\,\omega^2 d\omega$

وبضرب هذا العدد فى الطاقة المتوسطة:

$E_{n.m}=\hbar\omega\ (e^{\hbar\omega}/k_B T\ -1)^{-1}$ لهيئة آهتزاز عادي ، نحصل على الطاقة الكلية للتردد ω فى مدي التردد $d\omega$.

$$dE_{lattice} = \overline{E}_{n.m}\ g(\omega)d\omega$$

وبـــتكامل هذه العلاقة مع وضع حدود التكامل من 0 إلى ω_D نحصل على طاقة الاهتزازات الحرارية لشبيكة جامد.

$$\overline{E}_{lattice} = \int_0^{\omega_D} \overline{E}_{n.m}\ g(\omega)d\omega \qquad (١٨)$$

والســـعة الحـــرارية عند حجم ثابت لجامد C_v هي التغير فى الطاقـــة الحـــرارية للجامد الناتج عن التغير فى درجة الحرارة بمقدار درجـــة واحدة. ولإيجادها نفاضل $E_{latteic}$ بالنسبة لدرجة الحرارة ، أى أن :

$$C_v = d\,\overline{E}_{lattice}/dT \qquad (١٩)$$

ولعـــل المشـــكلة الأساســـية هنا تتمثل فى توقف السعة الحرارية على درجة الحرارة.

فهـــناك مديان لدرجة الحرارة. المدي الأول لدرجات الحرارة أقـــل كـــثير من درجة حرارة ديباي $T<< \theta$ ويطلق على هذا المدي الأول لدرجـــات الحرارة اسم مدى درجة الحرارة المنخفضة. والمدي الثاني هو مدي درجات الحرارة الأعلى من درجة حرارة ديباي $T>\theta$ ويطلق عليه اسم مدي درجات الحرارة المرتفعة.

أولا : مدي درجات الحرارة المنخفضة :

فى هـــذا المـــدي تـــثار هيئات الاهتزاز العادي ذات الترددات المنخفضـــة الـــتى تكـــون طاقـــتها $\hbar\omega<k_BT$. ويمكن حساب الطاقة المتوســـطة للاهـــتزازات العاديـــة بفك مقام المعادلة السابقة والاكتفاء بحدين فقط لنحصل على :

$$\bar{E}_{n.m} = \hbar_{\omega}(e^{\hbar\omega/k_BT} - 1)^{-1} \approx \hbar\omega\,(1 + \frac{\hbar\omega}{k_BT} + ...-1)^{-1} \approx k_BT \qquad (٢٠)$$

ومن ثم تكون الطاقة المتوسطة فى مدي درجات الحرارة المنفضة لكل . أى أن :T هيئة إهتزاز عادي متناسبة طرديا مع درجة الحرارة

$$\bar{E}_{n.m}\ \alpha\, T \qquad (٢١)$$

ويرجع هذا القانون إلى زيادة احتمال الاثارة لكل هيئة اهتزاز عـــادي مع ارتفاع درجة الحرارة مما ينتج عنه زيادة الطاقة المتوسطة لها.

بالاضـــافة إلى هـــذا يســـبب ارتفاع درجة الحرارة فى مدي درجـــات الحرارة المنخفضة ترددات أعلي جديدة لهيئات اهتزاز عادة بسبب إثارتها. العدد التقريبى لها z يمكن حسابه بالاستعانة بالمعادلة.

$$dz = g(\omega)d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 \nu^3}\omega^2 d\omega \quad (٢٢)$$

فــإذا فرضنا أنه عند درجة حرارة T تثار كل هيئات الاهتزاز العادي حتى تلك التى يكون ترددها $\omega \approx k_B T/\hbar$ ، لنحصل على:

$$Z = \int_0^{k_B T/\hbar} g(\omega)d\omega \approx \int_0^{k_B T/\hbar} \omega d\omega_4 \alpha_2 T^3 \quad (٢٣)$$

ويــترتب عــلى هــذا أنه بارتفاع درجة الحرارة يتناسب عدد هيــئات الاهتزاز العادي تناسباً طرديا مع مكعب درجة الحرارة (T^3). ويعزي هذا إلى آليتين هما :

(١) الــزيادة فى الطاقة المتوسطة لكل هيئة اهتزاز عادي $E_{n.m}$ ترجع إلى زيادة احتمال إثارتها.

(٢) الزيادة فى عدد هيئات الاهتزاز العادي في الشبيكة.

الاحتمال الأول هو المسئول عن الزيادة فى الطاقة التى تتناسب مع T ويكون الثاني مسئولا عن التناسب مع T^3 ولهذا فإن التأثير الكلي ممثلا فى زيادة طاقة الشبيكة التى بمايتناسب مع T^4.

$$E_{lattice} \, \alpha \, T^4 \quad (٢٤)$$

وتكون الزيادة فى السعة الحرارية متناسبة مع T^3

$$C_v \, \alpha \, T^3 \quad (٢٥)$$

وهو قانون T^3 لديباي الذى يتفق مع النتائج التجريبية فى مدي درجات الحرارة المنخفضة.

ثانيا : مدي درجات الحرارة المرتفعة :

نعلم أن كل هيئات الاهتزاز العادي فى الشبيكة قد تمت إثارتها عــند درجــة حرارة ديباي ، لهذا فإن ارتفاع درجة الحرارة بعدئذ لا

يـــزيد هذا العدد. وأن التغير فى طاقة الجامد فى مدي درجات الحرارة المرتفعة يرجع إلى زيادة شدة هيئات الاهتزاز العادي. ويؤدي هذا إلى زيـــادة الطاقة المتوسطة $E_{n.m}$. ونظرا لأن $E_{n.m} \propto T$ فإن التغير فى طاقة الجسم ككل سيتناسب على T.

$$E_{lattice} \propto T \qquad (٢٦)$$

وسوف لا تتوقف السعة الحرارية على درجة الحرارة.

$$Cv = d\,E_{lattice} / d\,T = constant \qquad (٢٧)$$

وتعـــرف هذه العلاقة باسم قانون ديولنج دبيتى Dulong and Petit law الذى تم تجسيده بالتجربة.

ويمكـــن تجســيد القوانيـــن النوعية لتغير Cv مع T التى تم الحصـــول عليها بدراسة العمليات الفيزيائية فى الجوامد بحسابات كمية دقيقة. وعند هذا الحد نعود إلى المعادلة :

$$E_{lattice} = \int_0^{\omega_D} \bar{E}_{n.m}\, g(\omega)\, d\omega \qquad (٢٨)$$

ونحاول حساب طاقة الشبيكة كدالة فى درجة الحرارة بصورة اكثر دقة :

من المعادلة السابقة والمعادلتين :

$$E_{n.m} = \hbar\omega \left(e^{\hbar\omega / k_B T} - 1\right)^{-1}, \quad g(m) = q\,N \frac{\omega^2}{\omega_D^2} \qquad (٢٩)$$

وبادخال الكمية $x = \hbar\omega/k_B T$ نحصل علي

$$E_{lattice} = 9Nk_B\theta\left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

حيث θ درجة حرارة ديباي.

وسـنأخذ مـدي درجـات الحرارة المنخفضة ومدي درجات الحرارة المرتفعة كلا علي حدة.

- **مدي درجات الحرارة المنخفضة ($T<<\theta$)**

فى هـذا المدي نجعل حدود التكامل فى العلاقة الاخيرة من 0 إلى ∞ مع الأخذ فى الاعتبار أن

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{15}$$

نحصل على

$$(٣٠) \qquad \mathrm{E_{lattice}} = \frac{3\pi^4}{5} NR_B\theta (\frac{\mathrm{T}}{\theta})^4 \; \alpha \;\; \mathrm{T}^4$$

وبتفاضيل هذه العلاقة بالنسبة إلى T نحصل علي

$$(٣١) \qquad \mathrm{C_V} = \frac{12\pi^4}{5} NR_B (\frac{\mathrm{T}}{\theta})^3 \; \alpha \;\; \mathrm{T}^3$$

وهـنا نكون قد وصلنا إلى قانون T^3 لديباي منسجما مع تغير السـعة الحـرارية للشبيكة فى مدي درجات الحرارة المنخفضة حيث يكون التناسب مع مكعب درجة الحرارة

- **مدي درجات الحرارة المرتفعة :**

فى مثل هذا المدى من الدرجات تكون قيم x صغيرة ومن ثم يكون من الممكن حذف كل الحدود فيما عدا حدين ويكون مفكوك e^x هو

$$e^x = 1 + x + \ldots\ldots$$

وعندئذ يكون

$$(٣٢) \qquad \mathrm{E_{lattice}} = 9Nk_B\theta(\frac{1}{\theta})^4 \int_0^{\theta/T} x^2 d_x = 3\mathrm{N}k_B\mathrm{T}\alpha\,\mathrm{T}$$

وتكون السعة الحرارية للبلورة هي :

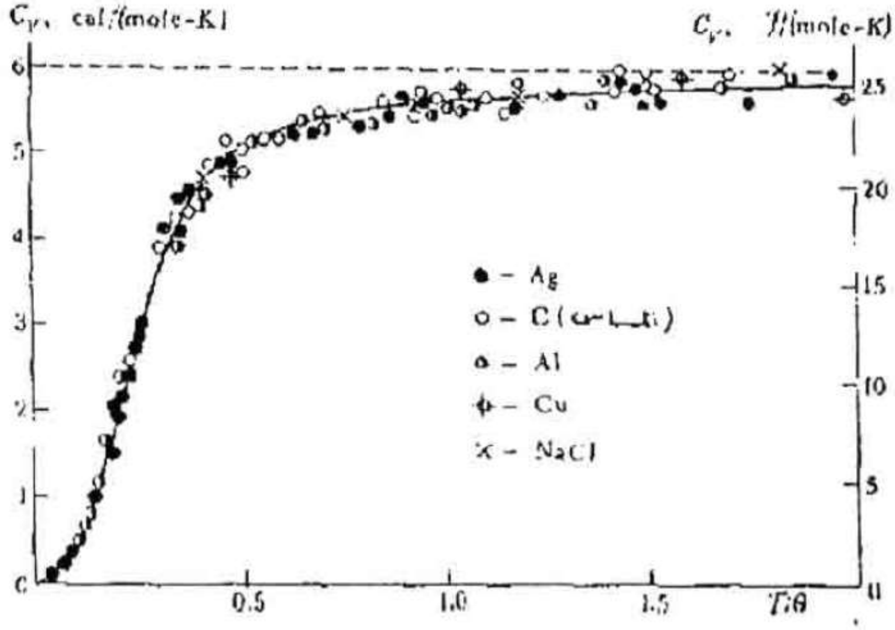
$$C_V = \frac{dE_{lattice}}{dT} = 3N\,k_B = \text{constant} \qquad (٣٣)$$

ولجــزى أحادي الذرة لمادة $N=N_A$ تساوي 6.023×10^{23} لكل مول (عــدد أفوجادور) ، $N_Ak_B=R$ حيث R الثابت العام للغازات ويساوي 8.31 جول / مول كلفن. ويكون :

$$C_V \approx 3R \approx 25\,J/(\text{mole - K}) \qquad (٣٤)$$

وتعــبر هــذه العلاقة عن قانون ديولنج وبيتي. ويوضح الخط المتصل فى الشكل ١ ، ٢ العلاقة النظرية بين السعة الحرارية للجوامد وبيــن درجــة الحــرارة. وتوضح النقط القيم العملية للفضة والماس والألومــنيوم والــنحاس والملح الصخري. ويبدو من الشكل أن هناك اتفاقا بين القيم التجريبية والنظرية سواء من الناحية النوعية أو الكمية. وبمعــرفة العلاقة بين درجة الحرارة وطاقة الشبيكة يمكن إيجاد تركيز غــاز الفونونــات وعلاقــته بدرجة الحرارة ، أى عدد الفونونات n_{ph} المــثارة فى وحدة الحجوم من البلورة. تركيز غاز الفونونات فى مدي درجــات الحــرارة المنخفضــة حيــث $E_{lattice}\ \alpha\ T^4$ وطاقة الفونون $\hbar\omega\approx k_BT\alpha T$ يجب أن تتناسب مع T^3 أى أن :

$$n_{ph}\ \alpha\ T^3 \qquad (٣٥)$$



الشكل (٤)

وفى مـــدى درجـــات الحـــرارة المرتفعة حيث $E_{lattice} \alpha T$ وأن طاقة الفونـــون تبلغ نهايتها العظمي $\hbar\omega_D \approx K_B\theta$ وهذه لا تتوقف على درجة الحرارة T. ويكون تركيز غاز الفونونات متناسباً مع T أى أن.

$$n_{ph} \, \alpha \, T \qquad (٣٦)$$

(٥-٤) السعة الحرارية للغاز الإلكترونى

تحـــتوى الفـــلزات بالإضافة إلى الأيونات التى تكون الشبيكة وتهـــتز حـــول مواضع اتزانها الأصلية ... أيضا على إلكترونات حرة عددها فى وحدة الحجوم يساوى تقريبا نفس عدد الأيونات.

لهذا السبب فإن الحرارة النوعية لفلز تساوى مجموع السعة الحرارية للشبيكة $C_{lattice}$ التى تم حسابها فى الفقرة السابقة والسعة الحرارية لغاز الإلكترونات C_v.

$$\therefore \quad C_v = C_{lattice} + C_e \qquad (٣٧)$$

وإذا كان الغاز الإلكترونى غازا غير منحل فإن الطاقة المتوسطة لكل الكترون تساوى $3k_BT/2$ وتكون طاقة الغاز الإلكترونى لكل مول من الفلز هى

$$E_o^{el} = N_A \frac{3}{2} k_B T = \frac{3}{2} RT \qquad (٣٨)$$

وتكون سعتها الحرارية هى

$$C_e^{el} = \frac{3}{2} N_A k_B = \frac{3}{2} R \qquad (٣٩)$$

وتكون السعة الحرارية الكلية للفلز فى مدى درجات الحرارة المرتفعة فى هذه الحالة

$$C_v = C_{lattice} + C_e^{el} = \frac{9}{2} R \approx 37 \text{ J/ mole. Kelvin}$$

(جول / مول . كلفن)

وتكون السعة الحرارية للفلزات كما هو الحال فى العازلات فى مدى درجات الحرارة المرتفعة حيث يكون قانون ديولونج وبيتى صالحا للتطبيق $c_v \approx 25$ J/mole-K

وهذا يبرهن على أن إسهام الغاز الإلكترونى يمكن إهماله.

وفى حالة الغز الإلكترونى المنحل الذى يوصف بإحصائيات الكم لفيرمى ديراك فإنه عند رفع درجة الحرارة لا تتأثر كل الإلكترونات الحرة فى ما عدا جزء يمكن إهماله ΔN التى تشغل

المناســيب الملاصقة أو القريبة من منسوب فيرمى الذى يثار حراريا.
هذا العدد من الإلكترونات يعطى بالعلاقة

$$\Delta N \approx \frac{N\ k_B T}{2E_F} \qquad (٤٠)$$

حيث E_F طاقة فيرمى.

•• للنحاس عند $E_F = 7ev$ ، $T = 300\ K$

تكون $\frac{\Delta N}{N} \approx 0.002$

أى أنها أقل من 1%

كــل الكــترون مثار حراريا يمتص طاقة مقدارها $k_B T$ لذلك تكــون الطاقــة الممتصـــة بواسطة الغاز الإلكترونى ككل هى حاصل ضرب $k_B T$ وعدد الإلكترونات المثارة حراريا ΔN

$$E_e \approx k_B T\ \Delta N \approx N\ k_B T\ \frac{k_B T}{2E_F} \qquad (٤١)$$

وتكون السعة الحرارية للغاز الإلكترونى هى

$$C_e = \frac{d\ E_e}{dT} \approx N k_B\ \frac{k_B T}{E_F} \qquad (٤٢)$$

وبالحسابات الدقيقة تكون

$$C_e \approx \pi^2 N k_B\ \frac{k_B T}{2E_F} \qquad (٤٣)$$

وبمقارنة C_e للغاز الإلكترونى المنحل ، C_e للغاز الإلكترونى غير المنحل

$$\frac{C_e}{C_e^{cl}} \approx \frac{\pi\ k_B T}{E_F} \qquad \frac{\text{للغاز المنحل}}{\text{للغاز غير المنحل}} \qquad (٤٤)$$

ويترتب على المعادلة الأخيرة أن النسبة لغاز الكترونى منحل وتلك لغاز إلكترونى أحادى الذرة غير منحل ... تساوى تقريبا. النسبة بين k_BT ، E_F

- **فى درجات الحرارة العالية تكون النسبة**

$$\pi\, k_BT / E_F \leq 1\%$$

لهذا تكون :

لغاز غير منحل $C_e^{el} \leq 0.01$ لغاز منحل (٤٤)

ومن ثم فإن حالة الانحلال للغاز الالكترونى فى الفلزات حتى فى درجات الحرارة المرتفعة تثار نسبة صغيرة من الإلكترونات الحرة **(أقــل مـــن 1%)** أمـــا بقيـــة الإلكترونات فلا تمتص حرارة وهذا هو السبب فى أن السعة الحرارية لفلز ككل تساوى عمليا السعة الحرارية للشبيكة ...

هذا الوضع مختلف تماما فى مدى درجات الحرارة المنخفضة القريبة من الصفر المطلق.

هــنا تــنخفض أو تقــل الســعة الحرارية بما يتناسب مع T^3 بالانخفاض فى درجة الحرارة

وهذا يوضح أن C_e التى تتناقص بدرجة أقل كثير من $C_{lattice}$ تصبح هى السائدة.

ويوضــح الشــكل (٥) علاقـــة درجة الحرارة لكل من مركبة السعة الحرارية للشبيكة وحركية السعة الحرارية الإلكترون لشـــبيكة (20% فانديوم، 80% كروم) ، درجة حرارة ديباى لها $\theta = 500K$

ويتضح من هذا الشكل أنه بالقرب من الصفر المطلق تكون السعة الحرارية لغاز إلكترونى أكبر كثيرا من تلك الشبيكة.

$(C_{lattice} < C_e)$

وتظل إشارة عدم المساواة كما هى حتى درجة الحرارة $T = 8.5\ k$

وعند $T > 8.5\ K$ تنعكس الإشارة

وعند $T = 25K$ تكون السعة الحرارية للشبيكة السابقة راجعة إلى السعة الحرارية للشبيكة (عند $T = 25K$) تكون السعة الحرارية $(C_{lattice} \approx 10\ C_e)$.

(٥-٥) التمدد الحرارى Thermal Expansion

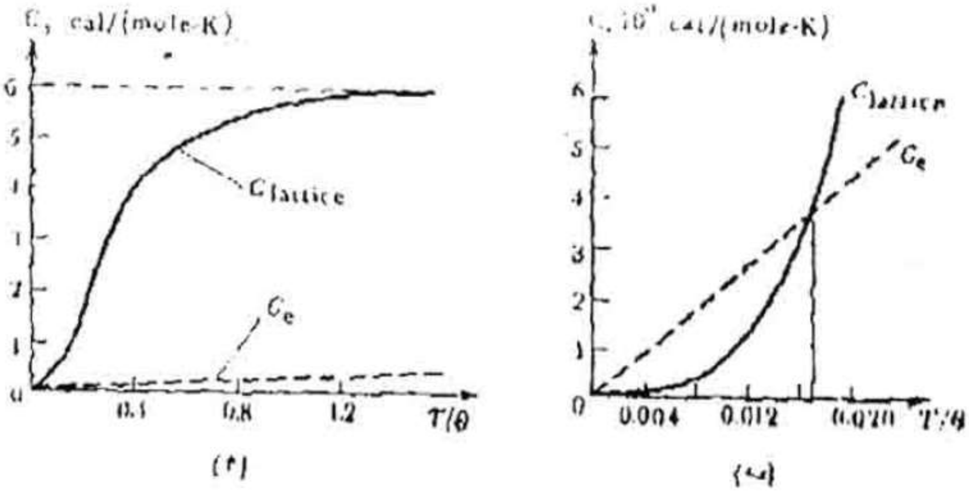
يمكن أن نفهم منشأ التمدد الحرارى بالأخذ فى الاعتبارات تأثير الحدود اللاتوافقية فى طاقة الوضع على المسافة الفاصلة بين زوج من الذرات عند درجة الحرارة T ولنأخذ طاقة الوضع للذرات عندما تكون الإزاحة x عن مسافات الإتزان عند OK كما يلى :

$$V_{(x)} = cx^2 - gx^3 - fx^4 \qquad (٤٥)$$

حيث يمثل الحد الذى يحتوى على x^3 عدم تماثل قوى التنافر المتبادلة للذرات يدل الحد الذى يحتوى على x^4 على الإرخاء العام بلأهتزازات عند السعات الكبيرة.

ونحسب متوسط الإزاحة باستخدام دالة توزيع بولتزمان التى تزن القيم الممكنة للازاحة x تبعا لاحتماليتها الثرموديناميكية.

$$\bar{X} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-V(x)/k_B T} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-V(x)/k_B T} dx} \qquad (٤٦)$$



الشكل (٥)

للإزاحة الصغيرة (طاقة لا توافقية منخفضة) نوجد مفكوك

الكميات المراد تكاملها.

$$\int xe^{-v/k_BT} d_x \cong \int_e^{-cx^2/K_BT} \left(x + \frac{gx^4}{k_BT} + \frac{f\chi^5}{k_BT}\right)dx \qquad (٤٦)$$

$$= \frac{g}{d_BT}\left(\frac{k_B}{C}\right)^{5/2} \frac{3\pi^{\frac{1}{2}}}{4}$$

$$\int_e - {v}/{k_BT}\, dx \cong \int_e - {cx^2}/{k_bT}\, dx = \left(\frac{\Pi k_bT}{c}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (٤٧)$$

وهكذا يكون

$$\overline{X} = \frac{3k_BTg}{4C^2} \qquad (٤٨)$$

مما يؤدى إلى قيمة ثابتة للمعامل الحرارى للتمدد الحرارى.

(٥-٦) الموصلية الحرارية للجوامد

Thermal conductivity of solids

(١) الموصلية الحرارية للعازلات (الموصلية الحرارية للشبكية):

Heat conductivity of dielectries (lattice heat conductivity)

تعـــد المقاومة الحرارية للجوامد أحد نواتج الطبيعة اللاتوافقية لاهـــتزازات ذراتهـــا. إذ لا توجـــد مـــثل هـــذه المقاومة عندما تنتقل الإهتزازات الذرية فى الشبيكة على هيئة أمواج مرنة لا تبادلية التأثير وكـــانت هـــذه الاهتزازات توافقية تماما. ففى حالة عدم وجود التأثير المتـــبادل، يمكـــن أن تنـــتقل الأمواج دون استطارة أي دون أن تلقى مقاومة. وعندما يوجد فرق فى درجتى حرارة طرفى مثل هذه البلورة، تهـــتز الـــذرات عند الطرف الساخن بسعات كبيرة وتنتقل طاقتها إلى الـــذرات المجاورة، وينتقل صدر الموجة الحرارية فى البلورة بسرعة تســـاوى ســـرعة الصوت . وعندما لا تلقى الموجة الحرارية مقاومة يكـــون الفيض الحرارى ملحوظا حتى مع وجود فرق ضئيل فى درجة الحرارة ويكون التوصيل الحرارى متعاظما إلى مالا نهاية .

وتكـــون طـــبيعة الاهتزازات الذرية فى البلورات الحقيقية فى درجـــات حـــرارة غيـــر منخفضة كثيرا لا توافقية كما يوضحها الحد الثانى فى المعادلة

$$U(x) = \beta\, x^2/_2 \quad - g\, x^3/_3 \qquad (٤٩)$$

وتدمر اللاتوافقية استقلالية أنماط اهتزازات الشبيكة مما يسبب حـــدوث تأثيـــر متـــبادل بينهما من ناحية وتبادل الطاقة وتغيير اتجاه انتشـــارها (مـــن خـــلال الاستطارة المتبادلة) من ناحية أخرى. وتتيح عمـــليات الـــتأثير المتبادل بين الأمواج المرنة انتقال الطاقة من أنماط ذات تردد معين لأنماط ذات تردد آخر ، كما تجعل من الممكن ترسيخ حالة الاتزان الحراري للبلورة.

ويمكن وصف عملية الاستطارة المبتادلة للأنماط السوية بدلالة الفونونـــات ، حيـــث يمكن النظر إلى البلورة المثارة حراريا كصندوق يحـــتوي على فونونات. وفى حالة التقريب التوافقي الذى يفترض فيه اســتقلالية الأنماط السوية ، تكون الفونونات بمثابة غاز مثالى (غاز لا يوجد تأثير متبادل بين فونوناته). ويعد الانتقال إلى الانماط اللاتوافقية مكافــئا لادخال التأثير المتبادل بين الفونونات ، الذى يؤدى إلى انقسام الفونـــون إلى فونونيـــن أو أكثر أو تكوين فونون من اتحاد فونونين أو أكـــثر. مثل هذه العملية تسمي استطارة الفونون. وتتميز احتماليتها كما فى كـــل عمليات الاستطارة بالمقطع العرضى الفعال للاستطارة σ_{ph} . وإذا كان الفونون من وجهة نظر عمليات الاستطارة بمثابة كره نصف قطرها r_{ph} ، فإن :

$$\sigma_{ph} = \pi r^2_{ph} \qquad (٥٠)$$

ويمكـــن لاســـتطارة الفونـــون – فونـــون أن يحـــدث فقط إذا اقتربت الفونونات لمسافة تسمح للمقاطع العرضية الفعالة للاستطارة بالتراكب. ونظـــر لأن الاســـتطارة ترجع إلى لاتوافقية الاهتزازات الذرية ، فإنه يمكـــن وصفها عدديا بمعامل اللاتوافقية g. وعندئذ يكون من الطبيعى افـــتراض أن نصـــف قطـــر المقطع العرضى الفعال للفونون يتناسب طرديا مع g ويكون $\sigma_{ph} \propto g^2$

وبمعـــرفة المقطـــع العرضـــى الفعال للاستطارة σ^{ph} ، يمكن حساب متوســـط المسار الحر λ_{ph} للفونونات ، أى متوسط المسافة التى تنتقل فيها الفونونات بين أى استطارتين متتاليتين وتوضح الحسابات أن.

$$\lambda_{ph} = \frac{1}{n_{ph}\ \sigma_{ph}} \alpha \frac{1}{n_{ph}\ g^2}$$

(٥١)

حيث n_{ph} تركيز الفونونات

ومن نظرية الحركة للغازات نعلم أن الموصلية الحرارية

(٥٢) $K = \lambda\ v\ C_V/3$

حيــث λ متوسط المسار الحر للجزئيات ، v سرعتها الحرارية ، C_v الحرارة النوعية للغاز تحت حجم ثابت.

وبتطــبيق هذه العلاقة على الغاز الفونوني مع التعويض وعن C_v بالحــرارة الــنوعية للبلورة (الغاز الفونوني) وعن λ بالرمز λ_{ph} **وهــو متوســط** المسار الحر للفونونات ، وعن v بسرعة الصوت فى البــلورة (ســرعة الفونونـــات) ، عندئذ نحصل على علاقة تعبر عن الموصلية الحرارية للشبيكة :

(٥٣) $K_{lattice} = v\ \lambda_{ph}\ Cv/3$

وبالــتعويض عن λ_{ph} من المعادلة (3) (5-51) فى المعادلة (٥-٥٣) ينتج أن

(٥٤) $K_{lattice}\ \alpha\ \ v\ C_v/n_{ph}\ g^2$

وفـــي مدى درجات الحرارة المرتفعة ، تمشيا من العلاقة $n_{ph}\ \ \alpha\ \ T$ ، نجد أن :

(٥٥) $K_{lattice}\ \alpha\ \ v\ C_v/Tg^2$

ونظــرا لأن Cv فى هــذا المدي لا تتوقف عمليا على درجة الحــرارة ، فإن الموصلية الحرارية للشبيكة ستتناسب عكسيا مع درجة الحــرارة المطلقة ، بما يتفق مع النتائج التجريبية. وتتضمن العلاقــة

(٥٥) أيضـــا معـــامل اللاتوافقية g وسرعة الصوت v ، وهما يتوقفان عـــلى جســـاءة الـــروابط بين جسيمات الجامد. وتناظر الراوبط ذات الجســـاءة المنخفضة سرعات منخفضة ومعاملات لا توافقية مرتفعة إذ أن إضـــعاف الـــروابط يـــؤدي إلى زيادة سعات الاهتزازات الحرارية (عـــند درجـــة حرارة معينة) ، وإلى زيادة اللاتوافقية. وتؤدي كل تلك العوامـــل تـــبعا للعلاقة (٥-٥٥) إلى نقص فى قيمة $K_{lattice}$. وهو ما تدعمـــه التجربة. ويوضح الجدول التالي قيم حرارة التسامي Q_S التى تعـــد قياســـا لطاقـــة الـــترابط ، وللموصلية الحرارية للشبيكة $K_{lattice}$.لبعض البلورات التساهمية الترابط التى لها شبيكة معينة الشكل : الماس والسليكون والجرمانيوم.

الجدول

المـــــادة	$Q_s \times 10^5$(جول/مول)	$K_{latteci}$(واط /متر -كلفن)
الماس	71.23	550
السليكون	46.09	137
الجرمانيوم	37.0	54

نلاحـــظ فى هذا الجدول أن نقص طاقة الرابطة من قيمتها للماس إلى قيمـــتها للســـليكون ثـــم الجـــرمانيوم يكون مصحوبا بنقص الموصلية الحرارية للشبيكة.

ويوضـــح التحـــليل التفصيلى أن $K_{lattice}$ تتوقف بشدة على الكتلة M للجســـيمات حيث تقل بزيادة M. وهذا يوضح إلى حد كبير لماذا تكون الموصلية الحرارية للشبيكة للعناصر الخفيفة التى تشغل الجزء الأعلى من الجدول الدورى لمندليف (البورون، الكربون والسليكون) فى حدود عـــدة عشرات أو حتى عدة مئات (واط/متر-كلفن). فى حين أن القيم

المـــناظرة للعناصـــر التى تشغل الجزء الأوسط من جدول مندليف لا تـــزيد عن بضعة واطات لكل (متر –كلفن) وأن القيم المناظرة للعناصر الـــتى تشغل الجزء السفلي من الجدول لا تتجاوز أجزاء من عشرة من الواط لكل متر لكل كلفن.

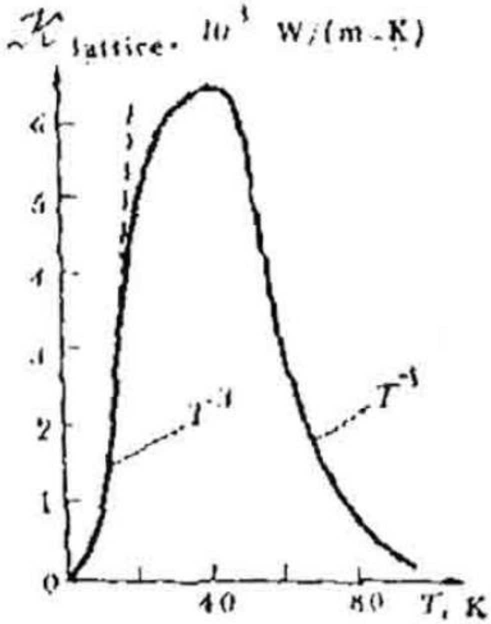
وثمـــة مظهر يثير الدهشة هو أن الموصلية الحرارية للشبيكة فى البـــلورات ذات الجســـيمات الخفيفة والروابط الجاسئة تكون عالية جداً. ولهذا تكون الموصلية الحرارية لشبيكة الماس أكبر من الموصلية الحرارية الكلية لأحسن الفلزات توصيلا للحرارة ، الفضة $K_{Ag}=407$ واط/ (م–كلفن) ، وذلك عند درجة حرارة الغرفة.

وعـــند درجـــات حـــرارة أقـــل من درجة حرارة ديباي يوجد انخفـــاض حـــاد في تركيز الفونونات مع انخفاض درجة الحرارة مما يـــؤدي إلى زيادة حادة فى متوســـط المسار الحر لها ، بحيث أنه عند $T\leq \theta/_{20}$ يصـــل متوســـط المســـار الحر إلى حد يمكن مقارنته بأبعاد البلورة. ونظراً لأن سطح البلورة يعد بمثابة عاكس ردىء للفونونات ، فإن أى مزيد من الانخفاض فى درجة الحرارة لن يؤدي إلى أى زيادة فى λ_{ph} ، لانه يتعين فقط بأبعاد الشبيكة.

وتتعين علاقة الموصلية الحرارية للشبيكة بدرجة الحرارة فى هـــذا المدي من درجات الحرارة من خلال علاقة الحرارة النوعية Cv بدرجة الحرارة.

ونظـــرا لأن $Cv\alpha\ T^3$ فى مدي درجات الحرارة المنخفضة ، فإن $K_{lattice}$ سوف تتناسب طرديا مع T^3

$$K_{lattice} \propto T^3 \qquad (٥٦)$$



الشكل (٦)

وهى نتيجة تتفق أيضا مع التجربة ويوضح الشكل (٦) علاقة الموصلية الحرارية لـلياقوت الأزرق الصناعي فى مدي درجات الحرارة المنخفضة تتناسب $K_{lattice}$ مثلا مع T^3.

عندما ترتفع درجة الحرارة يزداد تركيز الفونونات n_{ph} وتزداد $K_{lattice}$ ومع ذلك فإن أى زيادة فى n_{ph} تكون مصحوبة بزيادة استطارة الفونونات -فونونات وكنتيجة لذلك يحدث نقص فى متوسط المسار الحر للفونونات λ_{ph} يؤدي بدوره إلى نقص $K_{lattice}$. وعندما يكون تركيز الفونونات n_{ph} منخفضا يكون العامل الأول هو السائد وبالتالي تزداد $K_{lattice}$ مع ارتفاع درجة الحرارة T. ومع ذلك ، ومع

الـــبدء بـــتركيزمعين لـــلفونونات معين يصبح العامل الثاني هو الأكثر أهمية وبالتالى فإنه بعد وصول $K_{lattice}$ إلى نهاية عظمي تأخذ $K_{lattice}$ فى الانخفـــاض مـــع الاستمرار فى ارتفاع درجة الحرارة. هذا النقص فى الموصـــلية الحـــرارية للشبيكة فى مدي درجات الحرارة المرتفعة يتناسب تقريباً مع $\frac{1}{T}$.

وفى حالـــة العـــازلات الأمورفية ، حيث يكون لحجم المناطق ذات الـــتركيب المنـــتظم نفـــس رتبة المسافات بين الذرية ، لا تختلف الصـــورة كثيراً. فالفونونات المستطارة عند حدود هذه المناطق ستكون هي العامل السائد فى جميع درجات الحرارة ولهذا لن يتوقف λ_{ph} علي درجـــة الحرارة T. وكنتيجة لذلك ، ستناسب الموصلية الحرارية لمثل هذه العازلات الأمورفية مع T^3 فى مدي درجات المنخفضة ، لكنها لا تـــتوقف علي T فى مدي درجات الحرارة المرتفعة. وهو ما نلاحظه من النتائج التجريبية.

ومـــع ذلـــك ، تظل النظرية حاليا قاصرة عن التنبؤ ليس فقط بالقيم الفعلية للموصلية الحرارية للشبيكة بل وحتى رتبتها.

(٢) الموصلية الحرارية للفلزات:

Heat conducturty in metals

تنـــتقل الحـــرارة فى الفلزات – علي خلاف العازلات – ليس فقـــط بالفونونـــات بـــل و بالالكـــترونات أيضا. لهذا تكون الموصيلية الحـــرارية بالفونونـــات الحـــرارية للفـــلزات هى مجموع. الموصلية الحرارية للشبيكة $K_{lattice}$ (الموصلية بالفونونات) والموصلية الحرارية الالكترونية K_e (بالالكترونات الحرة) :

$$K = K_{lattice} + K_e \qquad (٥٧)$$

ويمكــن حساب الموصلية الحرارية لغاز الكتروني ، K_e ، بالاستعانة **بالعلاقــة (٥٢) . بالــتعويض فى هــذه العلاقة بالحرارة النوعية لغاز** الكــتروني ، (Ce) ، وســرعة الالكترونات عند سطح فيرمى V_F ، **ومتوسط المسار الحر لها** λ_e **، نحصل علي :**

$$K_e = C_e\, v_F\, \lambda_e/3 \qquad (٥٨)$$

وبالتعويض عن C_e بما تساوية $[C_e \approx \pi^2 Nk_B \frac{k_B T}{2E_F}]$ نحصل على

$$Ke = \text{Constand} \qquad (٥٩)$$

وســنحاول فيمــا يــلى إيجاد العلاقة بين الموصلية الحرارية **للفلزات النقية وبين درجة الحرارة.**

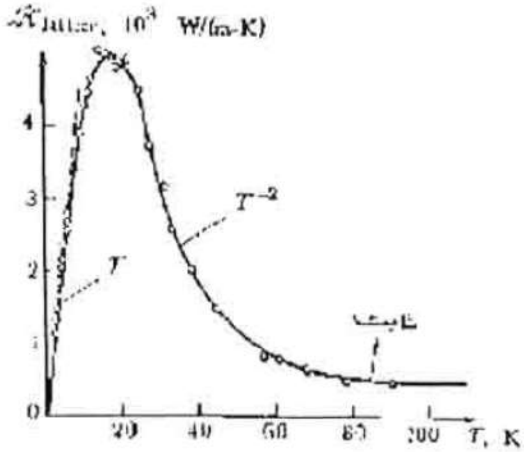
- **مدي درجات الحرارة المرتفعة.**

عمــليا ، ممــن كل الكميات التى يتضمنها الطرف الايمن من العلاقــة رقم (٥-٥٨) ، تتوقف λ_e فقط على درجة الحرارة T ، وفى الفــلزات النقية وعند درجات حرارة ليست منخفضة جداً ، تتعين λe بواســطة اســتطارة الالكــترون – فونون ، مع تساوي كل الظروف الأخرى ، تتناسب λ_e عكسيا مع تركيز الفونونات : $\lambda_e \,\alpha\, \frac{1}{n_{ph}}$

وفى مدي درجات الحرارة المرتفعة فإن $n_{ph} \,\alpha\, T$

وبالتعويض بهذا فى العلاقة (٥٨) نجد أن

$$K_e = \text{constant} \qquad (٦٠)$$



الشكل (٧)

لهــذا لا تــتوقف الموصلية الحرارية للفلزات النقية فى مدي درجــات الحرارة المرتفعة على درجة الحرارة. وهذه حقيقة تجريبية. ويوضح الشكل (٧) المنحني التجريبي الذى يصف توقف K للنحاس عــلى درجة الحرارة. ومنه نتبين أن الموصلية الحرارية للنحاس فوق 80-100 كلفن لا تتوقف. عملياً على درجة الحرارة.

مدى درجات الحرارة المنخفضة:

يصــبح تركيــز الفونونات فى فلز ما بالقرب من صفر كلفن صــغيراً إلى الحــد الــذى يــرجع فيــه الجزء الرئيسى من عمليات الاســتطارة الالكترونية إلى ذرات الشوائب ، الموجودة فى الفلز بعض النظر عن درجة نقاوته.

فى هذه الحالة فإن متوسط المسار الحر الالكتروني $\lambda_e \alpha \frac{1}{N^i}$

(N_i تركيــز ذرات الشوائب) ، لا يلبث أن يتوقف على درجة الحرارة وتصبح الموصلية الحرارية لفلز متناسبة مع درجة الحرارة.

$$K_e \, \alpha \, T \qquad (٦١)$$

وهذه حقيقة تجريبية.

وسـنحاول باسـتخدام المعادلـة (٧) حساب قيمة K_e لبعض الفلزات. للفلزات النموذجية:

$$C_e \approx 0.01 \; Cv \approx 3 \times 10^4 \; J/(m^3\text{-}K)$$

$$v_F \approx 10^6 \; m/s \; , \; \lambda_e \approx 10^{-8} \; m$$

بالتعويض فى المعادلة (٥٧) نحصل علي K_e حيث تكون :

$$K_e \approx 10^2 \; W \,/\, (m\text{-}k)$$

لهـذا ، تبـلغ K_e للفلزات عدة مئات واط لكل متر لكل كلفن. وهو ما تجسـده النـتائج التجريبية ويوضح الجدول التالي الموصلية الحرارية لـبعض الفـلزات مقاسـة عـند درجة حرارة الغرفة وكذلك لاحدي السبائك، و(الكونستانتان) التى تتكون من60% نحاس و 40% نيكل .

<u>الجـــدول</u>

الفلز	K|w/(m-k)|	الفلز	K|w/(m-k)|
الفضة	403	الألومنيوم	210
النحاس	384	النيكل	60
الذهب	296	الكونستانتان	23

وسـنحاول فيمـا يـلى حسـاب مقدار ما تسهم به الموصلية الحرارية لفلز باستخدام العلاقتين (٥٣) و (٥٦).

$$\frac{K_{lattice}}{K_e} = \frac{C_v v \, \lambda_{ph}}{C_e v_F \lambda_e} \qquad (٦٢)$$

حيث v سرعة الفونون (سرعة الصوت) للفلزات النقية $0.01 \approx {}^{C_e}/_{C_v}$
$v=5\times10^3 m/S$ ، $\lambda_{ph}\approx10^{-9} m$ ، $v_F\approx10^6 m/s$ ، $\lambda_e\approx10^{-8} m$ ،
عندئذ تكون :

$$\frac{K_{lattice}}{K_e} = 5\times10^{-2}$$

ممـــا سبق نتبين أن الموصلية الحرارية للفلزات النموذجية ترجع كلية إلى الموصلية الحرارية لغازها الالكتروني ، إذ أن الموصلية الحرارية للشبيكة لا تسهم بأكثر من نسبة مئوية ضئيلة.

ومـــع هــذا ، تختلف الصورة كثيراً إذا انتقلنا من الفلزات إلى الســبائك الفــلزية ، حيــث تكون الاستطارة بذرات الشوائب هي آلية الاســتطارة الرئيســية. ويتناسب متوسط المسار الحر للالكترونات في هذه الحالة تناسبا عكسيا مع تركيز الشوائب ($\lambda_e \alpha \ {}^{1}/_{N_i}$) ، ولتركيزات شوائب عالية قد يصبح متوسط المسار الحر للالكترون مساويا متوسط المســار الحر للفونونات ($\lambda_{ph} \approx \lambda_e$). وفي مثل هذه الحالة عادة تكون الموصــلية الحــرارية الالكــترونية مساويا تقريباً الموصلية الحرارية للشــبيكة ، $Ke \approx K_{lattice}$ وهو ما تؤكده التجربة. ويتضح من الجدول الســابق أن الموصلية الحرارية للكونستانتان أقل كثيراً من تلك للنيكل أو النحاس. وهذا يؤكد أن استطارة الالكترونات فى الكونستانتان ترجع بالدرجة الأولى إلى عيوب الشبيكة الناتجة عن ذرات الشوائب.

أسئلة وتمارين:

١- أ) مستعينا بالرسم وضح هيئات الاهتزاز العادى فى الشبيكة واستنتج قيمة النهاية العظمى للتردد الزاوى.

ب) إذا كان بارامترا شبيكة النحاس هو 3.6×10^{-10} مترا وسرعة الصوت فيه هى 3550 م/ث احسب النهاية العظمى للتردد الزاوى .

٢ - بين كيف تستنتج علاقة تستخدم لتعيين تردد ديباى .

٣ - اشرح المقصود بالفونونات.

٤ - ما هى السعة الحرارية للجوامد موضحاً كيف أن متوسط طاقة كل هيئة من هيئات الاهتزاز العادى تتناسب طردياً مع درجة الحرارة T فى مدى درجات الحرارة المنخفضة.

٥ - استنتج قانون T^3 لديباى وذلك فى مدى درجات الحرارة المنخفضة .

٦ - استنتج قانون ديولنج وبتى الذى يعبر عن السعة الحرارية لجامد فى مدى درجات الحرارة المرتفعة.

٧ - اشرح بإيجاز السعة الحرارية لغاز الكترونى.

٨ - اشرح كيف يمكنك تفسير التمدد الحرارى للجوامد.

٩ - استنتج علاقة للموصلية للحرارية لشبيكة :

أ) فى مدى درجات الحرارة المنخفضة.

ب) فى مدى درجات الحرارة المرتفعة.

١٠- مستعينا برسم بيانى مناسب أوجد الموصلية الحرارية للفلزت.

أ) فى مدى درجات الحرارة المرتفعة.

ب) فى مدى درجات الحرارية المنخفضة.

٦) استنتج تعبيرا للكتلة الفعالة للإلكترون فى شبيكة بلورية .

٧) بيـــن كيـــف أن منسوب طاقة فيرمى يتوسط المسافة الفاصلة التى تمثل المنطقة الممنوعة أو الفراغ الطاقى فيما بين قمة التكافؤ وقاع منطقة التوصيل .

٨) اثبت أنه فى شبيكة بلورية بسيطة مربعة (ذات بعدين) تكوين طاقة الإلكـــترون حـــر عـــند أحد أركان منطقة بريلوا الأولى أكبر من نظيرتها عند منتصف الوجه لهذه المنطقة بمقدار الضعف

٩) مـــاذا تكون عليه قيمة النسبة السابقة فى حالة شبيكة بسيطة مكعبة (ثلاثية الأبعاد)

١٠) بيـــن كيـــف يتغير موضع منسوب فيرمى فى شبه موصل سالب بارتفاع درجة حرارته.

الباب الرابع

الموصلية الكهربية للجوامد

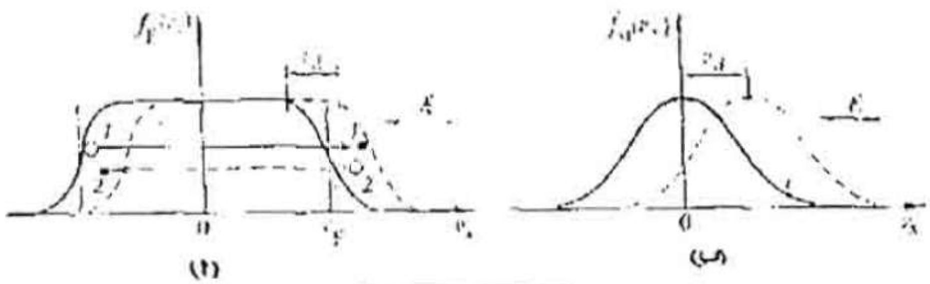
الباب الرابع

الموصلية الكهربيـــــة للجــــوامد

Electrical conducturty of solides

(٤-١) حالــة إتزان الغاز الإلكترونى فى موصل فى حالة عدم وجود مجال كهربى :

يكـــون الغـــاز الإلكترونى فى موصل فى حالة عدم وجود مجال كهربى فى حالة إتزان ، يمكن وصفها بدوال التوزيع فى الغاز المنحل تكون الدالة المناسبة هى دالة توزيع فيرمى كما فى الشكل (١أ) ولغاز



الشكل (١)

غيـــر منحل دالة توزيع ماكسويل – بولتزمان كما فى الشكل (١ ب) أونرى من الشكل (١) أن الرسوم التخطيطية لتلك الدوال تكون متماثلة حول المحور الرأسى ويشير هذا إلى حقيقة أن عدد الإلكترونات حول المحور فى موصل ما فى اتجاهين متضادين تكون دائماً متساوية وأن ســـرعتها المتوســـطة الـــتى تتحرك بها فى أى اتجاه تساوى صفر . يفســـر هذا عدم وجود تيار كهربى فى الموصل (فى حالة عدم وجود المجال) بغض النظر عن عدد الإلكترونات الحرة الذى يحتويها .

ويتم الحصول على حالة إتزان الغاز الإلكترونى كنتيجة للتأثير المتبادل بين هذه الإلكترونات وعيوب الشبيكة ، أن هذا التأثير المتبادل يكـــون مصـــحوباً بتغيرات فى الطاقة وكمية التحرك وتشتمل مثل هذه العيـــوب الاهتزازات الحرارية للشبيكة (الفونونات) ، عيوب الشبيكة وذرات الشـــوائب . ويظهـــر هـــذا الـــتأثير المتـــبادل فى اســـتطارة الإلكترونات فى حركتها العشوائية فى الموصل

(٤ – ٢) انزياح الإلكترون فى مجال كهربى

عـــندما يؤثـــر مجـــال كهربى ε على موصل يتولد تيار كهربى كثافته تبعاً لقانون أوم هى :

$$J = \sigma \varepsilon \qquad (١)$$

☆ عـــامل التناســـب σ يسمى التوصيل النوعى للموصل أو الموصلية .

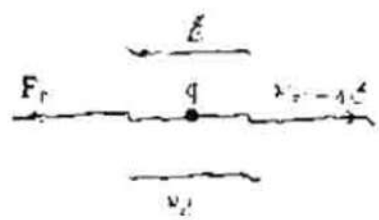
وابعادها هى : أوم$^{-١}$. سم$^{-١}$ أو أوم$^{-١}$. م$^{-١}$ أو **سيمون م$^{-١}$**

وتكـــون الموصـــلية الكهـــربية للموصلات الجيدة فى حدود $\sigma = 10^{7}$ - $10^{8}\ \Omega^{-1} .\ m^{-1}$ فى حيـــن σ لـــلعازلات الجيـــدة= $10^{-13}\ 10^{-14}$ أوم$^{-١}$.م$^{-١}$ ويكون من المناسب غالباً استخدام المقاومة النوعية بدلاً من التوصيل النوعى

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \qquad (٢)$$

☆ وتقــاس المقاومــة الــنوعية بوحــدات أوم .م ، فى الفــلــزات $\rho = 10^{-7} - 10^{-8}$ أوم .م وللعازلات $\rho = 10^{14} - 10^{13}$ أوم .م

وســريان الــتيار الكهــربى فى موصــل يعــد دليلاً على أن الإلكــترونات الواقعــة تحت تأثير مجال كهربى تبدأ الحركة فى اتجاه معيــن وأن دوال الــتوزيع لهــا تعــانى من تغير ، مثل هذه الحركة الموجهــة تســمى انزياح Drift وأن السرعة المتوسطة لهذه الحركة تسمى سرعة الانزياح υ_d وسنحاول حسابها فيما يلى :



الشكل (٢)

☆ مــن المعــروف أن القــوة الــتى يؤثــر بها المجال على الإلكترون والموضحة فى الشكل (٢) هى :

$$F = -e\,\varepsilon$$

وتحــت تأثير هذا المجال سيتسارع الإلكترون وستنمو سرعته باســتمرار ، لكــن فى حركــته يتصادم الإلكترون مع عيوب الشبيكة وكنــتيجة للإســتطارة يفقد جانباً من سرعته التى اكتسبها تحت تأثير المجال ، ويمكن التعبير عن تأثير الشبيكة بتأثير قوى المقاومة F_r التى

تعوق حركة الإلكترونات خلال الشبيكة . هذه القوة تتناسب طردياً مع υ_d فى اتجاه معاكس لها

$$\text{Fr} = -\frac{1}{\tau}\,\mathbf{m_n}\,\upsilon_d \qquad (٣)$$

وسيتضح المعنى الفيزيائى لعامل التناسب (τ) بعد قليل و m_n هى الكتلة الفعالة للإلكترون باستخدام المعادلة (٣) يمكننا كتابة الموجهة إلى الإلكترون فى الشبيكة على النحو التالى:

$$m_n \frac{dv_d(t)}{dt} = -e\,\mathcal{E} - \frac{1}{\tau}\, m_n \upsilon_d(t) \qquad (٣')$$

نـــرى مـــن المعادلة (٣') أنه بعد تأثير المجال ستزداد سرعة الحـــركة الموجهـــة للإلكترونات . وتسارع الإلكترونات حتى تتساوى قـــوى المقاومـــة Fr مـــع القـــوة F الـــتى يؤثـــر بها المجال على الإلكترونات

$$F_r \,\alpha\, \upsilon_d(t)$$

عـــندما تصـــبح هـــذه القوى متساوية تتلاشى القوى المحصلة المؤثـــرة عـــلى الإلكترون ويتلاشى التسارع الذى يتحرك به من هذه اللحظة تكون الحركة الموجهة للإلكترون بمثابة سرعة ثابتة

$$\upsilon_d = -\frac{e\,\mathcal{E}\,\tau}{m_n} \qquad (٤)$$

نظـــراً لأن شـــحنة الإلكـــترون سالبة يكون إنزياحه فى اتجاه معاكس للمجال $\mathcal{E}$

وتســمى النسبة بين سرعة الانزياح وشدة المجال الكهربى باسم حركية حاملات الشحنة

$$\mu = \frac{v_d}{\varepsilon} \quad \frac{e\,\tau}{m_o} \qquad (٥)$$

للإلكترونات $\mu_n < 0$ ، وللفجوات $\mu_p > 0$

وتــبعاً للمعادلة (٤) فإن سرعة الإنزياح فى المجال الكهربى شدته ثابتة تظل هى الأخرى ثابتة . وهذا ممكن فقط إذا كانت القوة - $F = e\,\varepsilon$ الــتى يؤثر بها المجال على الإلكترون وهذه يمكن معادلتها بقوة المقاومة F_r ، إذا تحركت الإلكترونات فى الاتجاه المضاد للمجال فى شبيكة منتظمة فإن سرعة الأنزياح ستنمو تدريجياً حتى تصل إلى قيمــة كــبيرة جــداً حتى فى المجالات الضعيفة فى مثل هذه الشبيكة ستنتشــر دون أى تخميد كما فى موجات الضوء التى تنتشر فى وسط شفاف ضوئى . نظراً لأن مقاومتها ستتلاشى .

(٤ – ٣) زمن الاسترخاء (τ) ومتوسط المسار الحر (l_r)

يمكن التعرف على المعنى الفيزيائى للمعامل τ إذا فرضنا أن ســرعة الحركة الموجهة للإلكترون تظل عند قيمة ثابتة υ_d وتمت إزالــة المجــال ε نجد أنه بسبب اصطدامات الإلكترونات مع عيوب الشــبكية ســتبدأ هذه السرعة فى التناقص ويعود الغاز الإلكترونى إلى حالة إتزانه مثل هذه العمليات المؤدية إلى ظهور الإتزان فى نظام ما تسمى عمليات الاسترخاء .

وبوضع $eE = o$ فى المعادلة (٣) نحصل على معادلة تصف عودة الغاز الإلكترونى إلى حالة الإتزان أى عملية الاسترخاء

$$(٦) \quad \frac{d\, v_d(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}\, \upsilon_d(t)$$

بتكامل المعادلة(٦) نحصل على معادلة (٧)

$$(٧) \quad \upsilon_d(t) = \upsilon_d\, e^{-\frac{t}{\tau}}$$

حيث $\upsilon_d(t)$ سرعة الحركة الموجهة للإلكترونات ، t الزمن بعد إزالة المجال .

ومـــن المعادلـــة (٧) نجـــد أن τ تميـــز المعدل الذى يتم به الحصول على حالة اتزان النظام : كلما قل τ كلما أسرع النظام المثار فى العـــودة إلى حالة الإتزان وتقل سرعة الحركة الموجهة للإلكترون خلال الزمن $t = \tau$ (الذى يتناقص بمقدار الدالة الأسية e اى بمقدار ($e = 2.7$ مـــرة) ويطـــلق على الزمن τ اسم زمن الاسترخاء ، زمن الاســـترخاء τ للفـــلزات الـــنقية يســـاوى تقريباً 10^{-14} ثانية . ويمكن وصف حركة الإلكترونات فى بلورة بالاستعانة بمفهوم متوسط المسار الحـــر . **فالـــتماثل** مع نظرية الحركة فى الغازات يتيح افتراض أن إلكـــترون فى بـــلورة يـــتحرك فى خط مستقيم حتى يقابل أحد عيوب البـــلورة عـــندها يســـتطار وتؤخذ المسافة المتوسطة λ التى انتقل خلالهـــا الإلكـــترون بين عمليتى استطارة متتاليتين) كمتوسط المسار الحر للإلكترون .

ونتســـاءل إذا كـــان الإلكترون يفقد حركته الموجهة تماماً بعد حالـــة اســـتطارة مفردة عائداً إلى حالته الأولى فى الحركة العشوائية ســـيكون متوســـط المسار الحر له ببساطة هو حاصل ضرب السرعة المتوسطة وزمن الاسترخاء أى $\lambda = \upsilon\tau$ (٨)

ومـــع ذلـــك فـــإن استطارة واحدة لا تكفى وإن كان عدد من الاصـــطدامات υ يكون ضروريا لابطال الحركة الموجهة تماماً. فبعد عدد من التصادمات υ ، فإن كل أثار الارتباط بين السرعات الابتدائية والـــنهائية للإلكترون . ستختفى ويسمى الزمن الذى تصبح فيه الحركة الموجهة للإلكترونات عشوائية بإسم زمن الاسترخاء ومع ذلك سيكون متوســـط المســـار الـــذى ينـــتقل فيـــه الإلكـــترون خـــلال الزمن τ لا يساوى λ لكن

$$\ell = \lambda\,\gamma = \upsilon\tau \qquad (٩)$$

فالمقدار ℓ يسمى متوسط المسار الحر للانتقال ومن المعادلة (٩) نجد أن :

$$\tau = \upsilon\gamma / \upsilon \qquad (١٠)$$

وظهـــور انـــزياح حاملات الشحنة الحرة الناتجة عن تيار كهربى تعد دلالة على أن المجال الكهربى ε يغير توزيع الإلكترونات الحرة على المســـتويات أى يغير شكل دالة التوزيع $f(E)$ نظراً لأن دالة توزيع حالـــة الإتزان $f_0(E)$ لا يمكن أن تكون سبباً لهذا التيار . الخطوط المـــتقطعة فى الأشـــكال (١-أ ، ب) توضح الرسوم التخطيطية لدوال

توزيع الإلكترونات بعد ظهور سرعة الانزياح الثابتة ويمكن من الشكل (١) أن نتـــبين تأثيـــر المجـــال ε على دوال توزيع الإلكترونات على المستويات يظهر فى إزاحة التوزيع الكلى بمقدار $\mathbf{\upsilon_d = eE\ \tau / m_n}$ فى الاتجـــاه المعاكس للمجال ε . وبسبب فقدان دوال التوزيع لتماثلها حـــول المحور الرأسى وبسبب أن السرعة المتوسطة للإلكترونات فى اتجاه المحور × ستنتهى فى النهاية إلى الصفر ، يمكن بسهولة بيان أن السرعة المتوسطة فى هذه الحالة ستساوى سرعة الانزياح υ_d

(٤ -٣) الموصلية الكهربية لموصل

بمعـــرفة سرعة انزياح الإلكترونات υ_d يمكن بسهولة حساب

الشـــكل (٣)

كـــثافة التيار والتوصيل النوعى لموصل لذلك نتصور أسطوانة مساحة مقطعها ١ م٢ وطولها υ_d وموجهة على امتداد اتجاه الانزياح الشـــكل (٣) جميـــع الإلكترونات داخل هذه الأسطوانة ستمر خلال ثانية واحدة خلال قاعدة الأسطوانة المظللة على هيئة تيار كهربى كثافته .

$$J = en\upsilon_d = en\mu\varepsilon \qquad (١١)$$

بمقارنة المعادلتين (١١) ، (١) نحصل على المعادلة

$$\sigma = en\mu \qquad (١٢)$$

وبالـــتعويض عـــن μ مـــن المعادلة (٥) وعن τ من المعادلة (١٠) نحصل على المعادلة :

$$\sigma = \frac{ne^2}{m_n}\,\tau = \frac{ne^2}{m_n}\,\frac{\lambda\gamma}{\upsilon} \qquad (١٣)$$

(٤-٤) الموصلية الكهربية فى غازات منحلة منحلة :

لـــم نميـــز حـــتى الآن بيـــن الغاز الالكترونى المنحل والغاز الالكترونى غير المنحل . وسنحاول أن نرى كيف تؤثر حالة الغاز فى موصـــليته الكهربية للغاز الالكترونى غير المنحل ثم الغاز الالكترونى المنحل .

الغاز غير المنحل :

فى حالـــة غـــاز غير منحل فإن نطاق التوصيل يكون مشغولاً بالالكـــترونات . وهذا لا يجعلها تقترب من بعضها البعض مما يؤدى إلى عـــدم خضـــوع سلوكها لمبدأ الاستبعاد لباولى . فالالكترونات هنا حـــرة تمامـــاً حـــتى أن حـــركة أحدها لا تتأثر بشكل ملحوظ بحركة الالكـــترونات الأخـــرى . لهذا فإن كل إلكترونات التوصيل لغاز غير مـــنحل تسهم بجزء مستقل فى التيار الكهربى وفى الموصلية الكهربية لموصـــل . ولهـــذا الســـبب لابـــد وأن تحتوى المعادلتان (١٣) ، (٥) للموصـــلية الكهـــربية لغاز غير منحل ولحركية الالكترونات ومتوسط المسار الحر ومتوسط عدد التصادمات γ والسرعة المتوسطة لحركته υ ومتوســـط المســـار الحـــر ومتوســـط زمـــن الاسترخاء τ لكل

الالكــترونات الحـــرة الــتى تم الحصول عليها بإيجاد متوسطها خلال المنظومة ككل .

وإذا أخذنـــا مـــا ســـبق فى الحسبان يمكننا كتابة العلاقات المعبرة عن حركية الإلكترون والموصلية الكهربية لغاز غير منحل كما يلى :

$$\mu = \frac{\tau e}{m_n} = \frac{e}{m_n}\,\frac{\bar{\lambda}\bar{\gamma}}{\upsilon} \qquad (٥)$$

$$\sigma = \frac{ne^2}{m_n}\,\tau = \frac{ne^2}{m_n}\,\frac{\bar{\lambda}\bar{\gamma}}{\upsilon} \qquad (١٣)$$

لغاز منحـــل α

حالة الغاز المنحل مختلفة إذ يمكن من الشكل (١ – أ) أن نرى أنـــه لغـــاز مـــنحل فـــإن جميـــع مناســـيب الكـــم إلى يســـار υ_F تكون مشغولة بالإلكترونات . وبسبب ذلك يمكن لمجال خارجى أن يؤثـــر فقط على الإلكترونات المجاورة لمنسوب فيرمى رافعاً إياها إلى المناسيب الأعلى الخالية لتحريكها من المناطق التى تقع على يسار الـــتوزيع إلى المناطق التى تقع على يمينه كما يتضح ذلك من المنحنى ١١ وهذا يعنى أنه لغاز منحل يمكن أن تسهم الإلكترونات التى تقع فى حيـــز منســـوب فيرمى فى الموصلية الكهربية لهذا لابد أن يأخذ المرء زمن الاسترخاء فى العلاقة (٥) ، (٣) للإلكترونات التى طاقتها تساوى عملياً طاقة فيرمى ولنرمز له بالرمز τ_F .

بالتعويض عن τ_F بدلاً من τ فى (٥) ، (١٠) نحصل على العلاقات التالية المعبرة عن حركية الإلكترونات والموصلية الكهربية لغاز منحل

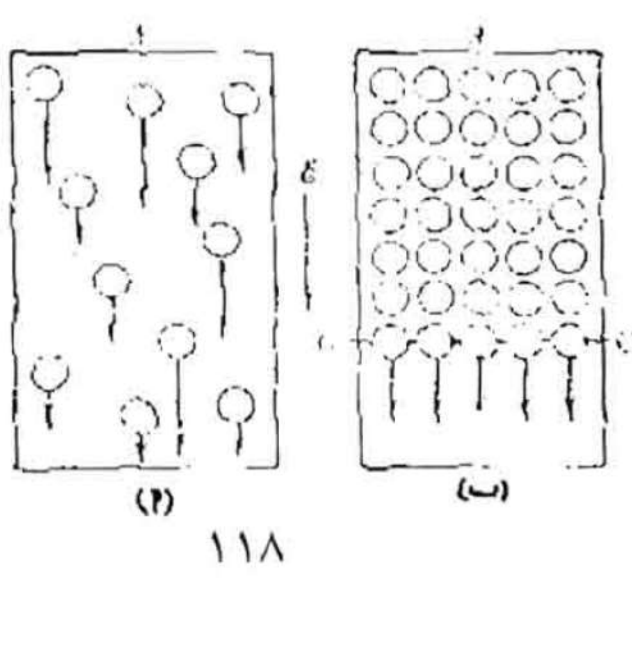
$$\mu = \frac{e\tau_F}{m_n} = \frac{e\lambda_F\gamma_F}{v_F} \qquad (١٥)$$

$$\frac{e^2n}{m_n} \quad \sigma = \frac{e^2n}{m_n}\tau_F = \frac{\lambda_F\gamma_F}{v_F} \qquad (١٣)$$

حيث λ_F هى متوسط المسار الحر لإلكترونات وطاقته تساوى طاقـــة فيرمى و υ_F سرعته و γ_F عدد التصادمات الذى بعدها تصبح الحـــركة الموجهة لمثل هذه الإلكترونات عشوائية . ونتعرض هنا إلى تمـــاثل ميكـــانيكى لشــــرح السلوك المختلف لغاز الكترونى غير منحل ولغاز الكترونى منحل فى حالة عدم وجود المجال .

نتصور كرات مشحونة صغيرة (جسيمات) عائمة على سطح المـــاء فى إنـــاء مستو أفقياً وهو الوعاء A وتتحرك حركة عشوائية بسرعات مختلفة فى حالة عدم وجود تيار كهربى بشكل (٤ أ) ولنضع

الشـــكل (٤)



(أ) (ب)

الآن هــذا الوعــاء تحت تأثير مجال خارجى ε . تأثير المجال على مــنظومة هذه الكرات ككل يتوقف على كيفية رص هذه الكرات على سطح الماء . وإذا كان عدد الكرات صغيراً بحيث كانت المسافات بينها كــبيرة فــإن كــلاً منها سيتحرك بحرية وسوف لا يتداخل مع حركة الكــرات المجــاورة فى الشــكل (٤ أ). فى هذه اللحظة فإن حركة المــنظومة ككــل سوف تتحدد بمتوسط بارامترات الحركة للجسيمات المســتقلة (الســرعة المتوســطة $\bar{\upsilon}$ بــزمن الاسترخاء المتوسط τ ومتوسط المسار الحر $\bar{\lambda}$ ....)

وإذا كــانت الكرات متراصة وقريبة من بعضها البعض بحيث لا يوجد مكان لأى كرات أخرى بالوجود فوق سطح الماء عندئذ تكون حــركة المنظومة ككل تحت تأثير المجال ε ستتعين بواسطة حركة الطــبقات الســفلى مــن هــذه الجسيمات (CC) التى تفصل الأماكن المشــغولة عن الأماكن الفارغة ، الشكل (٤ ب) ، بالتحديد بواسطة سرعة تلك الجسيمات υ_c وزمن الاسترخاء τ ومتوسط المسار الحر λ_o ... فى الغاز الإلكترونى المنحل فإن جزءاً من هذه الطبقة يمثل الإلكترونات المجاورة لمنسوب فيرمى الذى يفصل المناسيب المشغولة عن تلك الخالية .

(٤–٥) قانون فيدمان – فرانز – لورانتز
Wiedemann – Franz – Lorentz Low

من المعروف أن انتقال شحنة كهربية فى مجال كهربى ليست النــتيجة الوحيــدة لوجود الغاز الإلكترونى فى جامد ، فثمة انتقال أخر

هــو الانــتقال الحرارى تحت تأثير منحدر فى درجة الحرارة . ولهذا السـبب يكـون طـبيعياً أن نتوقع أن الموصلية الكهربية والموصلية الحــرارية لجامد ستكونان مرتبطتين إحداهما بالأخرى. هذا الارتباط تــم اكتشافه عملياً أول الأمر بواسطة فيدمان وفرانز وتم شرحه نظرياً بواسـطة لورانــتز فى حالة الفلزات وأوضحا أن النسبة بين الموصلية الحــرارية K لفلز والموصلية الكهربية σ تتناسب مع درجة الحرارة المطلقة

$$K/\sigma = LT \tag{١٤}$$

وتعــد المعادلة (١٤) هى جوهر قانون فيدمان فرانز لورانتز وعامل التناسب **L** يسمى عدد لورانتز . ويمكن بسهولة الحصول على قانون فيدمــان فرانــز لورانــتز إذا استخدمنا العلاقات الدالة على σ , K المستنتجة من نظرية الإلكترونات الحرة فى الفلزات وبقسمة المعادلة .

$$K = \frac{\pi^2}{3} \frac{Nk^2_B}{m_e v_F} \lambda_e T$$

المعــبر عــن الموصــلية الحــرارية لفــلز عــلى المعادلــة (١٣) نحصل على المعادلة (١٥)

$$\frac{k}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T \tag{١٥}$$

وبمقارنة المعادلتين (١٥) ، (١٤) نجد أن القيمة النظرية لعدد لورانتز هى :

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 = 2.45 \times 10^{-8} \text{ W-ohm- K}^{-2} \tag{١٦}$$

ويوضح الجدول (١) القيمة العملية لعدد لورانتز L لبعض الفلزات النقية عند صفر درجة سيلزيوس ونرى فيه أن القيمة النظرية لهذا العدد تتفق مع القيمة العملية .

جدول (١)

	Ag	Au	Cd	Cu	Ir	Mo	Pb
L (10^8W-ohm-K)-	2.31	2.35	2.42	2.23	2.49	2.61	2.47

وفى أشباه الموصلات غير المنحلة فإن الموصلية الحرارية لا تتوقف بالكامل على الإلكترونات إذ يرجع جزء منها إلى موصلية الشبيكة . ومع ذلك فإن المركبة الإلكترونية للموصلية الحرارية فى أشباه الموصلات تخضع لقانون فيدمان فرانز لورانتز . الفرق الوحيد هو أن عدد لورانتز يتعين من العلاقة التالية

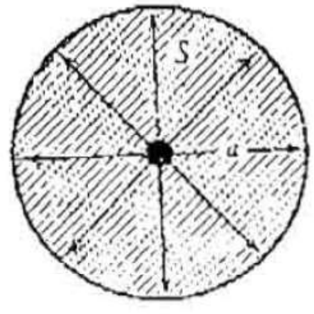
$$L = 2 \left(\frac{k}{e} \right)^2 \qquad (١٧)$$

(٤ - ٦) توقف حركية حاملات الشحنة على درجة الحرارة

نأخذ فى هذه الحالة مدى درجة الحرارة المرتفعة ومدى درجة الحرارة المنخفضة .

مدى درجة الحرارة المرتفعة :

فى مدى درجة الحرارة المرتفعة فإن الجزء السائد يرجع إلى استطارة الإلكترونات على اهتزازات الشبيكة (الفونونات) وتهتز كل ذرة فى الشبكية عشوائياً حول موضع إتزانها بالشكل (٥) التى تظل داخل كرة نصف قطرها يساوى سعة الاهتزازه



الشكل (٥)

(a) ، مقطـــع هذه الكرة $S= \pi a^2$ يمكن أن يتخذ كمقطع لإستطارة الـــذرة المهتزة : الإلكترون المتحرك فى الموصل يمكن أن يدخل إلى أحد هذه الاقراص وعندها يستطار .

وثمة شرط أخر يتمثل فى أن احتمالية دخـــــــول الإلكترون فى مثل هذا القرص تتناسب طردياً مع مساحة المقطـــــــع بينما يتناسب متوسط المسار الحر للإلكترون عكسياً مع مســــــاحة المقطـــع $\lambda \alpha \frac{1}{a^2} \approx \frac{1}{s}$ وتتناسب طاقة الذرة المهتزة طردياً مع مربع السعة $E \alpha a^2$.

ومـــن الـــناحية الأخـــرى تتناسب السرعة المتوسطة للذرات المهـــتزة فى جامد مع درجة الحرارة المطلقه له T أى أن $E \alpha T$ لهذا فإن متوسط المسار الحر للإلكترونات الذى يرجع إلى الاهتزازات الحرارية للشبيكة يتناسب عكسياً فى مدى درجات الحرارة المختلفة مع درجة الحرارة المطلقة للجسم .

$$\lambda \propto 1/T \qquad (١٨)$$

هذه النتيجة يمكن الحصول عليه مباشرة إذا أخذنا فى الاعتبار أن تركيــز الفونونـــات فى موصـــل فى مدى درجات الحرارة المرتفعة يتناسب طردياً مع T أى أن:

$$n_{Ph} \propto T$$

وعند استطارة الإلكترون فونون سوف يتناسب متوسط المسار الحـــر للإلكترون عكسياً مع تركيز الفونونات وبالتالى يتناسب عكسياً مع درجة الحرارة المطلقة T أى أن

$$\lambda \propto \frac{1}{T}$$

مـــن ناحيـــة أخرى فإن متوسط كمية تحرك الفونون فى مدى درجـــات الحـــرارة المـــرتفعة يكون كبيراً إلى الحد أن تصادماً واحداً لإلكترون مع فوتون (أى أن عند ١= υ) تظهر عملياً فى الفقد الكلى فى الســـرعة الأوليـــة للإلكـــترون. بالتعويض من المعادلة(١٨) فى المعادلة (٥) والمعادلة(٥)

ويوضع ١= υ نحصل على العلاقات التالية لحركية الإلكترون

لغاز غير منحل

$$\mu \propto \frac{\bar{\lambda}}{\bar{v}} \propto \frac{T^{-1}}{T^{1/2}} = T^{-3/2} \qquad (١٩)$$

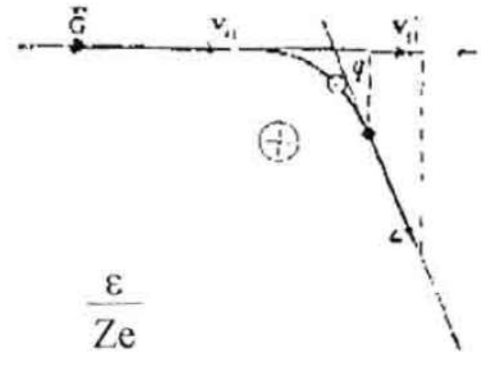
ولغاز منحل

$$\mu \propto \frac{\lambda_F}{v_F} \propto \frac{T^{-1}}{\text{constant}} \propto = T^{-1} \qquad (٢٠)$$

لذلك فإنه فى مدى درجات الحرارة المرتفعة حيث يكون التأثير السائد الاســتطارة بالفونونـــات (اهــتزازات الشبيكة) فإن حركية حاملات الشـــحنة (للإلكــترونات أو الفجــوات) فى غاز غير منحل تتناسب عكســياً مــع $T^{3/2}$ وفى غاز منحل تتناسب عكسياً مع T . فى هذه الــلحظة يمكن التمييز بين سلوك الغاز الإلكترونى غير المنحل والغاز الإلكترونى المنحل .

مدى درجات الحرارة المنخفضة

فى مــدى درجات الحرارة المنخفضة فإن التأثير السائد يتمثل فى الاستطارة بذرات الشوائب المتأينة وآلية عملية الاستطارة بواسطة أيونـــات الشوائب تؤدى إلى انحراف الإلكترونات المارة بجوارها لذلك تقــلل مـــن سرعاتها فى الاتجاهات الأصلية وكما فى الشكل (٦) فإن



الشكل (٦)

ســـرعة الإلكـــترون فى اتجاه المجال تكون υ_0 قبل انحرافها بواسطة الأيون الشحون بشحنة موجبة وبعد الانحراف تهبط إلى υ_0 وتفترض العلاقـــة الـــتى تـــم الحصـــول عليها بواسطة رذرفورد عند دراسته لاستطارة جسيمات ألفا بواسطة نوى العناصر الكيميائية هى :

$$\upsilon \propto \gamma^4 \left(\frac{\varepsilon}{ze} \right)^2 m_n \qquad (٢١)$$

حيـــث (υ) هى سرعة الإلكترون و ε هى ثابت العزل للبللورة و Ze الشحنة على الأيون المستطار .

عـــندما تـــرتفع قيمـــة سرعة الإلكترون إلى حد كبير وكذلـــك كتلـــته الفعالـــة m_n وعـــامل توهين شدة المجال فى البللورة (عـــندما تكـــون قيمـــة ε مـــرتفعة هى الأخـــرى) وعندئذ يقل عدد الإلكـــترونات الـــتى تنحرف عن مسارها الأصلى يقل وكذلك يقل عدد التصادمات المطلوبة كى يتحرك الإلكترون حركته العشوائية . وستقل الســـرعة υ بوضوح مع زيادة الشحنة على الأيون المستطار . ومن ناحية أخرى فإن متوسط المسار الحر للإلكترونات المستطارة بواسطة ذرات الشوائب المتأينة يتناسب عكسياً مع تركيزها وإن كان لا يتوقف على درجة الحرارة

وإذا أخذنا هذا فى الحسبان نحصل بالتعويض عن υ من المعادلة (٢٣) فى المعادلتين (٥َ) ، (٥ً) على

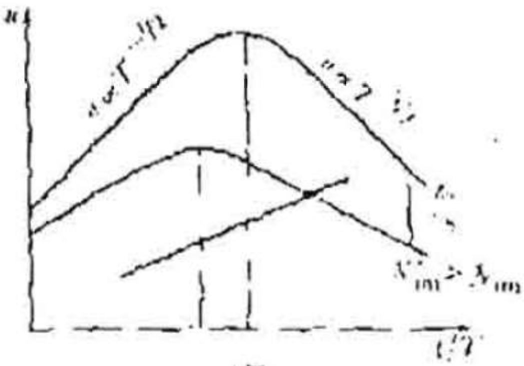
☆ لغاز غير منحل

$$\mu \propto \frac{\bar{\gamma}\bar{\lambda}}{\upsilon} \propto \bar{\upsilon}^3 \propto T^{3/2} \qquad (٢٢)$$

☆ ولغاز منحل

$$\mu \propto \frac{\gamma_F \lambda_F}{v_F} \propto \upsilon^3{}_F = \text{constant} \qquad (٢٣)$$

لذلــك تتناســب حــركات الإلكترون المستطار بواسطة ذرات الشوائب طردياً مع T^3 فى مدى درجات الحرارة المرتفعة بالموصلات التى تحتوى على غاز الكترونى غير منحل لكنها لا تتوقف على T فى حالة الموصلات التى تحتوى على غاز الكترونى منحل . ويوضح شكل (٧ أ) ، توقف الحركية μ على درجة الحرارة لغاز غير منحل ويوضــح الشــكل (ب) المنحــنى الــتجريبى $\mu = f(T)$ للسيليكون ويتضح بصفة عامة من الشكل (٧) أن التجربة ككل تدعم ما يمكــن استخلاصــه من النظرية ويظهر هذا بوضوح فى حالة توقف μ على درجــة حرارة الموصلات غير المنحلة . ويتضح من المناقشة السابقة أنه عند درجات الحرارة المنخفضة يرجع التأثير الرئيسى الناتج عــن



(أ)

(ب)

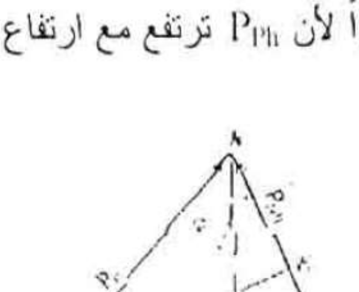
الاســتطارة بواســطة ذرات الشوائب المتأينة . ومع ذلك فإنه فى حالة الفــلزات الــنقية الخالية من العيوب أو التى تحتوى على كميات مهملة مــن الشــوائب وعيوب البللورة يمكن إرجاع استطارة الفونونات إلى الآليــة الرئيســية لاستطارة حاملات الشحنة فى مدى درجات الحرارة المنخفضــة . وســنحاول فيما يلى ايجاد العلاقة بين الحركية ودرجة الحرارة فى هذه الحالة .

بالنسبة لاستطارة الكترون فونون يكون متوسط المسار الحــر للإلكترونات λ متناسباً عكسياً مع تركيز الفونونات ونظراً لأن $n_{Ph} \propto T^3$ فى مدى درجات الحرارة المنخفضة فإن :

$$\lambda \propto \frac{1}{n_{ph}} \propto T^{-3} \qquad (٢٤)$$

ولــتعيين عدد التصادمات التى تجعل الإلكترون يفقد سرعته الاتجاهية الأصلية وفى مدى درجات الحرارة المرتفعة التى يتساوى فيها متوسط كميــة تحرك الفوتون p_{ph} مع متوسط كمية تحرك الإلكترون P_e يكون γ = ١ وفى مدى درجات الحرارة المنخفضة يكون $P_{Ph} << P_e$

ونتيجة لذلك تكون ١ << γ ويتوقف هذا على درجة الحرارة نظراً لأن P_{Ph} ترتفع مع ارتفاع درجة الحرارة T



الشكل (٨)

ويوضح الشكل (٨) تغير كمية تحرك إلكترون يشارك فى تصادم مرن مــع فونــون ويحدث التصادم عند نقطة A قبل التصادم تكون كمية تحــرك الإلكــترون هى $P_e{}^0$ وبعــد التصادم تكون P_e ونظراً لأن التصادم تصادم مرن فإن القيمة المطلقة لكمية التحرك لا تتغير :

$$P_e{}^0 = Pe$$

غير أن الاتجاه يتغير بحيث :

$$P_e = P^0{}_e + P_{Ph}$$

ويســتلزم تغيــر اتجــاه كميــة تحرك الإلكترون الناتجة عن التصادم انخفاضــاً فى قيمة الاتجاه الأصلى بمقدار ΔP_e (الشكل ٨) ومن المثلث BCD

$$\Delta P_e = P_{Ph} \sin \frac{\varphi}{2}$$

حيث φ زاوية استطارة الإلكترون ومن المثلث AEC نتبين أن

$$\sin \left(\frac{\varphi}{2}\right) = \frac{P_{ph}}{2P_e}$$

ولهذا نجد :

$$\Delta Pe = \frac{P^2{}_{Ph}}{2P_e}$$

وتقل كمية يحرك الإلكترون فى الاتجاه الأصلى بهذا المقدار نتيجة لتصادم مفرد مع الفونون لتتلاشى كمية تحرك الإلكترون فى الاتجاه الأصلى تماماً يكون عدد التصادمات المطلوبة هو :

$$\gamma \approx \frac{P_e}{\Delta P_e} \approx 2\left(\frac{P_e}{P_{ph}}\right) \propto \frac{1}{P^2{}_{ph}}$$

فى مــدى درجــات الحرارة المنخفضة تكون طاقة اهتزازات الشبيكة الحرارية هى $E_{lattice} \propto T^4$

✫ وأن تركيز الغاز الفونونى هو $n_{ph} \propto T^3$

✫ لذلك فإن متوسط كاقة الفونون

$$\varepsilon_{ph} = \frac{E_{lattice}}{n_{ph}} \propto T$$

✫ ونظراً لأن كمية تحرك الفوتون

$$P_{ph} = \frac{\bar{\varepsilon}_{ph}}{v}$$

حيث υ سرعة الصوت فى البللورة – وتتناسب كمية التحرك فى هذا المدى طردياً مع درجة الحرارة T .

$$P_{ph} \propto T \qquad (٢٥)$$

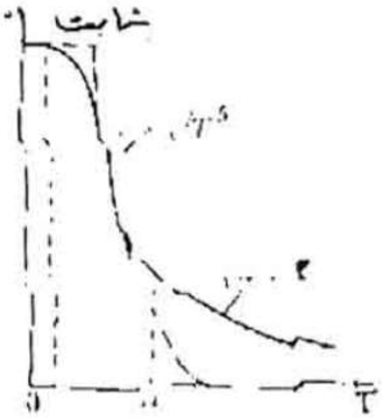
لهـــذا

$$\gamma \propto P_{ph}^{-2} \propto T^{-2} \qquad (٢٦)$$

بالتعويض عن λ من المعادلة (٢٤) وعن υ من المعادلة (٢٦) فى المعادلـــة (٥ً) نحصـــل على العلاقة التالية لحركية حاملات الشحنة الحرة فى الفلزات النقية فى مدى درجات الحرارة المنخفضة .

$$\mu \propto \frac{\gamma_F \lambda_F}{v_F} \propto T^{-5} \qquad (٢٧)$$

ويوضـــح الشكل (٩) المنحنى التحليلى لعلاقة درجة الحرارة والحركية



الشكل (٩)

μ للفــلزات النقية . ففى مدى درجات الحرارة المرتفعة (فوق درجة حــرارة دبيــاى θ) تتناسب حركية حاملات الشحنة عكسياً مع درجة الحــرارة أى $\mu \propto T^{-1}$ وفى مــدى درجات الحرارة المنخفضة (أقل كثيراً من θ) يكون $\mu \propto T^{-5}$

وفى المدى المتوسط لدرجات الحرارة يحدث انتقال تدريجى من T^{-1} إلى T^{-5} وفى الــنهاية وبالقــرب من الصفر المطلق تكون الاهتزازات الحرارية أضعف ما يمكن حتى أن حاملات الشحنة المستطارة بواسطة ذرات الشوائب وعيوب الشبكية التى توجد عادة فى الفلز بغض النظر عن درجة نقائه تصبح ذات أهمية أولية وفى هذه الحالة تتوقف حركية حاملات الشحنة عن الاعتماد على درجة الحرارة (ارجع إلى المعادلة (٢٣) وعــندئذ يكــون الخــط الممثل للعلاقة بين μ , T بمثابة خط موازى لمحور درجات الحرارة .

(٤ –٧) الموصلية الكهربية للفلزات النقية :

تــرجع الموصـــلية الكهربية للفلزات النقية إلى انسياق حاملات الشحنة الحرة المتماثلة النوع (متماثلة الشحنة) ، عادة تكون الكــترونات حــرة . ومــع ذلــك فــفى بعض الفلزات مثل البريليوم والخارصــين يمكــن أن تحمــل الشحنة الفجوات وتوصف الموصلية الكهربية لالكترونات الفلزات بالمعادلة (١٢)

$$\sigma = en\mu$$

ونظراً لأن الفلزات هى موصلات منحلة فإن تركيز الإلكترونات فيها لا يتوقف عملياً على درجة الحرارة . وبسبب هذا فإن علاقة الموصلية بدرجة الحرارة تتعين بالكامل من علاقة الحركية على درجة الحرارة لهذه الإلكترونات فى غاز الكترونى منحل .

بالــتعويض عن μ من المعادلة (٢٠) والمعادلة (٢٧) فى المعادلــــة (١٢) نحصل على العلاقات التالية :

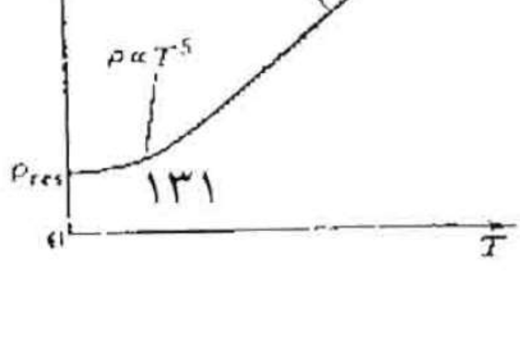
☆ فى مدى درجات الحرارة المرتفعة

$$\sigma = A / T \,,\ \rho = aT \qquad (٢٨)$$

☆ وفى مدى درجات الحرارة المنخفضة

$$\sigma = B/ T^5 \ ,\ \ \rho = bT^5 \qquad (٢٩)$$

حيث A , B , a , b هى معاملات التناسب



الشكل (١٠)

ويوضـــح الشكل (١٠) رسماً تخطيطاً للعلاقة بين الم+وصلية الكهربية للفــلزات الــنقية ودرجـــة الحرارة ، ومنه يتضح أنه فى مدى درجات الحرارة المرتفعة تكون العلاقة على هيئة خط مستقيم فى حين أن هذه العلاقـــة يمثــلها فى مـــدى درجات الحرارة المنخفضة قطع مكافىء الدرجـــة الخامســـة ، وعندما تقترب درجة الحرارة من الصفر تصبح العلاقـــة على هيئة خط مستقيم يوازى محور درجات الحرارة ويمكن الاستعانة بميكانيكا الكم فى حساب A , B , a , b فى المعادلات(٢٢) ، (٢٩) ويوضح الجدول (٢) الموصلية الكهربية لبعض الفلزات النقية عـــند درجـــة حـــرارة الغرفة كما تم حسابها من الناحية النظرية (σ theory) وكما تم قياسها عملياً (σ exp) بوحدات $10^6\ \Omega^{-1}\ m^{-1}$

فى الجدول (٢)

	Na	K	Rb	Cu	Ag	Au
σ نظرى	22	19	20	100	90	107
σ عملى	23	15	8	64	67	68

ويتضـــح مـــن هـــذا الجـــدول أن اتفاقا مقبولاً بين القيميتين النظرية والعملية للموصلية الكهربية فى حالتى الصوديوم والبوتاسيوم (Na , K) ذلك لأن الكترونات التوصيل هى نفسها الإلكترونات الحرة ومع زيـــادة الكتـــلة الذريـــة يـــزداد جهـــد الشبيكة ويحدث الاختلاف بين الموصلية الكهربية للذهب σ_0 عند 273 كلفن إلى σ عند درجات الحرارة المنخفضة سواء كانت محسوبة أو مقاسة.

الجدول (٣)

	273K	87.4K	57.4K	20.4K	11.1K	4.2K
σ_0/σ نظرى	1	0.2645	0.1356	0.0060	0.0003	$3x10^{-6}$
σ_0/σ عملى	1	0.2551	0.1314	0.0058	0.0003	$3x10^{-6}$

ويصبح الاتفاق بين القيمة النظرية والعملية مقبولاً بدرجة كافية .

(٤ -٨) الموصلية الكهربية لأشباه الموصلات النقية

ترجع الموصلية الكهربية للبللورة الأحادية النقية جداً من أشباه الموصلات فى درجات الحرارة الأعلى من الصفر المطلق إلى كل من الإلكترونات فى نطاق التوصيل والفجوات فى نطاق التكافؤ مثل هذه الموصلية تسمى الموصلية الذاتية intrinsic conductivity

ونظراً لوجود نوعين من حاملات الشحنة فى أشباه الموصلات النقية وهى الالكترونات والفجوات تكون الموصلية الكهربية لها هى مجموع الموصلية الكهربية .

$\sigma_n - e\, n_i\, \mu_n$ للإلكترونات الحرة وتركيزها n_i وحركتها μ_n

☆ والموصلية الكهربية

$\sigma_p = e\, p_i\, \mu_p$ للفجوات الموجبة

وتركيزها ρ_i وحركيتها μ_i ونظراً لأن $n_i = \rho_i$ فإن الموصلية الكهربية الكلية لشبه موصل نقى هى :

$$\sigma_i = \sigma_n + \sigma_p = en_i\,(\mu_n + \mu_p) \qquad (٣٠)$$

ونظراً لأن تركيز الفجوات أو الإلكترونات الشبة موصل نقى هى

$$n_i = 2\left(\frac{2\pi\sqrt{m_n m_p}\,k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \exp(-E_g / 2 k_B T)$$

وتعطى حركية حاملات الشحنة فى مدى الموصلية الذاتية بالمعادلة (١٩)

بالـــتعويض من المعادلة السابقة ومن المعادلة (١٩) فى المعادلة (٣٠) نحصل على :

$$(٣١)\quad \sigma_i = \sigma_0 \exp(-E_g / 2 k_B T) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{RT}\right)$$

حيـــث σ_0 هى الحـــد الســـابق لـــلدالة الأســـية ومـــن المعادلـــة (٤ – ٣٠) نجـــد σ_i تـــؤول إلى σ_0 كمـــا أن T تؤول إلى مالا نهاية ونســـتنتج من هذا أن المعادلة (٣٠) تظل صالحة حتى درجة الحرارة اللانهايـــة ، وعـــندئذ تكون σ_0 هى الموصلية الكهربية لشبه الموصل عـــندما تـــؤول إلى مـــالا نهاية ويمكن إعادة كتابة المعادلة ٣١ على الصورة

$$(٣٢)\quad \ln \sigma_i = \ln \sigma_0 - \frac{E_g}{2k_B T} = \ln \sigma_0 \quad \frac{\Delta E}{k_B T}$$

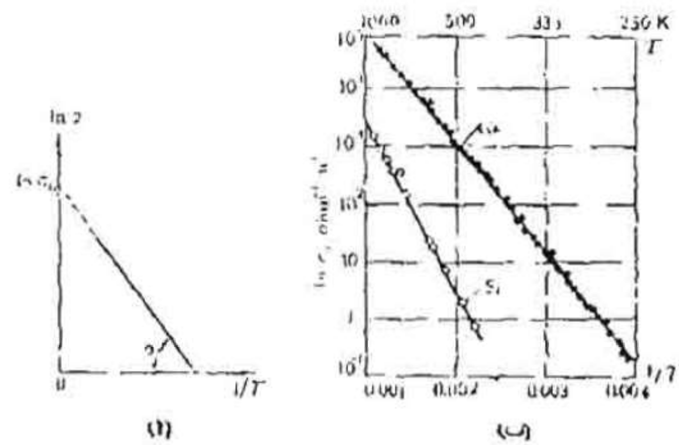
وهذه تكافىء

$$\ln \rho_i = \ln \rho_0 + \frac{E_g}{2k_B T} = \ln \rho_0 + \frac{\Delta E}{k_B T}$$

لذلـــك إذا رســـمنا $\frac{1}{T}$ عـــلى المحور السينى ، $\ln\sigma$ على المحور الرأســـى نحصـــل عـــلى خط مستقيم يقطع المحور الرأسى وثم يمكن معـــرفة σ_i عـــند $\ln_\sigma$ كما فى الشكل (١٠ أ) ميل هذا الخط المستقيم يساوى $\frac{\Delta E}{k_B} = E_g/2k_B$

وبمعــرفة k_B يمكن حساب طاقة الفراغ الطاقى E_g أو طاقة التنشيط الحرارى لحاملات الشحنة الحرة ΔE

ويوضــح الشــكل (١٠ب) العلاقة التجريبية بين $Ln\ \sigma_i$ للجرمانيوم النقى والسليكون النقى قيمنا الفراغ الطاقى لهما 0.72 الكترون فولت , 1.2 الكترون فولت على الترتيب .



الشكل (١٠ب)

وبمقارنة نتيجة هذه الفقرة بتلك فى حالة الفلزات النقية

نتبين وجود الفروق التالية :

فى الفــلزات حيــث يكــون الغاز الالكترونى منحلا لا يتوقف تركيز حــاملات الشــحنة الحــرة على درجة الحرارة وأن توقف الموصلية الكهــربية عــلى درجة الحرارة يتم تعيينه كلية بتوقف حركية حاملات الشــحنة على درجة الحرارة وفى أشباه الموصلات حيث يكون الغاز الإلكترونى غير منحل يتوقف تركيز حاملات الشحنة بشدة على درجة الحــرارة [ارجــع إلى المعادلة (٣٢)] وبسبب ذلك تتعين موصليتها

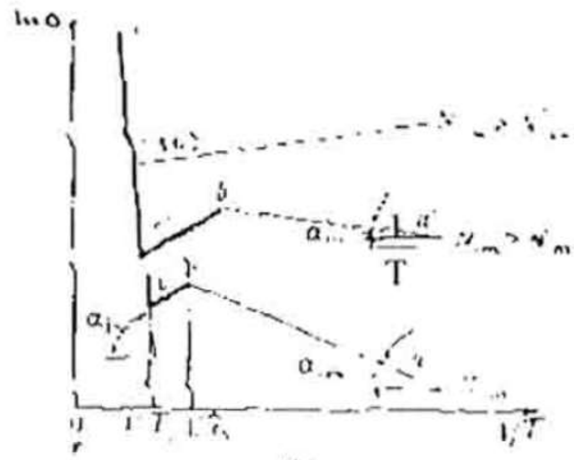
كـلية مـن علاقة تركيز حاملات الشحنة بدرجة الحرارة [ارجع إلى المعادلـة (٣٢) وعـند درجـة حـرارة معينة ، يمكن تعيين تركيز حـاملات الشحنة وموصلية شبه الموصل بواسطة الفراغ الطاقى E_g ويظهـر هذا بوضوح فى الجدول (٤) الذى يحتوى على قيمة كل من الفراغ الطاقى والمقاومة النوعية لعناصر المجموعة الرابعة فى جدول مـندليف . هذا العناصر لها شبيكة بلورية من النوع الماسى . وعندما تقـل طاقـة الفراغ الطاقى من 5.2 إلكترون فولت (الماسى) إلى 0.08 إلكـترون فولـت (القصدير) تقل المقاومة النوعية عند درجة حرارة الغرفة بمقدار 16 رتبة .

الجدول (٤)

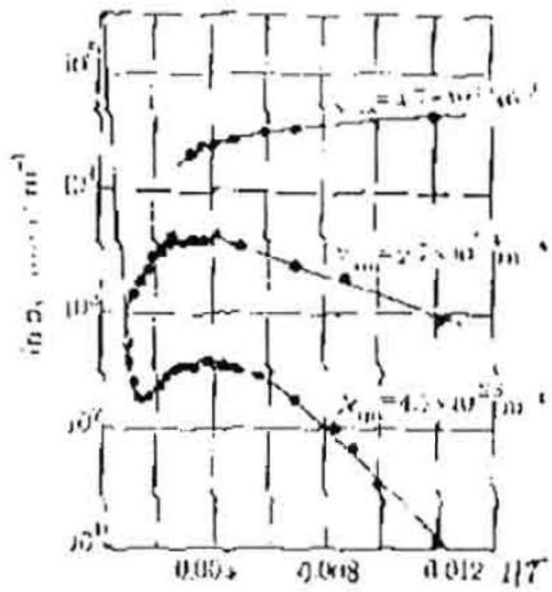
	الماسى	السليكون	الجرمانيوم	التصدير الرمادى
Eg(eυ)	5.2	1.12	0.66	0.08
$\sigma\ (ohm^{-1}.m^{-1})$	10^{10}	$3x10^{3}$	0.47	$2x10^{-6}$

(٤-٩) الموصلية الكهربية لأشباه الموصلات غير النقية :

تـتعين علاقة الموصلية الكهربية لأشباه الموصلات غير النقية غيـر المنحـلة كما فى حالة أشباه الموصلات النقية من علاقة تركيز حاملات الشحنة بدرجة الحرارة وبسبب هذا يكون المنحنى المعبر عن σ بدرجة الحرارة مماثلا على الأقل لمنحنى المعبر عن علاقة n , T



(أ)



(ب)

الشكــل (١٢)

وعلاقــة $\text{Ln}\ \sigma - \frac{1}{T}$ فى حالــة شبه الموصل غير النقى موضحة فى الشكــل (١٢ أ) التى يظهر ثلاث مناطق على المنحنى هى , cd
bc , ab

تقع المنطقة ab بين الصفر المطلق ودرجة حرارة تشبع الشوائب Ts وتصف المعادلة التالية تركيز حاملات الشحنة فى هذه المنطقة :

$$n = \sqrt{2\,N\,d}\ \left(\frac{2\pi\, m_n\, k_B\, T}{h^{-2}} \right)^{3/2} \exp(^{-E}{}_d / 2\, k_B T)$$

وتـــتعين الحركية بصفة أساسية من الشوائب والاستطارة عن العيوب وتـــبعا للعلاقة (٢٢) تتناسب الحركية طردياً مع $T^{3/2}$ وبالتعويض من المعادلـــة الســـابقة والمعادلة (٢٢) فى المعادلة المعبرة عن الموصلية نحصل على :

$$\sigma_{im} = \sigma^{0}_{im} \exp(^{-E_d / 2 k_B T}) = \sigma^{0}_{1m} \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) \qquad (٣٣)$$

حيـــث σ^{0}_{1m} هى معامل يتوقف توقفا ضعيفا على درجة الحرارة (عند مقارنته بالدالة الأسية)

ويأخذ لوغاريتم المعادلة (٣٣) نحصل على :

$$\ln \sigma^{0}_{im} = \ln \sigma^{0}_{im} - \overline{\frac{E_d}{2k_B T}} = \mathrm{Ln}\, \sigma^{0}_{im} - \overline{\frac{\Delta E}{k_B T}} \qquad (٣٤)$$

وحيث ΔE طاقة التنشيط الحرارى لحاملات الشحنة الحرة

والمعادلة السابقة مكافئة للمعادلة

$$\mathrm{Ln}\, \rho^{o}_{im} = \mathrm{Ln}\, \rho^{o}_{im} + \frac{Ed}{2K_{BT}} = \mathrm{Ln}\, \rho^{o}_{im} + \frac{\Delta E}{2k_B T}$$

والتمـــثيل البيانى للعلاقة Ln_0 و $\frac{1}{T}$ نحصل على خط مستقيم يصنع الزاوية α_{im} مع المحور $\frac{1}{T}$ بحيث يتناسب $\tan \propto = E_d \ 2 k_B$ طـــرديا مـــع طاقـــة تـــأين الشوائب E_d ومن تم تناظر المنطقة ab الموصـــلية الكهـــربية للشـــوائب أو التوصـــلية الكهربية غير الذاتية impurity or extrimsic condactivity الـــتى تـــرجع إلى حاملات الشـــوائب كنـــتيجة لتأين ذرات الشوائب وتقع المنطقة bc بين درجة

حـــرارة تشبع الشوائب T_s ودرجة حرارة الموصلية الذاتية T_i . فى هــذه المنطقة تتأين جميع ذرات الشوائب دون إثارة ملحوظة لحاملات الشـــحنة الذاتية وبسبب هذا يظل تركيز الحاملات ثابتا تقريبا ويساوى تركيز الشوائب $n = N_d$. لهذا تتعين علاقة الموصلية بدرجة الحرارة بواسطة علاقة حركية الحاملات على درجة الحرارة .

وإذا كانت ألية استطارة الحاملات فى هذه المنطقة تتمثل فى الاستطارة بواســطة الاهتزازات الحرارية للشبيكة التى تسبب نقص الحركية مع درجــة الحـــرارة ، وعندئذ تقل الموصلية مع ارتفاع درجة الحرارة . وهذا ما يظهر بالضبط فى الشكل (١٢ أ) لكن إذا كانت الآلية الرئيسية ممثـــلة فى استطارة الشوائب أو العيوب ، فإن الموصلية الكهربية فى هذه المنطقة bc ستزداد مع ارتفاع درجة الحرارة .

وتناظر المنطقة cd مرحلة الانتقال إلى الموصلية الذاتية intrinsic conductivity فــفى هــذه المــنطقة يكون تركيز الحاملات مساويا تركيز الحاملات الذاتية لذلك تكون الموصلية فى هذه المنطقة هى :

$$\sigma \approx \sigma_1 = \sigma_0 \exp (- E_d / 2k_B T)$$

ويمـــثل العلاقـــة $\ln\sigma \left(\frac{1}{T} \right)$ خـــط مستقيم يصنع زاوية α_1 مع المحـــور $\frac{1}{T}$ وميلـــه يتناســـب طـــرديا مـــع اتســـاع الفراغ الطاقى

$$\tan \alpha_1 = E_g / 2 k_B$$

ويوضـــح الشـــكل (١٢ ب) علاقـــة $\ln_\sigma$ ، $\frac{1}{T}$ لســـليكون مطعـــم بالفوســـفور وتظهـــر المقاومة بالشكل (١٢ أ) تطابق النتائج النظرية بالنتائج التجريبية .

الثرميستور Thermistor :

تستخدم العلاقة القوية بين مقاومة شبه الموصل ودرجة الحرارة فى نطاق واسع فى نبائط devices أشباه الموصلات الثرميستور وهو مقاومة شبه موصل لها معامل حرارى كبير لازياد المقاومة ، وأن المنحنى المميز (تيار - جهد) لها غير خطى .

وتستخدم الثرميستورات فى قياس درجة الحرارة وقدرة الاشعاع الذى له تردد عال كبير حداً ، وللمعادلة درجات الحرارة فى الدوائر الكهربية المختلفة ، وللمرحلات relays التوفيقية إلى أخره .

وتستخدم الثرموستورات الميكروسكوبية (الدقيقة) التى تتميز بصغر أبعادها وصغر سعاتها الحرارية عند دراسة عمليات التبادل الحرارى فى النباتات والأعضاء الحية التى تشمل تشخيص أمراض الناس واستخدام شريحة شبه موصل رقيقة فى البولومتر polometer يجعل من المتاح زيادة حساسية البولومتر إلى 10^{-10} وات وإذا وضع مثل هذا البولومتر عند بؤرة مرآة على هيئة قطع مكافىء يجعله قادرا على اكتشاف طائرة ، دبابة سفينة أو أية أجسام أخرى تشع حرارة على مسافات تصل إلى عدة كيلومترات . ويستخدم البولومتر ذو الحساسية العالية المصنع من أشباه الموصلات فى اكتشاف الاشعاع فوق الحرارى المنعكس عن سطح القمر

(٤ – ١٠) الانحراف عن قانون أوم . تأثير مجال قوى :

التناسب بين كثافة التيار τ وشدة المجال ξ الذى يتطلبه قانون أوم (١) يظل ثابتا طالما أن σ التى تدخل هذا القانون كعامل للتناسب لا يتوقف على ξ

ولنحاول البحث عن الظروف التى يظل فيها هذا المتطلب معمولا به .

تـبعا للمعادلة (٥) فإن حركية الحاملات فى شبه موصل غير مـنحل حيث السرعة المحصلة لحركية الحاملات وهى تساوى مجموع السرعة الحرارية وسرعة الانزياح υ_d

$$\upsilon = \upsilon_o + \upsilon_d$$

فى المجالات الضعيفة :

$$\upsilon_d << \upsilon_o \qquad (٣٥)$$

وسـرعة الحـاملات المحصلة هى $v = \upsilon_d$ التى لا تتوقف على ε لهـذا فـإن كلا من حركية الحاملات μ وتركيزها وبالتالى الموصلية الكهربية $\sigma = en\mu$ لا تتوقف على ε مثل هذه المجالات تعد مجالات ضعيفة

لذلك يكون قانون أوم الذى يتطلب علاقة خطية بين ε و J صالحا فقط فى حالة المجالات الضعيفة التى تزعن للعلاقة (٣٥)

أسئلـــــــــــــــــــــــة

١- عرف كلاً من

أ) دالة الشغل

ب) فرق جهد التلامس

جـ) التقويم

٢- مستعيناً بالرسم اشرح تأثير الطبقات الماصة على دالة الشغل

٣- بين كيف ينشأ فرق جهد التلامس لوصلة بين فلزين

٤- مستعيناً بالرسم اشرح تأثير مجال التلامس (مجال الوصلة) على مناسيب طاقة شبه موصل لوصلة فلز – شبه موصل .

٥- اشرح كيف تستنتج علاقة لحساب اتساع حاجز الجهد لوصلة فلز – شبه موصل

٦- ما هى الخطوات الأساسية لتحضير وصلة n – ρ

٧- اشرح بإيجاز حالة إتزان الوصلة n – ρ مع الرسم

٨- اشرح خصائص التقويم بواسطة الوصلة n – ρ

٩- ما أنواع الإنهيار فى الوصلة n – ρ مع كتابة نبذة عن كل نوع

١٠- أكتب نبذة عن كل منهما :

أ) منظمات الجهد .

ب) الدايودات النفقية .

الباب الثالث

الظواهـــر الكهرحراريــة

والجلفانومغنطيســية

الباب الثالث

الظواهر االكهروحرارية والجلفانومغنطيسية

Thermoelectric and Galvanomagnetic phenomena

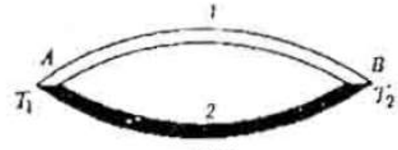
تتضـــمن الظواهـــر الكهروحـــرارية تأثيـــرات سيبك وبلتييه وطومسون . وتتضمن الظواهر الجلفانومغنطيسية تأثيرات هال وايتينج هـــاوزن ونرســـت . ولقـــد وجـــدت بعض هذه الظواهر طريقها إلى التطـــبيقات العمـــلية ، لذلك فإن إمعان النظر فى هذه الظواهر لن يلق اهتماماً من الوجهة التعليمية فحسب بل من الوجهة التطبيقية .

وسنحاول فيما يلى عرض الخلفية الفيزيائية لتلك الظواهر :

(٣-١) تأثير سيبك The Seebeck effect

اكتشف سيبك عام ١٨٢٢ أن قوة دافعة كهربية V_T تتولد فى دائـــرة تـــتكون من موصلين 1 , 2 من مادتين مختلفتين وإذا حفظت الوصلتان A , B لهذين الموصلين فى درجتى حرارة مختلفتين T_2 , T_1 ، الشكل (١ أ) فإن هذه القوة الدافعة الكهربية تسمى " القوة الدافعة

الشكل (١)



(أ)

الكهروحرارية" .

وأوضـــحت التجارب أنه فى مدى ضيق من درجات الحرارة تكـــون القـــوة الدافعـــة الكهروحرارية متناسبة مع الفرق بين درجتى حرارة الوصلتين :

$$V_T = S (T_2 - T_1) \qquad (١)$$

ثابت التناسب هنا يتعين من العلاقة

$$S = d V_T / d_T \qquad (٢)$$

ويســـمى القـــوة الدافعة الكهرحرارية التفاضلية أو النوعية كما يسمى معامل سيبك Seebeck coefficient . ويتوقف على مادة الموصلين وعلى درجة الحرارة .

وتوجد ثلاثة مصادر للقوة الدافعة الكهروحرارية هى :

(١) الـــتيار الاتجاهى لحاملات الشحنة فى الموصل الناتج عند تـــدرج درجـــة الحـــرارة (المركـــبة الحجميـــة V_v Volumetric (component

(٢) تغير موضع منسوب فيرمى (مركبة الوصلة junction (compnent V_d

(٣) انجـراف الالكترونـات بواسـطة الفونونـات (فـيما يسمى بظاهرة الإنحراف الفونونى) وسنناقش فيما يلى الطبيعة الفيزيائية لكل من هذه الظواهر .

(٣-٢) المركبة الحجمية للقوة الدافعة الكهرحرارية

لـنأخذ موصـلاً منـتظماً يظـل الفـرق فى درجة الحرارة $(T_2 - T_1)$ ثابتاً عند نهايتيه A , B ، الشكل (١ ب) ،

ومـن ثم يوجد تدرج فى درجة الحرارة $\frac{dT}{dx}$ فى الاتجاه

(ب)

مـن B إلى A . فيكـون لحاملات التيار فى الطرف الساخن طاقات أكبر وسرعات أكبر عن نظيرتها لحاملات التيار عند الطرف البارد . لهـذا ، يسرى تيار فى الموصل من طرفه الساخن إلى طرفه البارد . يقوم هذا التيار بشحن الموصل .

وجديـر بالذكر أن الحالات التى تقوم الإلكترونات فيها بحمل الـتيار تـؤدى إلى تجمـع شحنات سالبة عند الطرف البارد وشحنات موجـبة عـند الطرف الساخن . ونتيجة لذلك يتولد بين الطرفين فرق جهـد V_d . وهـذا هو المركبة الحجمية للقوة الدافعة الكهروحرارية

وتكون القوة الدافعة الكهروحرارية التفاضلية أو النوعية المناظرة لهذا المركبة هى :

$$S_v = \delta V_v / \delta T \qquad (٣)$$

ويمكن تقدير S_v كما يلى :

يتعين ضغط الغاز الإلكترونى فى موصل من العلاقة :

$$P = 2/3\, n\, \overline{E} \qquad (٤)$$

حيـــث $(\overline{E})$ متوســـط طاقـــة الإلكترونات فى موصل ، n تركيزها . وبتعبين $\overline{E}$ من العلاقة :

$$(٥)\; E = E_F \left(1 + \frac{3}{5} \left(\frac{5\pi^2}{12}\right) \frac{K_B T}{E_F}^2 \right)$$

وينشـــأ عند تدرج درجة الحرارة تدرج فى الضغط ليكافىء ما يولده المجال الكهربى فى الموصل . وبذلك يكون :

$$e\,\varepsilon\, n = \frac{\delta P}{\delta x} = \frac{\delta P}{\delta T}\;\frac{\delta T}{\delta x}$$

ومن هنا يمكن تعيين S_v بسهولة حيث :

$$S_v = \frac{\delta V_V}{\delta T} = \delta \left(\frac{\delta T}{\delta x}\right)^{-1} = \frac{1}{en}\;\frac{\delta P}{\delta T}$$

(٦)

ومن هنا تكون S_v فى موصل من النوع السالب متجهه من الطرف الســـاخن إلى الطـــرف البارد . ومع هذا توجد استثناءات لهذه القاعدة سنناقشها فيما بعد :

(٣-٣) مركبة الوصلة للقوة الدافعة الكهروحرارية

ينشـــأ عن التغير فى درجة الحرارة تغير فى موضع منسوب فيـــرمى . فـــفى موصل من النوع السالب ينخفض منسوب فيرمى فى رسم بيانى الطاقة مع ارتفاع درجة الحرارة .

ونـــتيجة لذلك سيكون منسوب فيرمى عند الطرف البارد أعلى مما هو عليه عن الطرف الساخن كما فى الشكل (٢) . وسيكون الفرق

الشكل (٢)

بين

موضعى منسوب فيرمى مكافئاً للفرق فى الجهد .

$$d V_j = - \frac{1}{e} \frac{\delta \mu}{\delta T} \; dT \qquad (٧)$$

وهـــذا هو بالضبط مركبة الوصلة للقوة الدافعة الكهروحرارية وتكـــون القوة الدافعة الكهروحرارية التفاضلية والنوعية المناظرة لهذا المركبة .

هى :

$$Sj = - \frac{1}{e} \frac{\delta x}{\delta T} \qquad (٨)$$

ومن ثم تكون القوة الدافعة الكهروحرارية التفاضلية المحصلة هى :

$$(٩) \qquad S = \frac{1}{n\,e}\,\frac{\delta P}{\delta T} - \frac{1}{e}\,\frac{\delta \mu}{\delta T}$$

والمعادلة الأخيرة قابلة للتطبيق على الموصلات بجميع أنواعها .

(٣-٤) القوة الدافعة الكهروحرارية فى الفلزات

بالتعويض عن متوسط الطاقة للإلكترونات لغاز الكترونى منحل من المعادلة رقم (٥) فى المعادلة رقم (٤) ، نحصل على العلاقة التالية لضغط الغاز فى الفلز :

$$P = n\overline{E} = n E_F + \frac{n\pi^2}{6 E_F}(K_B T)^2$$

بتفاضل هذه العلاقة بالنسبة لدرجة الحرارة T مع الضرب فى $\frac{1}{ne}$

$$(١٠) \quad \frac{2}{3} \qquad S_v = \frac{2}{5}\,\frac{K_B}{e}\,\frac{\pi^2}{3}\,\frac{K_B T}{E_F}$$

بالتعويض من (٩) ، (١٠) فى (٨) نحصل على :

$$(١١) \qquad S_m = -\frac{\pi^2 K_B}{6e}\,\frac{K_B T}{E_F}$$

ويمكن فى حالة الفلزات الحصول على نتائج أكثر دقة باستخدام العلاقة التى تتناسب فيها طاقة الالكترونات طردياً مع مربع المتجه الموجى . وفى هذه الحالة يمكن الحصول على العلاقة التالية :

$$S_m = \frac{\pi^2 K_B}{3e}\,(1+r)\,\frac{K_B T}{E_F} \qquad (١٢)$$

حيث r الأس الذى ترفع له الطاقة فى العلاقة :

$$\lambda \;\alpha\; E^{r} \qquad (١٣)$$

التى تعبر عن علاقة متوسط المسار الحر للإلكترون بالطاقة .

ويتضـــمن الجــدول ١ قيــم r المناظرة لآليات استطارة اللكترونات المختلفة.

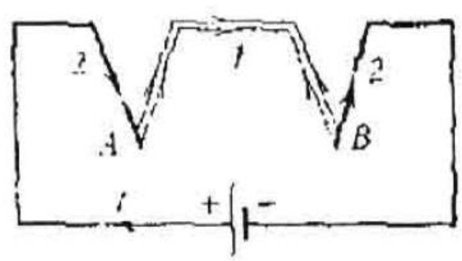
الاستطارة غى الاهتزازات الحرارية

	الشبيكة الذرية	الشبيكة الأيونية $T<\theta$	$T>\theta$	الاستطارة بذرات الشوائب
r		0	½	1

ومن المعادلة (١٢) نتبين أن $S_m \;\alpha\; T^2$ للفلزات فى اتفاق تام مــع النــتائج التجريبية . ونظراً لأن $K_B T << E_F$ فإن القوة الدافعة الكهرحــرارية للفلز تكون صغيرة تماماً . فللفضة على سبيل المثال : $E_F = 5.5\ eV$, $K_B T = 0.025\ eV$ عـــند $T = 300K$ ، بالتعويض عن هذه القيم فى العلاقة (١٢) نحصل على $S_m \approx 8x10^{-6}$ V/K وهى أقرب ما تكون إلى القيمة التجريبية $S_m \approx 8x10^{-6}$ V/K

ومــن المعادلـــة (١٣) نتـــبين أنه عندما تكون $r < 0$ يكون للإلكـــترونات الأكثر طاقة أقصر متوسط مسار حر λ . ونظراً لأن تيـــار الإنتشـــار فى هذه الحالة يكون موجهاً من الطرف الساخن إلى الطـــرف الـــبارد ، ســـتنعكس إشـــارة المركبة الحجمية للقوة الدافعة الكهروحـــرارية . وهـــذا قـــد يســـبب انعكـــاس إشارة القوة الدافعية الكهروحرارية للفلز ككل . مثل هه التأثيرات تتم ملاحظتها على سبيل المثال فى بعض الفلزات الانفعالية وبعض السبائك.

كمـــا سبق أن ذكرنا فإن المعادلة (١٢) تكون صالحة للفلزات عـــندما نـــأخذ فى الأعتـــبار علاقة E_R بمربع المتجه الموجى . وفى الفلزات والسبائك ذات سطح فيرمى المركب ، تختلف اسهامات أجزائه المختـــلفة ليـــس فقط فى القيمة المطلقة بل وفى إشارتها مع الأخذ فى الإعتبار أن القوة الدافعة الكهروحرارية قد تساوى الصفر أو أقرب ما تكـــون إليـــه . وعـــلى ســـبيل المـــثال ، القوة الدافعة الكهروحرارية للرصـــاص تســـاوى الصـــفر . ولهـــذا الســـبب تقـــاس القوة الدافعة الكهروحرارية بالنسبة للرصاص .



الشكل (٣)

يـــتعين اتجـــاه التيار عند الوصلة الساخنة لإزدواج حرارى يتكون من موصل من النوع السالب والرصاص بواسطة قطبية شحنة الموصل .

فــفى الحالــة العادية عندما تكون الوصلة الساخنة للفلز موجبة الشحنة يســرى الــتيار الكهربى من الموصل إلى الرصاص ، الشكل (٣- أ) وفى هذه الحالة تعد القوة الدافعة الكهروحرارية للفلز سالبة .

وفى حالة موصل من النوع السالب ذى شحنة شاذة ، يسرى التيار عند الوصلة الساخنة من الرصاص إلأى الموصل وتكون S موجبة .

وســتكون S موجــبة أيضاً لموصل عادى من النوع الموجب عــندما يكــون طرفه الساخن موجب الشحنة ، الشكل (ج) ويمر التيار عند هذه الوصلة من الرصاص إلى الموصل

(٣-٥) القوة الدافعة الكهروحرارية لشبه موصل

يتعين ضغط الغاز الالكترونى فى شبه موصل غير منحل من العلاقة

$$P = \frac{2}{3} n\overline{E} = n K_B T$$

بالتفاضل بالنسبة لدرجة الحرارة T والضرب فى نحصل على :

$$S_v = \frac{K_B}{e} \left[1 + T \frac{\delta L_n n}{\delta T} \right] \qquad (١٤)$$

ملاحظة :

$$n = 2 \left(\frac{2 \pi m K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{K_B T}}$$

وتؤدى الحسابات الدقيقة إلى أن :

$$S_v = \frac{K_B}{q} \left[r \tfrac{1}{2} + T \frac{\delta L_n n}{\delta T} \right] \qquad (١٥)$$

ويعطى الجهد الكيميائى فى شبه موصل غير منحل بالعلاقة :

$$\mu_n = K_B T\, L_n \frac{n\, h^3}{2\,(2\pi\, mn\, K_B T)^{\frac{3}{2}}}$$

وبتفاضــل μ_n بالنســبة لدرجــة الحرارة والضرب فى $\frac{1}{e}$ نحصل على:

$$(16) \qquad S_j = \left(\frac{K_B}{e} - \frac{3}{2} - \frac{\mu_n}{K_B T}\, T\, \frac{\delta L_n}{\delta T} \right)$$

بالتعويض من (١٥) ، (١٦) فى (٨) نحصل على:

$$S_n = -\frac{K_B}{e}\left(r\ ½ + 2\frac{\mu_n}{K_B T} \right)$$

$$(١٧) \qquad = -\frac{K_B}{e}\; r + 2 + L_n \frac{2\,(2\pi\, m\, K_B T)^{\frac{3}{2}}}{n\, h^3}$$

الإشـارة السـالبة فـى الطـرف الأيمـن تتمشـى مع قطبية القوة الدافعة الكهروحرارية حيث تكون :

$$(١٨)\ \ Sp = \frac{K_B}{e}\left(r + 2 + L_n \frac{2\,(2\pi\, m\, K_B t)^{\frac{3}{2}}}{n\, h^3} \right)$$

ولــنحاول الآن حساب قيمة S لشبه موصل غير نقى ، على سبيل المثال ، لجرمانيوم من النوع السالب $n = 10^{23}\ m^{-3}$ عند T = 300 K . بالتعويض عن هذه القيم فى المعادلة (١٨) نحصل على

$S = 10^{-3}$ V/K . لذلـــك تكـــون القوة الدافعة الكهروحرارية لأشباه الموصلات أكبر بثلاث رتب عن نظيرتها فى الفلزات .

وبالنســـبة لشـــبه موصل يحتوى على حاملات شحنة بنوعيها حيـــث يحمـــل التيار الكهربى كل من الالكترونات والفجوات ، تعطى القوة الدافعة الكهروحرارية بالعلاقة :

$$(19) \quad S_{n,p} = \frac{S_p\, p\, \mu_p - S_n\, n\, \mu_n}{p\, \mu_p + n\, \mu_n}$$

ونتـــبين من هذه العلاقة أنه عند تساوى تركيزات الالكترونات والفجـــوات تتساوى حركيتها ، فإن القوة الدافعة الكهروحرارية الكلية ستكون صغيرة جداً وقد تساوى الصفر .

(٣-٦) إنجراف الالكترونات بواسطة الفونونات

اكتشـــف جوريفـــتش هـــذه الظاهرة عام ١٩٤٥ . فمع تدرج الحـــرارة فى الموصـــل تنســـاق الفونات من طرفه الساخن إلى طرفه البارد بسرعة متوسطة υ_{ph} .

فى وجـــود مـــثل هـــذا الانسياق فإن الالكترونات المستطارة بواســـطة الفونونـــات المنساقة تكون متضمنة فى الحركة الموجهة من الطـــرف الساخن إلى الطرف البارد ، وستكون سرعتها مساوية υ_{ph} تقريباً . تجمع الالكترونات عند الطرف البارد للموصل واستنفادها من الطرف الساخن يؤديان إلى ظهور القوة الدافعة الكهروحرارية υ_{ph} .

وقـــام بيكوس عام ١٩٥٦ بحساب القوة الدافعة الكهروحرارية التفاضـــلية الناشـــئة عن الإنجراف الفوتنى حيث حصل على العلاقة التالية :

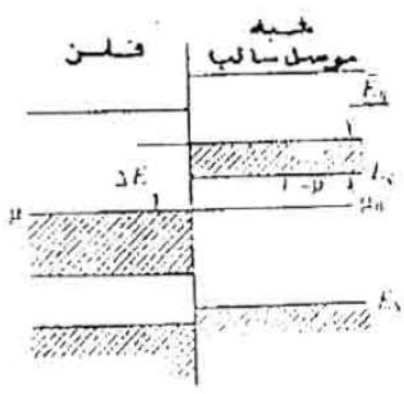
$$S_{ph} = \frac{K_B}{3e} \; \frac{m_n \upsilon^2_{ph}}{K_B T} \; \frac{\tau_{ph}}{\tau_e} \qquad (20)$$

هـــنا υ_{ph} هى سرعة الانسياق الفونونى ، τ_{ph} ، τ_e زمنا التراخى للفونونات والالكترونات على الترتيب .

فى مـــدى درجـــات الحـــرارى المنخفضة ، فإن مركبة القوة الكهروحـــرارية هذه تكون اكبر عشرات ومئات الممرات عن المركبة الحجمية ومركبة الوصلة .

(٣-٧) تأثير بلتييه The Peltier effect

الشكل (٤)



إذا مـــر تيار كهربى I فى دائرة تتكون من موصلين 1 , 2 من مادتين مختلفتين كما الشكل (٤) ، فإن كمية من الحرارة $Q = I^2$ Rt ســتتحرر عــند الوصلتين A , B ، R مقاومة الوصلة ، t زمن مـــرور التيار) نتيجة لتأثير جول. وعندما تكون الوصلتان لموصلين

متماثـــلين فإن هذه الحرارة هى فقط التى ستتحرر ، ومن وجهة النظر هـــذه لا يوجد اختلاف بين الوصلة وبقية الدائرة . لكن فى نفس الوقت وبعيـــداً عـــن الحـــرارة المتولدة بتأثير جول ستتحرر أو تمتص كمية إضـــافية من الحرارة عند الوصلة المكونة من مادتين مختلفتين ، تعمل على تسخين الوصلة فى الحالة الأولى أو تبريدها فى الحالة الثانية .

هـــذه الظاهـــرة اكتشفها بلتييه عام ١٨٣٤ وتسمى لذلك تأثير بلتييه والحرارة الإضافية المحررة أو الممتصة تسمى "حرارة بلتييه" ، Q_p .

وتوضـــح الـــتجارب أن هذه الحرارة تتناسب طردياً مع شدة التيار I وزمن مروره فى الوصلة t.

$$Qp = \Pi I t \qquad (٢١)$$

ثـــابت التناســـب Π يسمى معامل بلتييه . وتتوقف قيمته على المواد المكونة للوصلة ودرجة حرارتها .

يوجد ارتباط مباشر بين تأثير بلتييه وتأثير سيبك ، فالاختلاف فى درجـــة الحـــرارة يســـبب سريان تيار كهربى فى دائرة تتكون من مـــادتين مختلفتين ، وسريان تيار كهربى فى نفس الدائرة يولد فرقاً فى درجـــة الحـــرارة . والعلاقـــة المعـــبرة عن هذا الارتباط ترجع إلى طومســـون (لورد كلفن) الذى وضع أسس نظرية الديناميكا الحرارية للظواهر الكهروحرارية ، حيث يبين أن :

$$S = \Pi / T \quad (٢٢)$$

ويعــزى تأثيــر بلتييه إلى الفرق بين متوسط طاقة الكترونات التوصيل فى المواد المختلفة . فإذا أخذنا فى الأعتبار ، كمثال ، وصلة مــن فلز وشبه موصل غير منحل من النوع السالب (الشكل 4) نتبين بعــد الوصول إلى حالة التزان أن منسوبى فيرمى ينتوحدان . وستسهم فى التوصــيل الكهربى فى الفلز فقط تلك الإلكترونات التى توجد أقرب مــا تكون لمنسوب فيرمى والتى تكون طاقتها المتوسطة مساوية عملياً لطاقة فيرمى .

ولــنرمز لمتوسط طاقة الكترونات التوصيل فى شبه الموصل بالرمــز $\overline{E_n}$. هــذه الطاقــة لاتساوى الطاقة الحرارية للالكترونات $3K_BT/2$ نظــراً لأن الدور النسبى الذى تلعبه الألكترونات الأسرع أكبر من الدور الذى تلعبه الإلكترونات الأبطأ .

وتؤدى الحسابات فى حالة الغاز الألكترونى غير المنحل إلى :

$$\overline{E_n} = (r + 2)\, K_BT \quad (٢٣)$$

حيث r هى الأس فى المعادلة (١٣)

ولــنفرض أن الــتيار الكهربى الذى يسرى فى الوصلة يكون بحيــث تســرى الإلكترونات من شبه الموصل إلى الفلز .نجد أن كل الكــترون يقفز من شبه الموصل إلى الفلز [(الشكل ٢٤)] يحمل طاقة إضافية تساوى :

$$\Delta E = \overline{E_n} + (- \mu_n) \quad (٢٤)$$

هــذه الطاقـــة هى حرارة بلتييه وهى التى تتحرر بالقرب من الوصـــلة . وعندما ينعكس أو يتغير تجاه التيار ، فإن الإلكترونات التى تقفز من الفلز إلى شبه الموصل تمتص حرارة فتبرد الوصلة .

وبقسمة ΔE على شحنة الألكترون نحصل على معامل بلتييه

$$(٢٥) \qquad \Pi_{mn} = - \frac{\Delta E}{e} = - \frac{1}{e} \overline{(E_n - \mu_n)}$$

وبالتعويض عن μ من المعادلة

$$\mu = k_B T L_n \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^3}{2\pi m K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right] e \; -e/k_B T]$$

وبالتعويض عن E_n من المعادلة (٢٥) نحصل على :

$$(٢٦) \pi_{mp} = \left[\frac{K_B T}{e} (r+2) + L_n \frac{2 (2\pi m_n K_B T)^{\frac{3}{2}}}{n' h^3} \right]$$

وثمـــة معادلة مماثلة يمكن الحصول عليها من فلز وشبه موصل من النوع الموجب هى :

$$(٢٧) \; \Pi_{mn} = \frac{K_B T}{e} \left[(r+2) + L_n \frac{2 (2\Pi m_p K_B T)}{n h^3} \right]^{\frac{3}{2}}$$

وبالنسبة لوصلة من فلزين يتعين معامل بلتييه من المعادلة (٢٣) حيث يكون :

$$(٢٨) \qquad \Pi_{1,2} = (S_1 - S_2) T$$

وبالتعويض عن S من العلاقة (١٢) نحصل على :

$$(٢٩) \qquad \Pi_{1,2} = \frac{\pi^2 K^2_B T^2}{3 e} (1 + r) \left(\frac{1}{E_{F1}} - \frac{1}{E_{F2}} \right)$$

(٣-٨) تأثير طومسون The Thoms on effect

لنتصـــور موصلا متجانساً AB يتميز بوجود تدرج فى درجة الحرارة $\frac{dT}{dx}$ على امتاد طوله يحمل تياراً كهربياً I ، ارجع للشكل (٣-١ ب) . ولقـــد تنبأ طومسون نظرياً . أن فى مثل هذا الموصل ، وبعيـــداً عـــن الحرارة المتولدة بتأثير جول ، تتحرر أو تمتص كمية إضـــافية من الحرارة Q_τ تتناسب طردياً مع شدة التيار I والفرق فى درجة الحرارة $(T_2 - T_1)$ والزمن t ، يتوقف هذا على اتجاه التيار :

$$Q_\tau = \tau I (T_2 - T_1) t \qquad (٣٠)$$

كميـــة الحـــرارة $Q\tau$ تسمى حرارة طومسون وثابت التناسب τ يسمى معـــامل طومسون ويتوقف على مادة الموصل وعلى درجة الحرارة . وتـــبعاً لـــنظرية طومسون ، فإن معاملى طومسون لموصلين يرتبطان بالقوة الدافعة الكهروحرارية التفاضلية بالعلاقة :

$$\frac{d S_{1,2}}{dt} = \frac{\tau_1 - \tau_2}{T} \qquad (٣١)$$

ويعـــزى تأثيـــر طومسون إلى أنه فى الموصل الذى يوجد به تدرج فى درجة الحرارة لا يحمل فيض حاملات الشحنة الكهربية فقط بـــل والحرارة أيضاً . ولنفرض أن التيار فى الموصل AB ، الشكل ١ - ب يســـرى فى الاتجـــاه المـــناظر لسريان الإلكترونات من الطرف الساخن B إلى الطرف البارد A . الإلكترونات الساخنة بوصولها إلى

المـــناطق الـــباردة تعطى طاقتها الزائدة التى تقوم بتسخين الموصل . وعندما ينعكس اتجاهه يبرد الموصل .

وفى الحســـابات الكميـــة لـــتأثير طومســـون ينبغى الأخذ فى الحسبان أن القوة الدافعة الكهروحرارية المتولدة فى الموصل تعمل فى الحالـــة الأولى عـــلى رد الإلكـــترونات وتعمل فى الحالة الثانية على تعجيـــلها . هـــذه القـــوة الدافعـــة الكهروحرارية لا تغير مقدار معامل طومسون فحسب بل واشارته .

(٣-٩) الظواهر الجالفانومغنطيسية

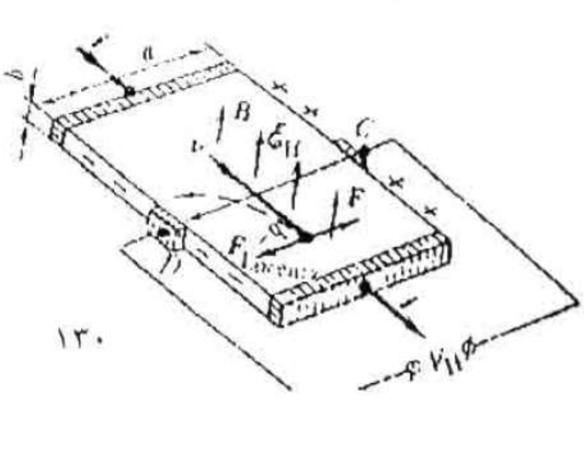
Galvanomagnetie phenomena

<u>(١) تأثير هال The Hall effect</u>

لنفرض تياراً كثافته J يسرى فى موصل اتساعه a وسمكه b الشـــكل (٥) ولـــنأخذ نقطـــتين C , D على وجهى الجانبين المتقابلين بحيـــث يكـــون الفرق فى الجهد بينهما يساوى الصفر . إذا وضعنا هذا الموصل فى مجال مغنطيسى كثافة فيضه B سيظهر فرق جهد V_H بين النقطتين C , D سمى جهد هال .

الشكل (٥)

الشكل (٥)



وتوضـــح الـــتجارب العملية أنه فى حالة مجال مغنطيسى لايكون قوياً بدرجة كافية :

$$V_H = R_H\, B\, J\, a \qquad (٣٣)$$

ثـــابت التناســـب R_H يســـمى معـــامل هال . وأبعاده $L^3\, I^{-1}\, T^{-1}$ ووحدته متر مكعب لكل كولوم (m^3 / C) . ولنأخذ الآن فى الإعتبار منشأ تأثير هال .

قـــوة لورنـــتز $F_{lorentz}$ المؤثرة على الكترون يتحرك من اليمين إلى اليسار بسرعة v ، الشكل(٥) تتعين من العلاقة :

$$F_{Lorentz} = e\, v \times B$$

وإذا كانت v عمودية على B فإن القوة تتعين من :

$$F_{lorentz} = e\, v\, B$$

وتحـــرف قوة لورنتز الإلكترونات نحو الوجه الخارجى متخذة المســـار المـــتقطع فى الشكل ، ويكتسب هذا الوجه شحنة سالبة ، بينما يكتسب الوجه المقابل شحنة موجبة . ويتولد عن هذا مجال كهربى ε_H اتجاهه من C إلى D .

$$\varepsilon_H = V_H / a$$

حيث V_H هو فرق الجهد بين D , C وهو كما ذكرنا جهد هال.

وينشـــأ عـــن المجـــال ε_H قـــوة $F = e\, \varepsilon_H$ تؤثـــر على الإلكـــترونات وتعمل فى اتجاه مضاد لقوة لورنتز . وعندما تكون $f =$

$F_{larentz}$ لا يــتكون مــزيد مــن الشــحنات عــلى الوجهين المتقابلين للموصل.

من شروط الأتزان :

$$e\,\nu\,B = e\,\varepsilon_H \qquad (٣٤)$$

ومن ثم يكون :

$$\varepsilon_H = \nu\,B$$

وبضــرب طــرفى هــذه العلاقة فى المسافة a بين النقطتين C , D نحصل على :

$$V_H = a\,\varepsilon_H = \nu\,B\,a$$

وحيث أن :

$j = e\,n\,\nu$ وبالتالى تكون $\nu = j/e\,n$ فإن

$$V_H = \frac{1}{ne}\,B\,j\,a \qquad (٣٥)$$

وهكــذا نحصــل نظرياً على علاقة تعبر عن V_H مماثلة لتلك المستنتجة عملياً لذلك يكون معامل هال هو :

$$R_H = \frac{1}{ne} \qquad (٣٦)$$

ويترتب على المعادلة (٣٦) أنه بمعرفة القيمة المطلقة لمعامل هــال وإشــارته يمكنــنا إيجــاد تركيز حاملات الشحنة فى الموصل وإشــارتها أو نوعها . ففى موصل من النوع السالب (حاملات الشحنة الكــترونات) تكــون إشــارة R_H ســالبة ، وفى الــنوع الموجــب (حاملات الشحنة فجوات) تكون إشارة R_H موجبة .

وإذا قسنا إضافة لذلك الموصلية الكهربية $\sigma = e\,n\,\mu$ للموصل. فإنه يمكننا حساب حركية حاملات الشحنة μ من العلاقة

$$R_H\,\sigma = \mu_H \qquad (٣٧)$$

الحركية μ_H المعينة من العلاقة (٣٧) والتى تسمى حركية هال Hall mobility قد لا تتطابق مع حركية الانسياق المعينة من العلاقة $\mu = v_d / \varepsilon$.

وجديـــر بالذكـــر أن استنتاج العلاقة (٣٦) تم بافتراض أن كل حـــاملات الشحنة لها نفس السرعة v . مثل هذا الإفتراض صحيح فى حالـــة الفـــلزات وأشباه الموصلات المنحلة لكنه ليس مقبولاً فى حالة أشـــباه الموصـــلات غيـــر المنحلة التى تتوزع فيها سرعات حاملات الشـــحنة تـــبعاً لدالـــة بولتزمان . وفى مثل هذه الحالة فإن، الحسابات الدقيقة تؤدى إلى :

$$R_H = A / en \qquad (٣٨)$$

حيـــث A ثابت يتوقف على آلية الاستطارة لحاملات الشحنة فى البلورة وقيم A موضحة فى الجدول الآتى :

الاستطارة بالأهتزازات الحرارية

جدول (٢)

	الشبكية الذرية	الشبكية الأيونية		الاستطارة بأيونات الشوائب
		$r \leq \theta$	$T \geq \theta$	
A	1.17	0.99	1.11	1.93

وفى أشِــباه الموصـــلات ثــنائية القطـــبية تحمـــل التيار آنياً كل من الالكترونات والفجوات .

ونظـــراً لأن شـــحناتها متضـــادة وأنهـــا تتحرك فى إتجاهين متضـــادين فى مجال كهربى ، فإن قوة لورنتز $F_{Lorentz} = e\,\nu \times B$ نحـــرفها فى نفس الاتجاه . وبسبب هذا يكون جهد هال ومعاملات هال أصغر من نظيرتها فى شبه موصل أحادى القطبية .

وفى أشباه الموصلات ثنائية القطبية يتعين معامل هال من العلاقة :

$$R_H = \frac{A\,(\mu_p - \mu_n)}{N_i\, e\,(\mu_p + \mu_n)} \qquad (٣٩)$$

حيث n , p تركيز الالكترونات والفجوات على الترتيب ، μ_p , μ_n حركتيها وتتوقف إشارة R_H على أى الحدين فى البسط أكبر . R_H موجب .

وفى شبه الموصل النقى حيث يكون $n = p = n_i$ تأخذ العلاقة السابقة الشكل :

$$R_H = \frac{A}{n_i\, q}\,\frac{\mu_p - \mu_n}{\mu_p + \mu_n} \qquad (٤٠)$$

ويـــترتب على هذه العلاقة أن إشارة معامل هال تتعين بنوع حـــاملات الشحنة ذات الحركية الأكبر فى المدى الذى تسلك فيه أشباه الموصـــلات ســـلوك أشباه الموصلات النقية . وكقاعدة تكون حاملات الشحنة هذه هى الكترونات . لذلك عندما يتحول شبه موصل غير نقى من النوع الموجب إلى شبه موصل نقى تتغير إشارة معامل هال .

ويوضـــح الجـــدول (٣) معاملات هال لبعض الفلزات وبعض أشباه الموصلات النقية (فى درجة حرارة الغرفة) .

الجدول (٢)

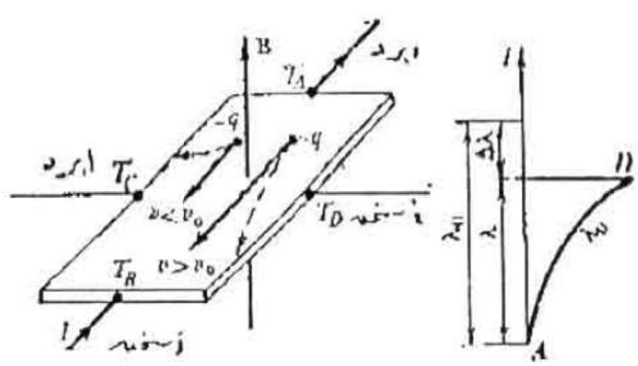
	Cu	Zn	Bi	Ge	Si
RH (10^{-11} m^3 / c)	5.5	3.3	10^3	10^{10}	10^{13}

ومن هذا الجدول نتبين أن معامل هال لأشباه الموصلات أكبر بعـــدة رتـــب مـــن نظيـــره للفلزات . تفسير هذا يرجع إلى أن تركيز حـــاملات الشـــحنة فى أشـــباه الموصلات أقل كثيراً من تركيزها فى الفـــلزات مع أن حركيتها من ناحية أخرى أكبر كثيراً من نظيرتها فى الفلزات .

٢) تأثير ايتنج هاوزن Ettingshausen effect

تــتفاوت السرعات الحرارية للإلكترونات فى أشباه الموصلات غير المنحلة تفاوتاً كبيراً وفى مثل هذه الظروف تصبح المعادلة (٣٤) غيــر صــالحة لجميع الإلكترونات دائماً ، فقط لتلك الألكترونات التى تكــون متوسطات سرعاتها ν_0 . وبالنســـبة للإلكترونات التى تكون ســرعتها $\nu > \nu_0$ ســيكون $evB < e\ \varepsilon_{II}$ وعندئذ ستنحرف هذه

الشكل (٦)



(أ) (ب)

الإلكــترونات نحــو الوجــه الأيمن للموصل ، الشكل (٦أ) . وبالنسبة للإلكــترونات الــتى تكــون سرعتها $\upsilon < \nu_0$ سيكون $evB > e\ \varepsilon_{II}$ وعندئذ ستنحرف نحو الوجه الأيسر للموصل .

الإلكــترونات الأســرع الــتى تصل إلى الوجه الأيمن تفقد طاقتها إليه وتــؤدى بالــتالى إلى ســخونته . والألكترونات الأبطأ التى تصل إلى الوجه الأيسر تعوض ما ينقصها من طاقة على حساب الطاقة الحرارية

للبـــلورة ومـــن ثم تؤدى إلى برودتها . ولهذا يتولد فرق عرضى فى درجة الحرارة $T = T_D - T_C$ وتعرف هذه الظاهرة بإسم تأثير ايتنج هـــاوزن (مصطلح عرضى يرجع إلى أنه عمودى على اتجاه سريان التيار)

(٣) تأثير نيرمست Nenst effect

مـــن المعـــروف أن الإلكترونات التى تدخل مجالاً مغناطيسياً منـــتظماً B عمودى على اتجاه سرعاتها v تبدأ فى الحركة فى مسار دائرى نصف قطره

$$r = \qquad (٤١)$$

ويـــترتب عـــلى المعادلة (٤١) أن الإلكترونات الأسرع تدور تحـــت تأثيـــر المجـــال المغناطيسى بمعدل أقل من الإلكترونات الأبطأ .... لذلـــك يكـــون الوجه الأمامى للموصل أكثر غنى بالإلكترونات الســـاخنة ويكون الوجه الخلفى للموصل أكثر غنى بالإلكترونات الأبطأ ونتيجة لذلك يسخن الوجه الأمامى ويبرد الوجه الخلفى . ويتولد نتيجة لذلك فرق طولى فى درجة الحرارة هو $(T_B - T_A)$. وهذا هو تأثير نيرمست .

(٤) المقاومة المغنطيسية

فى شكل (٦ - ب) يتضح أن مسارات الإلكترونات فى مجال مغنطيســـى بســـرعات تختلف عن v_o تكون مسارات منحنية . ويؤدى هذا إلى إنقاص متوسط المسار الحر الفعال لها

فى إتجـاه التيار الكهربى . وإذا كان متوسط المسار الحر فى اتجـاه الـتيار فى حالـة عدم وجود المجال المغناطيسى هو λ_o . وتحـت تأثيرالمجال المغناطيسى يكون مساوياً مسقط القوس AD على اتجاه التيار J ، أى أن :

$$\lambda = \lambda_o - \Delta\lambda$$

وحيـث أن حـركية حـاملات الشحنة μ تتناسب طردياً مع متوسـط المسـار الحـر ، فإن النقص $\Delta\lambda$ فى متوسط المسار الحر سيؤدى إلى نقص فى الحركية $\Delta\mu$ وإلى نقص فى الموصلية الكهربية $\Delta\sigma$ لشبه الموصل بحيث يكون :

$$\Delta\sigma / \sigma = \Delta\mu / \mu = \Delta\lambda / \lambda_o$$

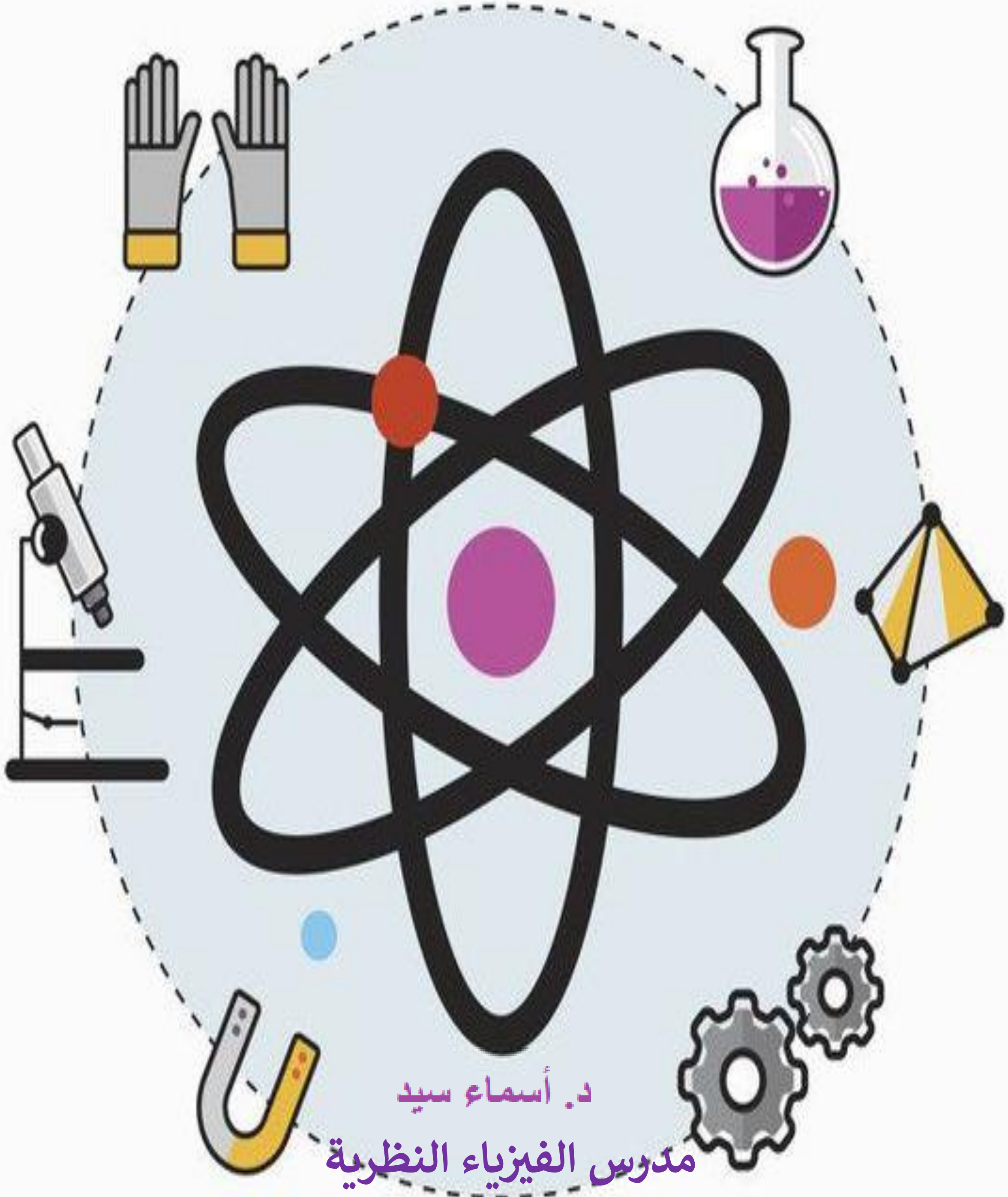
وتـزودنا الدراسـات الـنظرية بعلاقة تربط بين الزيادة فى المقاومة النوعية لشبه موصل غير نقى أحادى القطبية :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = C\mu^2 B^2 \qquad (٤٢)$$

حيث B كثافة الفيض المغنطيسى ، C ثابت يتوقف على آلية استطارة حاملات الشحنة .

النسـبة $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ تسـمى المقاومة النوعية المغنطيسية . ويترتب على العلاقـة (٤٢) أنـه بقياس المقاومة النوعية المغنطيسية يمكن للمرء مباشرة إيجاد حركية حاملات الشحنة .

تطبيقات نظرية الكم



د. أسماء سيد

مدرس الفيزياء النظرية

كلية العلوم- جامعة جنوب الوادي

2022-2023

Chapter Three

Free Particle الجسيم الحر

سيكون الجسيم الحر التطبيق الاول لاسس الميكانيك الكمي التي عرضت في الفصل الثاني وسنبحث في هذا الفصل الصفات الكمية للجسيم الحر في بعد واحد وفي ثلاث ابعاد.

الجسيم الحر: هو الجسيم الذي لايتعرض الى اي قوة اي ان الجسيم يتحرك بحرية اي طاقته الكامنه مساوية الى صفر $V(x)=0$

نفرض ان جسيم كتلته m يتحرك ببعد واحد على امتداد المحور السيني في مجال جهد يساوي صفر اي ان الطاقة الكامنة $V(x)=0$ تساوي صفر

معادلة شرودنكرالغيرمعتمدة على الزمن في بعد واحد

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

$$V(x)=0 \quad \rightarrow \quad \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=E\psi(x)$$

نضرب في $\frac{-2m}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

$$\because \quad E=\frac{1}{2}mv^2=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$$\therefore \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \qquad (1)$$

الحل العام للمعادلة (1) تكون بالشكل التالي

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

حيث A ، B ثابتين اختياريين

ويمكن اعتبار الدالة e^{ikx} تمثل حركة جسيم يمتلك زخم $\hbar k$ وطاقة $(\frac{\hbar^2 k^2}{2m})$ ويتحرك بالاتجاه الموجب على المحور السيني (x) ، بينما الدالة e^{-ikx} تمثل حركة جسيم بالاتجاه السالب على المحور السيني ويفترض ان هذا الجسيم يمتلك نفس الزخم ونفس الطاقة

والان نطبق الحل على بعض الحالات الخاصه للجسيم الحر

1. الحالة الاولى:

اذا كان الجسيم يتحرك بالاتجاه الموجب على المحور السيني فان الدالة التي تصف حركة هذا الجسيم هي

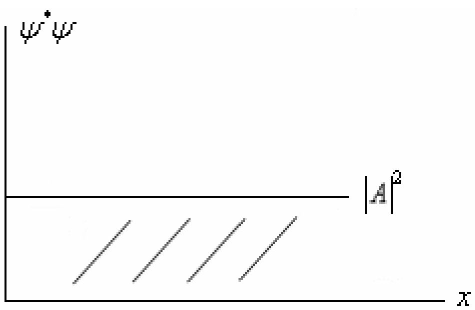
$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

وكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = A^* e^{-ikx} A e^{ikx}$$

$$= A^* A = |A|^2$$

وعند رسم $|\psi(x)|^2$ مع x نحصل على الرسم البياني المبين



وهذا يعني ان كثافة الاحتمالية عند اي نقطة تساوي مقدار ثابت

2. الحالة الثانية:

ولما كان الجسيم يتحرك بالاتجاه السالب على المحور السيني فان الدالة التي تصف حركة هذا الجسيم هي

$$\psi(x) = Be^{-ikx}$$

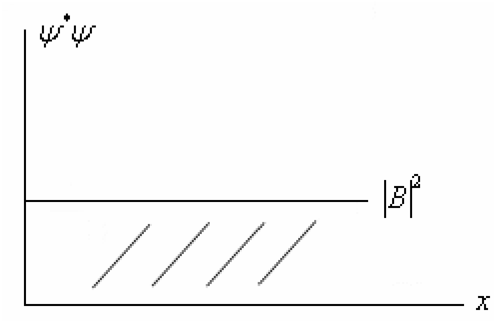
فكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = B^* e^{ikx} B e^{-ikx}$$

$$= B^* B = |B|^2$$

وعند رسم الرسم البياني بين $|\psi(x)|^2$ ، x نحصل على

وهذا يعني ان كثافة الاحتمالية عند اي نقطة تساوي مقدار ثابت



3. الحالة الثالثة

اذا اخذنا حركة الجسيم في كلا الاتجاهين

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

فكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = (A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx})(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})$$

$$= A^*A + B^*B + A^*Be^{-2ikx} + B^*Ae^{2ikx}$$

فاذا جعلنا $A = B$ اي ان عدد الجسيمات متساويه في كلا الاتجاهين

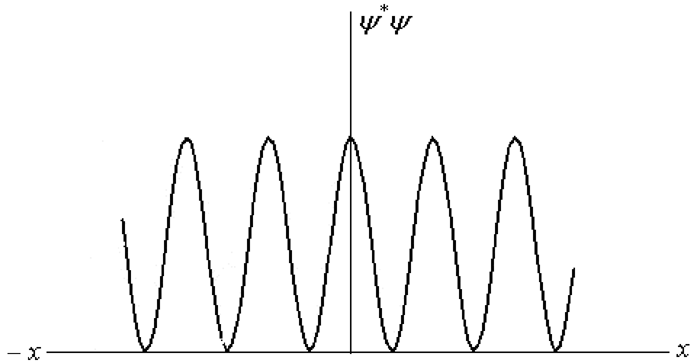
$$|\psi(x)|^2 = 2A^*A + A^*A\,(e^{2ikx} + e^{-2ikx})$$

$$= 2A^*A(1 + \tfrac{1}{2}(e^{2ikx} + e^{-2ikx})$$

$$= 2A^*A(1 + \cos 2kx)$$

$$= 4A^*A\cos^2 kx$$

وعند رسم $|\psi(x)|^2$ مع x نحصل على الشكل وهذا يشير الى ان الاحتمالية تتغير مع الموقع x



وبما ان الثابت k يمكن ان ياخذ اي قيمة وكذلك الطاقة E لان لاتوجد شروط حدودودية في حل معادلة الجسيم الحر وبذلك نحصل على طيف متصل من الطاقة. ولذلك نستطيع القول ان طاقة الجسيم الحر تكون غير مكممه.

ان مسألة الجسيم الحر تدلنا على احد التطبيقات لمبدأ اللاتحديد لها يزنبرك ، ولما كانت الدالة e^{+ikx} تصف حالة الجسم الذي زخمه $\hbar k$ وهذا مقدار ثابت فاننا نعرف زخمه بدقة كاملة (اي اللاتحديد في زخمه $\Delta p = 0$) وهذا يعني وفق مبدأ اللاتحديد $\Delta p \Delta x \geq \hbar$ عدم معرفة موقع الجسيم بصورة كاملة اي $\Delta x = \infty$

Q) Using the uncertainty Principle show that the variance in defining the position of a free particle is infinite.

<u>Solution</u>:

$$\Delta p \, \Delta x \geq \hbar$$

$$\because \ p_x = \hbar k \quad \text{For free particle}$$

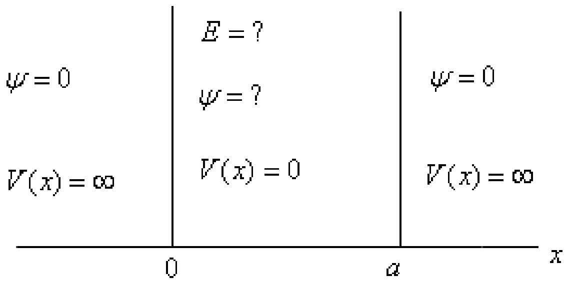
$$\therefore \ \Delta p_x = 0$$

$$\therefore \ \Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} = \frac{\hbar}{\text{zero}} = \infty$$

$$\therefore \ \Delta x = \infty$$

Particle in Potential Box جسيم في صندوق

نفرض ان جسيما كتلته (m) مقيد الحركة داخل صندوق في المنطقة بين ($x=0$ ، $x=a$) وطاقته الكلية E وطاقته الكامنة تتخذ على النحو الاتي وكما مبين في الشكل



$$V(x)=\begin{cases}0 & 0\le x\le a\\ \infty & 0\ge x\ge a\end{cases}$$

ولما كانت حركة الجسيم في المنطقة المحصورة بين $x=0$ ، $x=a$ ونظرا لوجود جدران صلبة عند نهايتي الصندوق اي ان ($V(x)=\infty$) فان الجسيم لايستطيع ان يخترق الجدران وينفذ الى الخارج عند اصطدامه بها وعليه فان حركته تكون مقيدة بين جدران الصندوق.

وتتصرف الالكترونات الحرة في المعادن بطريقة مشابهة فعند اهمال تصادم الالكترونات مع الايونات الموجبة يكون ارتفاع الجهد اكبر بكثير من طاقة الالكترونات الحركية وبمقدور الالكترونات ان تتحرك بحرية في المعدن ولكن لايمكن الافلات منه

وترجع اهمية هذه المسالة الى كونها تسلط اضواء على حركة الجسيم في حيز محدد وتكمم طاقة الجسيم.

ولدراسة حركة هذا الجسيم نستخدم معادلة شرودنكرالغيرمعتمدة على الزمن وسندرس بعض الحالات .

1. **الحالة الاولى** : في المنطقة ($0\ge x\ge a$) فان الحل المحتمل الوحيد لمعادلة شرودنكر هو ان $\psi(x)=0$ طالما ان $V(x)=\infty$ وبدوره فان كثافة الاحتمالية $|\psi(x)|^2=0$ وبالتالي فان احتمالية ايجاد الجسيم خارج الصندوق تساوي صفر.

2. **الحالة الثانية** : عندما يكون الجسيم داخل الصندوق حيث ($V(x)=0$) في ($0\le x\le a$)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\,\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi(x)=0 \qquad ، \qquad V(x)=0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \quad ، \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad ، \quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

حل هذه المعادلة يكون

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

ولايجاد المقدارين الثابتين A ، B نستخدم الشرطين الحدوديين الاتيين

دالة الموجة تتلاشى وتصبح قيمتها صفر عندما $x=0$ وعند $\mathrm{x=a}$

1. $\psi(x=0)=0$
2. $\psi(x=a)=0$

اولا عند $x=0$

$$A+B=0 \longrightarrow A=-B$$

$$\psi(x)=A(e^{ikx}-e^{-ikx})$$

وباستخدام طريقة اويلر $e^{\pm i\theta}=\cos\theta\pm i\sin\theta$

$$\therefore\ \psi(x)=A(\cos kx+i\sin kx-\cos kx+i\sin kx)$$

$$\therefore\ \psi(x)=2iA\sin kx$$

$$\psi(x)=C\sin kx$$

حيث $C=2iA$

ثانيا عند $\mathrm{x=a}$

$$\psi(x=a)=C\sin ka=0$$

الثابت C لايمكن ان يساوي صفر

$$\therefore\ \sin ka=0 \longrightarrow ka=n\pi$$

$$\therefore\ k=\frac{n\pi}{a}$$

حيث n يمثل عدد صحيح موجب $n=1,2,3,\cdots\cdots$

وعند التعويض عن قيمة k نحصل على دالة الموجة وكذلك قيم طاقة الجسيم

$$\psi_n(x)=C\sin(n\pi x/a)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow \qquad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$ (قيم الطاقة الذاتية لجسيم يتحرك في صندوق)

نستطيع ان نستنتج جملة من النقاط المهمة

1. طاقة الجسيم داخل الصندوق تكون مكممة اي لايمكن ان تكون اختيارية بل تاخذ قيم محددة (مكممة) فهذه القيم تشكل مستويات الطاقة

(Zero Point Energy) $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ $\quad n = 1$

الحالة الارضية

$E_2 = 4E_1 \quad n = 2$

$E_3 = 9E_1 \quad n = 3$

$E_4 = 16E_1 \quad n = 4$

فيطلق على اوطأ مستوى طاقة المميز بـ $n = 1$ بالحالة الارضية اما الحالات المستويات الاخرى يمكن تحديدها بالاعداد الكمية 4,3,2.......... فيطلق عليها بالحالات المتهيجة

$n = 4$ ______________________ $E_4 = 16E_1$

$n = 3$ ______________________ $E_3 = 9E_1$

$n = 2$ ______________________ $E_2 = 4E_1$

$n = 1$ ______________________ $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

2. لايمكن العدد الكمي n يساوي صفر وهذا يعني عدم وجود موجة او جسيم
3. ان الطاقة تتناسب مع a^{-2} فزيادته عرض الصندوق (a) فانها ستؤدي الى قيم طاقة اكثر تقاربا وعندما تقترب (a) من المالانهاية فان مستويات الطاقة تقترب مع بعضها وتصبح متصلة وهذه الحالة مشابهة للاطياف الذريه المستمره.

لايجاد الثابت C للمعادله $\psi_n(x) = C\sin(n\pi x/a)$ نستخدم الشرط العياري للدالات الموجية اي ان

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)\ dx = 1$$

$$\int C^* \sin(n\pi x/a)\ C\ \sin(n\pi x/a)\ dx = 1$$

$$C^2 \int_0^a \sin^2(n\pi x/a)\ dx = 1$$

وباستخدام $\sin^2\theta = \frac{1}{2}(1-\cos 2\theta)$

$$\frac{1}{2}C^2 \left\{ \int_0^a dx - \int_0^a \cos(2n\pi x/a)\ dx \right\} = 1$$

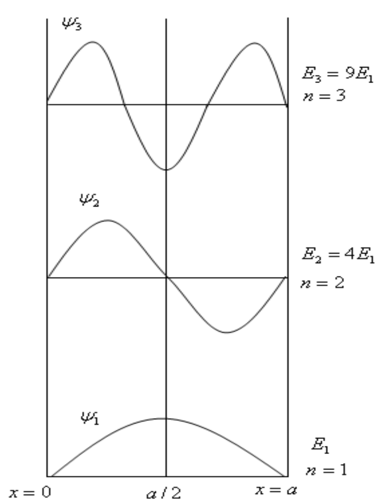
$$\tfrac{1}{2}C^2 \left\{ x\Big|_0^a - (\frac{a}{2n\pi})\sin(2n\pi x/a)\Big|_0^a \right\} = 1$$

$$\tfrac{1}{2}C^2\{(a-0)-(a/2n\pi)(0-0)\} = 1$$

$$\tfrac{1}{2}C^2 a = 1 \longrightarrow \qquad C = \sqrt{\tfrac{2}{a}}$$

$$\therefore \quad \psi_n(x) = \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)$$

والشكل يوضح الدالات الموجية الثلاثة الاولى ψ_1 ، ψ_2 ، ψ_3



Q1) What is the energy for the particle described by the wave function $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi\, x/a)$ and move along the interval $0\le x\le a$.

Solution:

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

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

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cdot\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi\, x/a)$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\{\sqrt{\tfrac{2}{a}}\cdot\frac{n\pi}{a}\cdot\cos(n\pi\, x/a)\}$$

$$=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cdot\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi\, x/a)$$

$$=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\psi_n$$

$$\therefore\quad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Q2) What is the momentum square for the particle described by the wave function $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)$ and move along the interval $0\le x\le a$.

Solution:

$$\hat{A}\psi_n = a_n\,\psi_n$$

$$\hat{p}^2\psi_n = p_n^2\,\psi_n$$

$$=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\tfrac{2}{a}}\ \sin(n\pi x/a)$$

$$=-\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}\{\sqrt{\tfrac{2}{a}}\ \frac{n\pi}{a}\ \cos(n\pi x/a)\}$$

$$=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}\sqrt{\tfrac{2}{a}}\ \sin(n\pi x/a)$$

$$=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}\ \psi_n$$

$$\therefore\quad p_n^2=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

Q3) Show that the wave function that described particle move in a potential box are orthogonal

Solution:

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_m \, dx = 0 \qquad \text{Orthogonal} \quad (\text{متعامدة})$$

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_m \, dx = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi\, x/a) \cdot \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(m\pi\, x/a)\, dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin(n\pi\, x/a) \cdot \sin(m\pi\, x/a)\, dx$$

وباستخدام العلاقة $\quad \sin\alpha\, x \sin\beta\, x = \frac{1}{2}\{\cos(\alpha-\beta)\,x - \cos(\alpha+\beta)\,x\}$

$$\frac{1}{a}\int_0^a \{\cos(n-m)\pi x/a - \cos(n+m)\pi x/a\}\, dx$$

$$\frac{1}{a}\{\frac{a}{(n-m)\pi}\sin(n-m)\pi\, x/a - \frac{a}{(n+m)\pi}\sin(n+m)\pi\, x/a\}\Big|_0^a$$

$$\frac{1}{a}\{\frac{a}{(n-m)\pi}\sin(n-m)\pi - \frac{a}{(n+m)\pi}\sin(n+m)\pi\}$$

$\because \quad (n-m)$ and $\quad (n+m)$ are integer

$$\therefore \quad \int_0^a \psi_n^* \psi_m \, dx = 0$$

Q4) Show that the wave function that described particle move in a potential box are normalized

Solution:

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_n \, dx = 1 \qquad \text{normalized} \quad (\text{عيارية})$$

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_n \, dx = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) \cdot \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) \; dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2(n\pi x/a) \, dx$$

$\sin^2\theta = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta)$ وباستخدام العلاقة

$$\therefore \quad = \frac{2}{a} \int_0^a \{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2n\pi x/a)\} \; dx$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a dx - \frac{1}{a} \int_0^a \cos(2n\pi x/a) \, dx$$

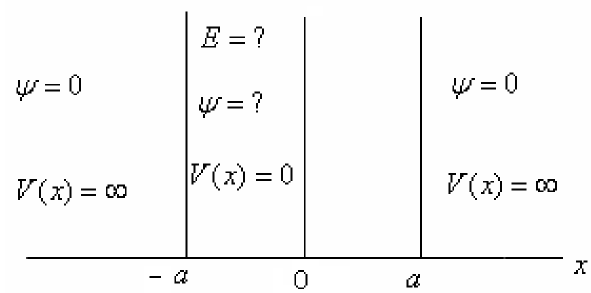
$$\frac{1}{a}(x)\Big|_0^a - \frac{1}{a} \frac{a}{2n\pi} \sin(\frac{2n\pi x}{a})\Big|_0^a$$

$$\frac{1}{a}(a - 0) - \frac{1}{2n\pi} \sin(2n\pi)$$

$$\because \; n \text{ is integer} \quad \Rightarrow \quad \sin 2n\pi = 0$$

$$\therefore \; \int_0^a \psi_n^* \psi_n dx = 1$$

مثال :ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل كما بالشكل ويوصف بالتالي:



$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| > a \end{cases}$$

وأثبت أن

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A\sin(n\pi x/2a) & n \text{ is even} \\ B\cos(n\pi x/2a) & n \text{ is odd} \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \; A = B = \sqrt{\tfrac{1}{a}}$$

Solution :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad ، \quad V(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad ، \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad ، \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

ولايجاد المقدارين الثابتين A ، B نستخدم الشرطين الحدوديين الاتيين

دالة الموجة تتلاشى وتصبح قيمتها صفر عندما $x = -a$ وعند $x = a$

عند $x = a$

$$A\sin ka + B\cos ka = 0$$

عند $x = -a$

$$-A\sin ka + B\cos ka = 0$$

وهاتان المعادلتان تعطينا

$$-A\sin ka = B\cos ka = 0$$

وحيث A ، B كلاهما لايمكن ان يساوي صفر لان ذلك يعني ان ψ في كل مكان وكذلك فان $\cos ka$, $\sin ka$ لايمكن ان كلاهما صفر في وقت واحد لهذا السبب فان الحلين المحتملين الوحيدين للمعادلة هما :

اما $A=0$ و $\cos ka=0$ a

او $B=0$ و $\sin ka=0$ b

وهاتان النتيجتان تتضمنا المعنى التالي

$$ka=\frac{n\pi}{2}$$

حيث n عدد فردي للحالة a وعدد زوجي للحالة b وهكذا يكون الحلان المحتملان كما هو ات

وعند التعويض عن قيمة k نحصل على دالة الموجة وكذلك قيم طاقة الجسيم

$$\psi_n(x)=B\sin(n\pi x/2a) \qquad n \text{ عدد زوجي}$$

$$\psi_n(x)=A\cos(n\pi x/2a) \qquad n \text{ عدد فردي}$$

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{8ma^2}$$

لايجاد الثابت B للمعادله $\psi_n(x)=B\sin(n\pi x/2a)$ نستخدم الشرط العياري للدالات الموجية اي ان

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)\ dx=1$$

$$\int B^*\sin(n\pi x/2a)\ B\sin(n\pi x/2a)\ dx=1$$

$$B^2\int_{-a}^{a}\sin^2(n\pi x/2a)\ dx=1$$

وباستخدام $\sin^2\theta=\frac{1}{2}(1-\cos 2\theta)$

$$\frac{1}{2}B^2\left\{\int_{-a}^{a}dx-\int_{-a}^{a}\cos(n\pi x/a)\ dx\right\}=1$$

$$\tfrac{1}{2}B^2\left\{x\Big|_{-a}^{a}-\left(\frac{a}{n\pi}\right)\sin(n\pi x/a)\Big|_{-a}^{a}\right\}=1$$

$$\tfrac{1}{2}B^2\{(2a-0)-(a/n\pi)(0-0)\}=1$$

$$\tfrac{1}{2}B^2 2a=1 \longrightarrow \qquad C=\sqrt{\tfrac{1}{a}}$$

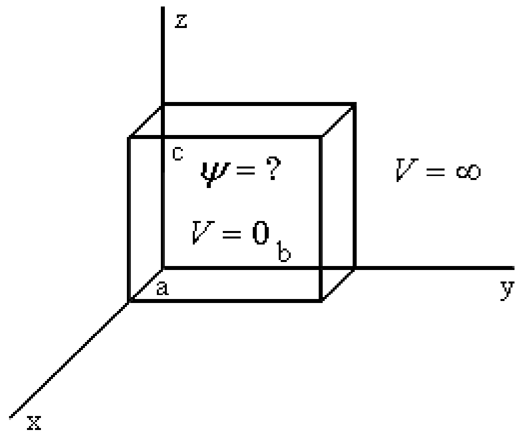
$$\therefore \quad \psi_n(x)=\sqrt{\tfrac{1}{a}}\sin(n\pi x/a)$$

وبنفس الطريقة يمكن ايجاد الثابت A

Particle in Potential Box in three dimensions جسيم في صندوق في ثلاث ابعاد

سنبحث الان حالة الجسيم الحر في داخل صندوق الذي ابعاده a ، b ، c على التوالي ولنفرض ان اضلاع الصندوق مطابقة للمحاور الكارتيزية (x ، y ، z) ونقطة الاصل 0 تقع في احد زواياه كما في الشكل.

داخل الصندوق يكون الجهد $V = 0$ اما خارج الصندوق فان $V = \infty$



معادلة شرودنكرالغيرمعتمدة على الزمن داخل الصندوق

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

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2} + k^2\psi(x,y,z) = 0 \quad \ldots\ldots\ldots *$$

حيث ان $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

ولحل المعادلة * نستخدم طريقة فصل المتغيرات باعتبار ان الدالة $\psi(x,y,z)$ تساوي حاصل ضرب ثلاث دوال بالشكل

$$\psi(x,y,z) = \psi(x)\cdot\psi(y)\cdot\psi(z)$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2} = \psi(y)\cdot\psi(z)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2} = \psi(x)\cdot\psi(z)\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}=\psi(x)\cdot\psi(y)\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}$$

وبتعويض هذه الكميات والقسمة على $\psi(x,y,z)$ نحصل على

$$\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{\psi(y)}\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}+\frac{1}{\psi(z)}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+k^2=0$$

وواضح فان كل حد من المعادلة اعلاه يجب ان يساوي ثابتا ولتكن هذه الثوابت $-k_{(x)}^2$ ،$-k_{(y)}^2$ ،$-k_{(z)}^2$

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k_{(x)}^2\,\psi(x)=0\\
&\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}+k_{(y)}^2\,\psi(y)=0\\
&\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+k_{(z)}^2\,\psi(z)=0
\end{aligned}\right\} \qquad **$$

$$k=k_{(x)}^2+k_{(y)}^2+k_{(z)}^2$$

والحل العام لكل من المعادلات الثلاثة ** اعلاه على التوالي

$$\psi(x)=A_x\,e^{ik_{(x)}x}+B_x\,e^{-ik_{(x)}x}$$

$$\psi(y)=A_y\,e^{ik_{(y)}y}+B_y\,e^{-ik_{(y)}y}$$

$$\psi(z)=A_z\,e^{ik_{(z)}z}+B_z\,e^{-ik_{(z)}z}$$

Using the same procedure we can get

$$\psi(x)=c_x\sin k_{(x)}\,x$$

$$\psi(y)=c_y\sin k_{(y)}\,y$$

$$\psi(z)=c_z\sin k_{(z)}\,z$$

$$\psi(x,y,z)=c_x\sin(k_{(x)}\,x)\cdot c_y\sin(k_{(y)}\,y)\cdot c_z\sin(k_{(z)}\,z)$$

$$\psi(x,y,z)=C\sin(\frac{n_x\pi}{a}\;x)\cdot\sin(\frac{n_y\pi}{b}\;y)\cdot\sin(\frac{n_z\pi}{c}\;z)$$

H.W **Show that** $C=\sqrt{\dfrac{8}{abc}}$

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}(k_{(x)}^2+k_{(y)}^2+k_{(z)}^2)$$

$$=\frac{\hbar^2\pi}{2m}(\frac{n_x^2}{a}+\frac{n_y^2}{b}+\frac{n_z^2}{c})$$

If $a=b=c=a$

$$\therefore\ =\frac{\hbar^2\pi}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

نفرض ان $E_1=\dfrac{\hbar^2\pi}{2ma^2}$ حيث ان E_1 مقدار ثابت

$$\therefore\ E=E_1(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

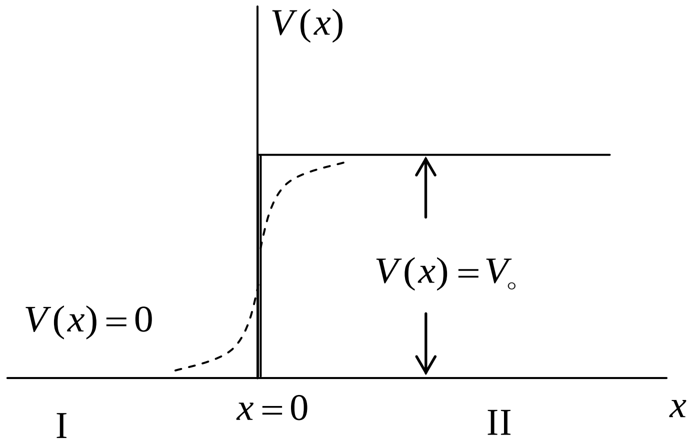
وطبيعي فان مستويات الطاقة تعتمد على $(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ وفي جميع الحالات التي تكون فيها الاعداد الكمية مرتبة بحيث يعطي نفس القيمة للعبارة $(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ تكون طاقاتها متساوية وبطبيعة الحال يمكن تبديل n_z,n_y,n_x بدون ان يتغير المقدار العبارة $(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ وهذا يعني ان دوال الموجة تتغير بينما يبقى مستوى الطاقة كما هو، اي انه منحل حسب تعريف الانحلال ودرجة الانحلال هنا تساوي عدد الترتيبات الممكنة للاعداد الكمية n_z,n_y,n_x وفيما يلي جدولا يبين عدد الترتيبات n_z,n_y,n_x لست حالات مختلفة

Energy	**Combination of** n_z,n_y,n_x	**degeneracy**
$3E_1$	(1,1,1)	1
$6E_1$	(1,1,2) (1,2,1) (2,1,1)	3
$9E_1$	(1,2,2) (2,1,2) (2,2,1)	3
$11E_1$	(3,1,1) (1,3,1) (1,1,3)	3
$12E_1$	(2,2,2)	1
$14E_1$	(1,2,3) (3,2,1) (2,3,1) (1,3,2) (2,1,3) (3,1,2)	6

Potential Step حاجز الجهد

سنحاول في هذا المقطع دراسة حركة جسيم في توزيع جهد كالمبين في الشكل التالي والذي يبين مدرج الجهد.

$$V(x)\begin{cases}0 & x<0 & \text{I}\\ V_\circ & x>0 & \text{II}\end{cases}$$



قيمة الطاقة الكامنة $V(x)$ تساوي صفر عندما $x<0$ وقيمتها ثابتة وتساوي $V_\circ$ عندما $x>0$. وبالحقيقة لايتغير هنا الجهد الفيزياوي بصورة فجائية وانما بصورة مستمرة وكما موضح بالمنحني المنقط في الشكل. فالالكترونات الحرة في المعدن تعاني تغيرا منتظما في الجهد بالقرب من سطح المعدن وسبب معالجتنا للموضوع على اساس التغيير الفجائي هو لتجنب التعقيدات الرياضية.

ولسهولة الحل نجزيء الفراغ الى منطقتين هما (I ، II) وكما مبين في الشكل فالمنطقة I تمثل الجسيمات في الوسط تكون فيه $V(x)=0$ بينما المنطقة II تمثل الجسيمات في الوسط الذي تكون فيه $V(x)=V_\circ$.

والان ندرس الحالتين عندما تكون طاقة الجسيم اصغر من ارتفاع الجهد $V_\circ$ (اي ان $E<V_\circ$) وعندما تكون طاقة الجسيم اكبر من ارتفاع الجهد $V_\circ$ (اي ان $E>V_\circ$)

اولا اذا كانت $E<V_\circ$

كلاسيكيا : لايمكن ان يتواجد الجسيم في المنطقة II اذن الوسط $x>0$ محضور او ممنوع كلاسيكيا اذا كانت $E<V_\circ$.

كميا : (اي من وجهة نظر الميكانيك الكمي)

نكتب معادلة شرودنكر الغيرمعتمدة على الزمن بصورة منفصلة لكلا المنطقتين (I ، II)

اولا في المنطقة **I**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+V(x)\,\psi_1=E\,\psi_1$$

بما ان $V(x)=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=E\psi_1$$

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1=0$$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+k^2\psi_1(x)=0$$

حيث ان $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

والحل العام للمعادلة اعلاه

$$\psi_1(x)=\underbrace{Ae^{ikx}}_{\text{Incident}}+\underbrace{Be^{-ikx}}_{\text{Reflected}} \qquad (1)$$

حيث Ae^{ikx} دالة الموجة الساقطة، Be^{-ikx} دالة الموجة المنعكسة

المنطقة **II**

تكون معادلة شرودنكر بالشكل التالي

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(V_\circ-E)\;\psi_2=0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}-\alpha^2\psi_2=0$$

حيث ان $\alpha^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_\circ-E)$

والحل العام لهذه المعادلة هو

$$\psi_2(x)=Ce^{-\alpha x}+De^{+\alpha x}$$

الدالة الموجية ψ ذات قيمة محددة Bounded ويجب ان تتلاشى في اللانهاية اي ان $\psi=0$ عندما $x\to\infty$
لذلك يهمل الحد $De^{\alpha x}$

$$\psi_2(x)=\underbrace{Ce^{-\alpha x}}_{\text{Transmitted}} \qquad (2)$$ دالة الموجة النافذة

وحقيقة كون ψ_2 لاتساوي صفر تعني ان هنالك احتمالية لتواجد الجسيم في المنطقة II المحضورة كلاسيكيا وان هذه الاحتمالية تقل مع زيادة x

لايجاد الثوابت A ، B ، C نطبق شرطي استمرارية دالة الموجة عند $x=0$

1. $\psi_1(x=0)=\psi_2(x=0)$

2. $\left.\dfrac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0}=\left.\dfrac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}$

$$A+B=C$$

$$ik(A-B)=-\alpha\ C$$

H.W

$$\therefore\quad C=\left(\frac{2ik}{ik-\alpha}\right)A\quad,\quad B=\left(\frac{ik+\alpha}{ik-\alpha}\right)A$$

وبالتعويض عن الثوابت B ، C بالمعادلة 1 ، 2 ينتج

$$\psi_1(x)=\frac{A}{ik-\alpha}\left\{(ik-\alpha)\ e^{ikx}+(ik+\alpha)\ e^{-ikx}\right\}$$

$$\psi_2(x)=\frac{2ikA}{ik-\alpha}\ e^{-\alpha x}$$

واذا اعتبرنا ان $|A|^2$ تمثل شدة المجال الساقط و شدة المجال المنعكس هو $|B|^2$

$$|B|^2=B^*\cdot B=\left(\frac{-ik+\alpha}{-ik-\alpha}\right)\cdot\left(\frac{ik+\alpha}{ik-\alpha}\right)\cdot A^*\cdot A$$

$$|B|^2=B^*\cdot B=\left(\frac{-ik+\alpha}{-ik-\alpha}\right)\cdot\left(\frac{-(-ik-\alpha)}{-(-ik+\alpha)}\right)\cdot A^*\cdot A$$

$$|B|^2=|A|^2$$

اذن، شدة المجال الساقط تساوي شدة المجال المنعكس. وقد تفسر هذه النتيجة بقولنا ان جميع الجسيمات التي تصل حاجز الجهد (مدرج الجهد) عندما $E<V_\circ$ ستنعكس وبضمنها التي تتغلغل في المنطقة II

ولما كانت

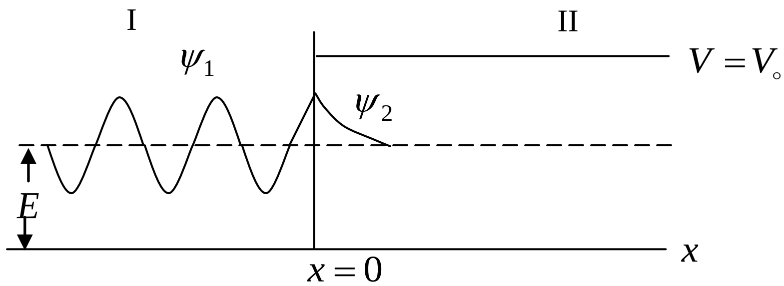
$$\psi_1(x)=\frac{A}{ik-\alpha}\left\{(ik-\alpha)\ e^{ikx}+(ik+\alpha)\ e^{-ikx}\right\}$$

وباستخدام $e^{\pm ikx}=\cos kx\pm i\sin kx$

$$\psi_1(x)=\frac{2ikA}{ik-\alpha}(\cos kx-\frac{\alpha}{k}\sin kx)$$

$$\psi_2(x)=\frac{2ikA}{ik-\alpha}\ e^{-\alpha x}$$

وباهمال الثابت $\frac{2ik}{ik-\alpha}$ يمكن رسم ψ_1 ، ψ_2 بالشكل التالي



كلما كبرت الطاقة الكامنة $V_\circ$ كبرت قيمة α ووفقا لذلك تسارعت الدالة ψ_2 بالتناقص لقيم $x>0$ ان كثافة احتمالية وجود الجسيم في المنطقة II (في المنطقة الممنوعة كلاسيكيا تكون)

$$|\psi_2(x)|^2=\psi_2^{\ *}(x)\psi_2(x)$$

$$=\frac{4k^2A^2}{k^2+\alpha^2}\ e^{-\alpha x}$$

وهذه الاحتمالية تتناقص كلما توغلنا اكثر عمق المنطقة II اي تتناقص بزيادة x

ثانيا اذا كانت $E>V_\circ$

اولا في المنطقة I

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1=0$$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+k^2\psi_1(x)=0$$

حيث ان $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\therefore \quad \psi_1(x) = Ae^{ikx} \quad + \quad Be^{-ikx}$$

ان وجود B بجذ ذاته في هذه المعادلة يشير الى ان هنالك احتمالية في ان ترتد وتنعكس بعض الجسيمات اثناء سقوطها على الحاجز.

في المنطقة **II**

تكون معادلة شرودنكر بالشكل التالي

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_\circ)\ \psi_2 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k'^2\psi_2 = 0 \qquad , \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_\circ)$$

حيث ان $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_\circ - E)$

حل هذه المعادلة هو

$$\psi_2(x) = Ce^{ik'x} \quad + De^{-ik'x}$$

يهمل الحد الثاني لعدم وجود موجات منعكسة في الوسط الثاني

$$\therefore \quad \psi_2(x) = Ce^{ik'x}$$

لايجاد الثوابت A ، B ، C نطبق شرطي استمرارية دالة الموجة عند $x = 0$

1. $\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$
2. $\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}$

$$A + B = C$$

$$k(A - B) = k'C$$

H.W $\therefore \quad C = \left(\frac{2k}{k'+k}\right)A \quad , \quad B = \left(\frac{k'-k}{k'+k}\right)A$

س / احسب معامل الانعكاس والنفاذ لحاجز الجهد عندما $E > V_{\circ}$

الجواب

يعرف معامل الانعكاس (R) بانه نسبة الجسيمات الساقطة التي تعاني انعكاسا من حاجز الجهد ورياضيا يعطى

$$R = \left|\frac{J_R}{J_i}\right|$$

حيث

J_i هو تيار الاحتمالية للموجة الساقطة

J_R هو تيار الاحتمالية للموجة المنعكسة

ولو اردنا حساب تيار الاحتمالية للموجة الساقطة من المعادلة العامة لتيار الاحتمالية (راجع الفصل الثاني)

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

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

$$\therefore \quad j_i = \frac{\hbar}{2mi}(A^* e^{-ikx} \cdot \frac{d}{dx} A e^{ikx} - A e^{ikx} \cdot \frac{d}{dx} A^* e^{-ikx})$$

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

وبنفس الاسلوب نجد تيار الاحتمالية للموجة المنعكسة

$$j_R = \frac{\hbar}{2mi}(B^* e^{ikx} \cdot \frac{d}{dx} B e^{-ikx} - B e^{-ikx} \cdot \frac{d}{dx} B^* e^{ikx})$$

$$= \frac{\hbar k}{m}|B|^2$$

وبالتعويض عن A ، B نجد

$$\therefore \quad R = \left|\frac{J_R}{J_i}\right| = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)$$

وكما يعرف معامل الانفاذ T بانه نسبة من الجسيمات الساقطة التي تعاني نفاذا من خلال حاجز الجهد ورياضيا يعطى

$$T = \left|\frac{J_T}{J_i}\right|$$

حيث ان

J_T هو تيار الاحتمالية للموجة النافذة

J_i هو تيار الاحتمالية للموجة الساقطة

وبنفس الاسلوب نجد تيار الاحتمالية للموجة النافذة

$$j_T = \frac{\hbar k'}{m}|C|^2$$

وتيار الاحتمالية للموجة الساقطة J_i هو

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

$$\therefore \quad T = \left|\frac{J_T}{J_i}\right| = \left|(\frac{\hbar k'}{m}|C|^2)/(\frac{\hbar k}{m}|A|^2)\right|$$

وبالتعويض عن قيمة C
اذن

$$T = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$$

ولكي يكون عدد الجسيمات محفوظا

$$R + T = (\frac{k-k'}{k+k'})^2 + \frac{4kk'}{(k+k')^2} = 1$$

اختراق حاجز الجهد Potential Barrier Penetration

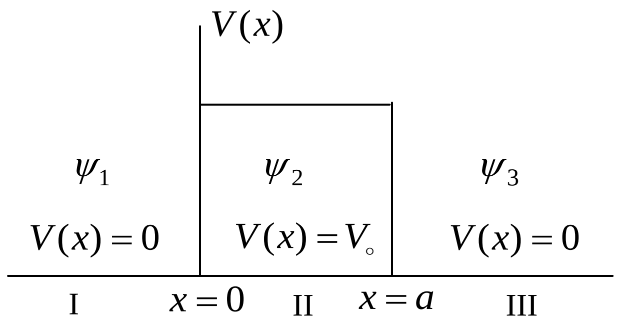
في هذه المسالة سنقوم بدراسة حزمة من الجسيمات قادمة من $x = -\infty$ تسقط على حاجز ذي ارتفاع مقداره $V_\circ$ وعرضه يساوي a وكما مبين في الشكل التالي

هنا نجزئ الفراغ الى ثلاث مناطق I ، II ، III

المناطقة I $V(x) = 0$ عندما $x < 0$ $\psi = \psi_1$

المناطقة II $V(x) = V_\circ$ عندما $0 \le x \le a$ $\psi = \psi_2$

المناطقة III $V(x) = 0$ عندما $x > a$ $\psi = \psi_3$



استنادا الى الميكانيك الكلاسيكي اذا كانت طاقة الجسيم E اكبر من $V_\circ$ فانها ستجتاز الحاجز حتما، وتنعكس عنه اذا كانت طاقاتها اقل من $V_\circ$. هنا ندرس الحالة من وجهة نظر الميكانيك الكمي وناخذ الحالتين $E < V_\circ$ ، $E > V_\circ$ على انفراد

اولا عندما $E < V_\circ$

المنطقة **I**

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k^2\psi_1(x) = 0 \qquad \text{حيث ان} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

حل هذه للمعادلة هو

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad (1)$$

المنطقة **II**

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(V_\circ - E)\ \psi_2 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}-\alpha^2\psi_2 = 0$$

حيث ان $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_\circ - E)$

حل هذه للمعادلة هو

$$\psi_2(x) = C e^{-\alpha x} + D e^{+\alpha x} \qquad (2)$$

المنطقة **III**

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+k^2\psi_3(x) = 0$$

حيث ان $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

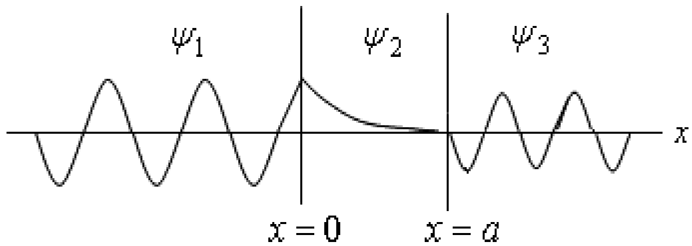
حل هذه للمعادلة هو

$$\psi_3(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx}$$

يهمل الحد الثاني من المعادلة الاخيرة لعدم وجود موجة منعكسة في المنطقة **III**

$$\therefore \quad \psi_3(x) = A'e^{ikx} \qquad (3)$$

ويمكن الان ان نفسر تصرف دالة الموجة وكما في الشكل ادناه وكلسابق تحتوي دالة الموجة ψ_1 (المعادلة (1)) على الجسيمات الساقطة والمنعكسة اما ψ_2 (المعادلة (2)) فتضمحل اسيا وتمتد الى $x = a$ ولما كانت دالة الموجة ψ_2 لاتساوي صفر عند $x = a$ لذلك تستمر دالة الموجة في الوسط **III** وبشكل تذبذبي هو ψ_3 (المعادلة (3)) وهي تمثل الجسيمات النافذة والتي لها نفس طاقة الجسيمات الساقطة ولكن بسعة A' تختلف عن A (سعة اقل لان السعة تعني شدة الحزمة اي الكثافة العددية للجسيمات وبما ان جزءا من هذه الجسيمات انعكس وارتد الى الخلف في كل من $x = 0$ ، $x = a$ لذلك تكون الشدة اقل اي السعة اقل في هذه المنطقة) . ولما كانت ψ_3 لاتساوي صفر فهنالك احتمالية تواجد الجسيم في الوسط **III** وبعبارة اخرى بامكان الجسيم اختراق حاجز الجهد حتى لو كانت طاقته الحركية اقل من ارتفاع حاجز الجهد.



ثانيا اذا كانت $E > V_\circ$

ان نتائج الميكانيك الكلاسيكي لهذه الحالة تشير الى ان جميع الجسيمات الساقطة على حاجز الجهد تمر عبر الحاجز الى المنطقة الثالثة في حين سنجد عن طريق المعالجة الكمية ان هناك احتمالية لبعض الجسيمات ستنعكس عند النقطتين $x=0$ ، $x=a$ وترتد الى الخلف.

ان دوال الموجة لهذه المناطق الثلاثة في هذه الحالة هي على التوالي

المنطقة **I**

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi_1 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k^2\psi_1(x) = 0 \quad ، \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\therefore \quad \psi_1(x) = Ae^{ikx} \;+\; Be^{-ikx}$$

المنطقة **II**

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_\circ)\;\psi_2 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k'^2\psi_2 = 0 \quad ، \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_\circ)$$

$$\therefore \quad \psi_2(x) = Ce^{ik'x} \;+ De^{-ik'x}$$

المنطقة **III**

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi_3 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+k^2\psi_3(x)=0 \quad ، \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$ حيث ان

$$\psi_3(x)=A'e^{ikx} \quad + \quad B'e^{-ikx}$$

يهمل الحد الثاني من المعادلة الاخيرة لعدم وجود موجة منعكسة في المنطقة **III** وبذلك يكون

$$\therefore \quad \psi_3(x)=A'e^{ikx}$$

س) جسيم يتحرك في صندوق الجهد الذي يوصف بدالة الموجة $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)$ اوجد $\langle p_x \rangle$ ، $\langle p_x^2 \rangle$ ، $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\Delta p\,\Delta x$.

Solution:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\,\hat{p}_x\,\psi_n(x)\,dx$$

$$= \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx$$

$$= \frac{-2i\hbar}{a}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\cdot\frac{n\pi}{a}\cdot\cos(n\pi x/a)\,dx$$

$$= \frac{-2i\hbar\,n\pi}{a^2}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\cos(n\pi x/a)\,dx$$

$$= \frac{-i\hbar}{a}\sin^2(n\pi x/a)\Big|_0^a$$

$$= 0$$

ولما كان الزخم كمية متجهة فمعدله يساوي صفر وتفسير ذلك بان احتمالية كون الجسيم يتحرك نحو اليسار تساوي احتمالية حركته نحو اليمين ولاتدل على ان الجسيم تعوزه الحركة

والان نجد $\langle p_x^2 \rangle$

$$\langle p_x^2 \rangle = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx$$

$$= \frac{-2\hbar^2}{a}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\sin(n\pi x/a)\,dx$$

$$= \frac{-2\hbar^2}{a}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\,\frac{\partial}{\partial x}\,\frac{n\pi}{a}\cos(n\pi x/a)\,dx$$

$$= \frac{-2n\pi\hbar^2}{a^2}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\,\frac{\partial}{\partial x}\,\cos(n\pi x/a)\,dx$$

$$=\frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{a^3}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\,\sin(n\pi x/a)\,dx$$

ويمكن كتابة المعادلة الاخيرة بالشكل التالي

$$\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}=\int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx$$

وبما ان دوال الموجة لجسيم يتحرك في صندوق الجهد هي عيارية اي ان

$$\int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx=1$$

$$\therefore\quad \langle p^2\rangle=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

$$\because\quad (\Delta p)^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

$$=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

$$\therefore\quad (\Delta p)=\frac{n\pi\hbar}{a}$$

والان نجد $\langle x\rangle$

$$\langle x\rangle=\int_0^a \psi_n(x)\;x\psi_n(x)\,dx$$

$$=\int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\;\;x\;\;\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx$$

$$=\int_0^a x\;\sin^2(n\pi x/a)\;\;dx$$

ان هذا التكامل بسيط جدا وقيمته

$$\langle x\rangle=\frac{a}{2}\quad\Rightarrow\quad\langle x\rangle^2=\frac{a^2}{4}$$

وهي تشير الى تواجد الجسيم في نصف الصندوق الايسر او الايمن بنفس الاحتمالية

والان نجد $\langle x^2\rangle$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a \psi_n(x)\ x^2\ \psi_n(x)\ dx$$

$$= \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a)\ \ x^2 \sqrt{\tfrac{2}{a}} \sin(n\pi x/a)\ dx$$

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

ان هذا التكامل بسيط وقيمته هي

$$\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

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

$$= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \frac{a^2}{4}$$

$$= a^2 \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right]$$

$$\therefore \quad \Delta x = a \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right]$$

$$\Delta p\, \Delta x = \frac{n\pi\hbar}{a} - a \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right]$$

$$\Delta p\, \Delta x = \hbar \left[\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right]$$

ان اقل قيمة لحاصل الضرب ينتمي الى الحالة الارضية $n = 1$

$$\Delta p\, \Delta x = 0.567\,\hbar$$

وهذه النتيجة تتفق مع $\Delta p\, \Delta x \geq \hbar$

Chapter Four

Linear Harmonic Oscillator　　　　المتذبذب التوافقي الخطي

وفقا للنظرية الكلاسيكية فان المتذبذب التوافقي عبارة عن جسيم كتلته m يتحرك ذهابا وايابا حول موضع استقراره تحت تاثير القوة المعيدة Restoring Force اي ان

$$F = -kx$$

حيث ان k تمثل مقدار ثابت ويطلق عليه ثابت القوة، والاشارة السالبة تعني ان القوة تكون باتجاه معاكس لاتجاه الازاحة x. يمكن الحصول على معادلة الحركة من خلال قانون نيوتن الثاني:

$$F = m\ddot{x}$$

$$-kx = m\ddot{x}$$

$$m\ddot{x} + kx = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0$$

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

حيث ان $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ التردد الزاوي ، ان معادلة الحركة اعلاه تقبل بنوعين من الحلول هما

$$x = a\cos\omega t$$

$$x = a\sin\omega t$$

وكلا الحلين يمثل حركة اهتزازية بتردد زاوي ω وسعة a

ويرتبط الجهد بالقوة بالعلاقة

$$F = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} = -kx$$

وبعد اجراء عملية التكامل لهذه المعادلة نجد ان

$$V(x) = \tfrac{1}{2}k^2x^2 = \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2$$

ان الطاقة الكلية للمتذبذب التوافقي يمكن ايجادها وكما يلي:

$$E = T + V(x)$$

$$= \tfrac{1}{2} m\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\therefore \quad E = \tfrac{1}{2} m\omega^2 a^2$$

من خلال الدراسة الكلاسيكية للمتذبذب التوافقي اعلاه يمكن ان نستنتج مايلي

1. The minimum energy of H.O. is zero.
2. The energy of H.O. has a continuous spectrum of values.
3. The probability density of finding the oscillating particle has an inverse proportionality with its speed.

1. الطاقة الدنيا للمتذبذب التوافقي تساوي صفر.

2. الطاقة للمتذبذب التوافقي لها طيف مستمر من القيم .

3. كثافة الاحتمالية للمتذبذب تتناسب عكسيا مع السرعة.

4. لاتوجد حدود قصوى تفرض على الطاقة التي يمكن ان يتخذها المتذبذب التوافقي .

ان مسالة المتذبذب التوافقي من المسائل المهمة في ميكانيك الكم. حيث ترتبط هذه المسألة في تطبيقات عملية عديدة مثل اهتزاز جزيئات وذرات المواد الصلبة التي تقرب عادة من اهتزازات توافقية بسيطة وكذلك المجال الكهرومغناطيسي الذي يمكن اعتباره في تطبيقات كثيرة كعدد من الاهتزازات التوافقية البسيطة.

Quantum Theory Of Harmonic Oscillator النظريـــة الكميــة للمتذبــذب التــوافقي

المؤثر الهاملتوني للمتذبذب التوافقي هو (The Hamiltonian of H.O is)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V(x)\psi_n = E_n\psi_n$$

نعوض عن $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi_n = E_n\psi_n$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left\{E_n - (\frac{1}{2} m\omega^2 x^2)\right\}\psi_n = 0$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + (\frac{2mE_n}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2)\psi_n = 0$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(\frac{2E_n}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar} x^2)\psi_n = 0$$

نفرض ان

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\ x \qquad y = \alpha\ x \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

and

$$\varepsilon_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} \qquad (1)$$

$$\therefore \quad \frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(\varepsilon_n - y^2)\psi_n = 0$$

$$\frac{d}{dx}=\frac{d}{dy}\frac{dy}{dx}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dy}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}=\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\frac{d^2}{dy^2}$$

$$=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dy^2}$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\frac{m\omega}{\hbar})(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0 \qquad \div\ \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0 \qquad (2)$$

س / اثبت ان المتغيرات ε_n ، y هي متغيرات خالية من الوحدات (***HW***)

المعادلة (2) يمكن حلها بثلاث طرق هي :

1. طريقة شرودنكر او معالجة شرودنكر Schrödinger Treatment
2. طريقة المؤثرات Operator Treatment
3. طريقة المصفوفات Matrix Treatment

1. طريقة شرودنكر Schrödinger Treatment

في حالة $y\to\infty$ يمكن اهمال المقدار ε_n فالمعادلة (2) تصبح بالصيغة التالية

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}-y^2\psi_n=0 \qquad (3)$$

والان نجد الحل التقريبي للحالة التي تكون فيها y كبيرة فاذا فرضنا ان

$$\psi_n(y) = e^{cy^2}$$

$$\frac{d\psi_n}{dy} = 2cy\, e^{cy^2}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2} = 2c\, e^{cy^2} + 2cy\, e^{cy^2} \cdot 2cy$$

$$= 2c\, e^{cy^2} + 4c^2 y^2 e^{cy^2}$$

وبالتعويض عن ψ_n ، $\frac{d^2\psi_n}{dy^2}$ في المعادلة (3) نحصل على

$$4c^2 y^2 e^{cy^2} + 2c\, e^{cy^2} - y^2 e^{cy^2} = 0$$

وباهمال الحد الوسطي في المعادلة اعلاه لصغره نحصل على

$$(4c^2 - 1) y^2\, e^{cy^2} = 0$$

$$\therefore \quad 4c^2 - 1 = 0$$

$$c = \pm \frac{1}{2}$$

$$\therefore \quad \psi_n(y) = e^{\pm\frac{1}{2}y^2}$$

ولما كانت دالة الموجة $\psi_n(y)$ يجب ان تقترب من الصفر عندما تقترب y من اللانهاية فان الحل $e^{+\frac{1}{2}y^2}$ يجب ان يهمل ونحتفظ بحل تقريبي واحد هو

$$\therefore \quad \psi_n(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad (4)$$

وهو يمثل حلا تقريبا وللقيم الكبيرة للمتغير y . واذا اردنا الحصول على الحل المظبوط فاننا نضرب الحل التقريبي للمعادلة (4) بدالة اعتباطية للمتغير y مثلا $F(y)$

$$\therefore \quad \psi_n(y) = F(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad (5)$$

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

$$\psi'_n = F'(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} - yF(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$\frac{d^2\psi_n(y)}{dy^2} = \psi''_n(y) = F''(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - yF'(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - F'(y)\ y\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$- F(y)\{(1)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} + y e^{-\frac{1}{2}y^2}(-y)\}$$

$$\psi''_n(y) = F''(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - 2yF'(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - F(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} + y^2F(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

وبتعويض العلاقة الاخيرة في المعادلة (2) نحصل

$$\{F''(y) - 2y\,F'(y) - F(y) + y^2F(y) + \varepsilon_n\,F(y) - y^2F(y)\}\ e^{-\frac{1}{2}y^2} = 0$$

$$\therefore \quad F''(y) - 2y\,F'(y) + (\varepsilon_n - 1)\,F(y) = 0 \tag{6}$$

ان معادلة هيرمت التفاضلية من الدرجة n لها الصيغة الرياضية التالية:

$$H''_n(y) - 2y\,H'_n(y) + 2n\,H_n(y) = 0 \tag{7}$$

وحل هذه المعادلة يدعى بمتعددة حدود هيرمت Hermit Polynomial والصيغة الرياضية لهذا الحل

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

حيث ان $n = 0,1,2,3.......$

بمقارنة العلاقتين (6) ، (7) نجد ان

$$F(y) = H_n(y)$$

$$\varepsilon_n - 1 = 2n$$

$$\therefore \quad \varepsilon_n = 2n + 1$$

اذن المعادلة (5) يمكن ان تكتب بالشكل التالي

$$\psi_n(y) = H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

ولاجل ان تكون دالة الموجة للمتذبذب التوافقي معيرة نضربها بثابت مثل N_n اي ان

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad (8)$$

حيث سنجد قيمة ثابت المعايرة N_n لاحقا

المعادلة (8) الان يمكن كتابتها بالشكل التالي حيث ان $y = \alpha\ x$

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \qquad (9)$$

حيث ان $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ ، $\alpha^2 x^2 = y^2$، هنا ω هو التردد الدائري الكلاسيكي و $H_n(\alpha x)$ هو كثيرة حدود هيرمت من الدرجة n

من معادلة (1)

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon_n$$

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

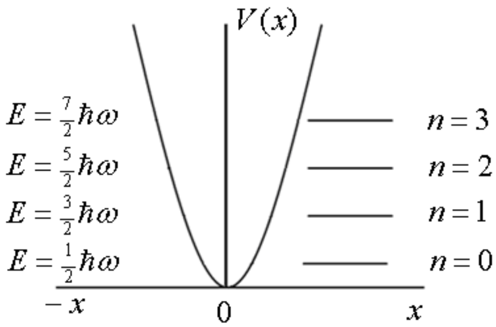
$$\therefore \quad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \qquad (10)$$

ان المعادلة (9) تمثل الصيغة العامة لدوال الموجة الذاتية والتي تصف المتذبذب التوافقي والمعادلة (10) تمثل القيم الذاتية لطاقة المتذبذب التوافقي، حيث n هو العدد الكمي وياخذ الاعداد الصحيحة $n = 0,1,2,3\cdots\cdots$

والمعادلة (10) تدلنا على ان طاقة المتذبذب التوافقي هي طاقة مكممة واقل قيمة لهذه الطاقة هي

$$E_\circ = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(Zero Point Energy)}$$

التي تتميز بالعدد الكمي $n = 0$ والتي تسمى بطاقة نقطة الصفر وهي اقل طاقة يستطيع المتذبذب امتلاكها.



الشكل يمثل مستويات الطاقة وهي

متباعدة بمقادير متساوية كل منها $\hbar\omega$

س / جد $H_n(y)$ ، ε_n ، E_n لاول اربعة حالات من n

الحل:-

باستخدام العلاقات التالية

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

$$\varepsilon_n=2n+1$$

$$E_n=\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})$$

n	$H_n(y)$	ε_n	E_n
0	1	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2y$	3	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4y^2-2$	5	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8y^3-12y$	7	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

Generating Function الدالة المولدة

الدالة الرياضية تدعى بالدالة المولدة

$$G(t,y)=e^{y^2-(t-y)^2}$$

$$G(t,y)=e^{-t^2+2ty} \tag{11}$$

وهي احدى اهم النظريات التي تتعلق بكثيرة حدود هيرمت وترتبط معها بالعلاقة

$$e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\,t^n}{n!} \tag{12}$$

ويمكن ان نثبت ان الطرف الايمن يساوي الطرف الايسر في المعادلة (12) وكما يلي

$$\text{R.H.S}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\,t^n}{n!}$$

$$=H_\circ(y)+\frac{H_1(y)\;t}{1!}+\frac{H_2(y)\;t^2}{2!}+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=1+2yt+(4y^2-2)\frac{t^2}{2}+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=1+2yt+(2y^2-1)t^2+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{a}$$

وباستخدام متسلسلة تايلر عند النقطة $(t=0)$ يمكن نشر الطرف الايسر

$$f(t)=f(0)+f'(0)\cdot t+\frac{f''(0)}{2!}\cdot t^2+\frac{f'''(0)}{3!}\cdot t^3+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$L.H.S=1+2yt+(2y^2-1)t^2+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{b}$$

من الملاحظ ان المعادلة (b) هي نفسها المعادلة (a) اذن

L.H.S=R.H.S

الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي متعامدة وعيارية

The Wave Function of H.O are Orthonormal

لقد بينا في الفصل الثاني ان الدوال الموجية التي تحقق معادلة شرودنكر هي دوال عيارية ومتعامدة وقد عبرنا عن هذه الحقيقة من خلال المعادلة

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

حيث ان

$$\delta_{mn} = 0 \qquad m \neq n$$
$$= 1 \qquad n = m$$

وواضح ان في حالة المتذبذب التوافقي $\psi_m^* = \psi_m$ وباستخدام الدوال الموجية المعطاة في المعادلة (9) نحصل على

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

اذن في حالة $n \neq m$ تكون الدوال الموجية متعامدة

$$N_m N_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) \, dx = 0$$

اذن

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) \, dx = 0 \qquad (13)$$

وفي حالة $n = m$ تكون الدوال الموجية عيارية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) \, dx = N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_n^2(\alpha x) \, dx = 1$$

ايجاد ثابت التعيير N_n

لايجاد ثابت التعيير N_n نستخدم الشرط العياري

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\ dx = N_n^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}H_n^2(\alpha x)\,dx = 1$$

وعند تبديل المتغير x بالمتغير y حسب العلاقة $y=\alpha x$ وان $dy=\alpha\,dx$

$$\frac{N_n^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}H_n^2(y)\,dy = 1 \qquad \text{(a)}$$

ولايجاد هذا التكامل نستخدم تعريف الدالة المولدة كما يلي

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

نضرب هذه الدالة في نفسها ثم بالمقدار e^{-y^2} ونكامل على الفضاء سنحصل:

$$\int_{-\infty}^{\infty}g(t,y)\ g(t,y)\ e^{-y^2}dy = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{t^n}{n!}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}H_n^2(y)\,dy$$

من الملاحظ ان التكامل في الطرف الايمن من العلاقة الاخيرة هو نفسه التكامل في المعادلة (a). الان نجد التكامل في الطرف الايسر وكما يلي

$$L.H.S = \int_{-\infty}^{\infty}g(t,y)\ g(t,y)\ e^{-y^2}dy$$

$$L.H.S = \int_{-\infty}^{\infty}e^{-t^2+2ty}\,e^{-t^2+2ty}\,e^{-y^2}\,dy$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}e^{-2t^2+4ty-y^2}\ dy = \int_{-\infty}^{\infty}e^{2t^2}\,e^{-2t^2}\,e^{-2t^2+4ty-y^2}\ dy$$

$$= e^{2t^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-4t^2+4ty-y^2}\ dy$$

$$= e^{2t^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(y-2t)^2}\, dy$$

ولحل التكامل اعلاه نفرض ان $y - 2t = z$ ، $dy = dz$

$$L.H.S = e^{2t^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}\, dz$$

وقيمة التكامل $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}\, dz = \sqrt{\pi}$

$$= e^{2t^2} \sqrt{\pi}$$

وباستخدام متسلسلة تايلرلنشر الدالة e^{2t^2}

$$e^{2t^2} = 1 + 2t^2 + \frac{(2t^2)^2}{2!} + \frac{(2t^2)^3}{3!} + \cdots\cdots\cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n (t^2)^n}{n!}$$

$$\therefore \quad L.H.S = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^{2n}}{n!}$$

$$R.H.S = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t^n}{n!} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n^2(y)\, dy$$

وبالرجوع الى المعادلة (a) نجد ان

$$R.H.S = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t^n}{n!} \right)^2 \cdot \frac{\alpha}{N_n^2}$$

$$\therefore \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^{2n}}{n!} \sqrt{\pi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{(n!)^2} \cdot \frac{\alpha}{N_n^2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{(n!)^2} \cdot \frac{\alpha}{N_n^2} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^{2n}}{n!} \sqrt{\pi} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{(n!)^2} \left\{ \frac{\alpha}{N_n^2} - 2^n n! \sqrt{\pi} \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \quad N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \quad \psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$$

وفيما يلي ندرج في الجدول ادناه الدوال الذاتية العيارية والطاقة المقابلة لها لقيم $n = 0, 1, 2, 3$

n	$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$	$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$
0	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha\, x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 8\pi^{\frac{1}{4}})\ (4\alpha^2 x^2 - 2)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 48\pi^{\frac{1}{4}})\ (8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

على اننا نستطيع ايجاد $H_n(y)$ او $H_n(\alpha x)$ لاي قيمة لـ n من العلاقة التالية

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

بالاضافة الى ذلك فان $H_n(y)$ تخضع لعلاقات تفاضليه وتكاملية على درجة كبيرة من الفائدة منها

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y)\ dy = 2^n n! \sqrt{\pi}\ \delta_{mn}$$

نلاحظ انه اذا كان $n \neq m$ فان التكامل يصبح صفر وكما بينا سابقا واذا كان $n = m$ فان المعادلة تصبح

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n^2(y)\ dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \qquad (14)$$

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = H_n{}'(y) = 2nH_{n-1}(y) \qquad (15)$$

$$2yH_n(y) = H_{n+1}(y) + 2nH_{n-1}(y) \qquad (16)$$

$$H_n{}''(y) - 2yH_n{}'(y) + 2nH_n(y) = 0 \qquad (7)$$

مقارنة النظرية الكلاسيكية مع النظرية الكمية

Comparison of classical theory with quantum theory

تختلف النتائج التي حصلنا عليها عن نتائج النظرية الكلاسيكية فيما يلي

1. طاقة الحالة الدنيا لاتساوي صفر واقل قيمة للطاقة يمكن ان يتخذها المتذبذب هي $\frac{1}{2}\hbar\omega$.
2. مستويات الطاقة غير متصلة بل متقطعة (Discrete).
3. في النظرية الكلاسيكية تتناسب كثافة الاحتمالية عكسيا مع الانطلاق اما النظرية الكمية فانها تعطي بالكمية $|\psi_n(x)|^2$ وبدون شك فهي تعطي تصرف مختلفا عن تصرف المتذبذب الكلاسيكي.

واجب بيتي H.W

Prove that:

1. $\dfrac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y)$

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

3. $H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$

4. $y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$

5. $\dfrac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$

6. $\dfrac{1}{\sqrt{2}}(y + \dfrac{d}{dy})\ \psi_n(y) = \sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$

7. $\dfrac{1}{\sqrt{2}}(y - \dfrac{d}{dy})\ \psi_n(y) = \sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

8. برهن ان القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة للمتذبذب التوافقي لحالة ذاتية للطاقة هي

$$< V(x) >= \tfrac{1}{2}(n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

9. Consider a simple Harmonic oscillator, compute the expectation values $< T >$.

10. استخدم شرط المعايرة وتعريف الدالة المولدة اثبت ان

a) $N_n = (2^n n!\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$

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

11. جد H_0 ، H_1 ، H_2 ، H_3

12.برهن ان الدوال الموجية التالية هي دوال متعامده وعيارية

$$\psi_0(x) = (\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_1(x) = (\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

13. جد $\Delta x \Delta p$ مستخدما $\psi_0(x)$ في السؤال التاسع

14.) Using the uncertainty relation $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ estimate the energy ground state of harmonic oscillator

س15) برهن اذا كانت n زوجية فان $H_n(-y) = H_n(y)$ واذا كانت n فردية فان $H_n(-y) = -H_n(y)$

16.) Consider a simple harmonic oscillator find $\Delta p\, \Delta x$.

1. **Prove that** $$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y)$$

Solution:

باستخدام الدالة المولدة

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

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة بالنسبة الى y

$$\frac{\partial g}{\partial y} = 2t\,e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!}$$

حيث ان $H_n'(y) = \frac{dH_n(y)}{dy}$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!} = 2t \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^n}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = 0$$

$$H_\circ'(y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = 0$$

$$H_\circ'(y) = \frac{d}{dy}(1) = \text{zero}$$

$$\therefore \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = 0$$

Let $m = n+1$

$$\therefore \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{m=1}^{\infty} \frac{H_{m-1}(y)\ t^m}{(m-1)!} = 0$$

$$\therefore \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n'(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} = 0$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{(n-1)!}\left\{H_n' - 2nH_{n-1}(y)\right\} = 0$$

$$\therefore \quad H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

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

Solution:

باستخدام الدالة المولدة

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

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة بالنسبة الى t

$$\frac{\partial g(t,y)}{\partial t} = (-2t+2y)\ e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n\ H_n(y)\ t^{n-1}}{n!}$$

$$(-2t+2y)\ e^{-t^2+2ty} = 2y\ e^{-t^2+2ty} - 2t\ e^{-t^2+2ty}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2y\, H_n(y)\, t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(y)\, t^{n+1}}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2y \frac{H_n(y)\ t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{nH_n(y)\ t^{n-1}}{n!}$$

وبمساواة معاملات t^n في طرفي العلاقة

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2y \frac{H_n(y)\ t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)H_{n+1}(y)\ t^n}{(n+1)!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2yH_n(y)\ t^n}{n(n-1)!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)H_{n+1}(y)\ t^n}{(n+1)\,n\,(n-1)!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2yH_n(y)\ t^n}{n(n-1)!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_{n+1}(y)\ t^n}{n(n-1)!} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{(n-1)!} \left\{ \frac{2yH_n(y)}{n} - 2H_{n-1}(y) - \frac{H_{n+1}(y)}{n} \right\} = 0$$

$$\frac{2yH_n(y)}{n} - 2H_{n-1}(y) - \frac{H_{n+1}(y)}{n} = 0$$

نضرب في $\frac{n}{2}$ والترتيب نحصل على

$\therefore \quad yH_n(y) = \frac{1}{2} H_{n+1}(y) + nH_{n-1}(y)$ وهو المطلوب

3. **Prove that:** $H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$

Solution:

باستخدام المعادلة

$$H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y) \qquad \text{(a)}$$

$$H_{n+1}'(y) = 2(n+1)H_n(y)$$

$$H_{n+1}'(y) = 2nH_n(y) + 2H_n(y) \qquad \text{(b)}$$

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة (a) ينتج

$$H_n''(y) = 2nH_{n-1}'(y) \qquad \text{(c)}$$

وباستخدام المعادلة

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

وباخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$yH_n'(y) + H_n(y) = \tfrac{1}{2}H_{n+1}'(y) + nH_{n-1}'(y)$$

وبالتعويض عن c ، b في المعادلة اعلاه ينتج

$$yH_n'(y) + H_n(y) = \tfrac{1}{2}(2nH_n(y) + 2H_n(y)) + \frac{H_n''(y)}{2}$$

$$yH_n'(y) + H_n(y) = nH_n(y) + H_n(y) + \frac{H_n''(y)}{2}$$

نضرب في 2 ونرتب نحصل على

$$H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$$ وهو المطلوب

4. **Prove that:** $y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$

Solution:

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

نضرب طرفي المعادلة في y

$$y\ \psi_n(y) = N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2}\ y\ H_n(y)$$

باستخدام المعادلة

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

$$y\ \psi_n(y) = N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2}\left\{nH_{n-1}(y) + \tfrac{1}{2}H_{n+1}(y)\right\}$$

وبالتعويض عن قيمة $N_n = \dfrac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}$

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

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

$\therefore \quad y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$ وهو المطلوب

5. **Prove that:** $$\frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$$

Solution:

$$\psi_n(y) = N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

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

$$= -yN_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

باستخدام المعادلة

$$H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

$$= -y\ N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + 2nN_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_{n-1}(y)$$

وبالتعويض عن قيمة N_n

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

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

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

$$\therefore\ \frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$$ وهو المطلوب

6. **Prove that:** $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$

Solution:

باستخدام المعادلة

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

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

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

$\therefore \quad \hat{a}\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$ وهو المطلوب

يسمى المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$ بالمؤثر الخافض Destruction Operator ويرمز له بالرمز $\hat{a}$ اي ان

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$$

ويسمى المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})$ بالمؤثر الرافع Creation Operator ويرمز له بالرمز $\hat{a}^{+}$ اي ان

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

(Read $\hat{a}^{+}$ as "a dagger")

7. **Prove that:** $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

or $\hat{a}^+\ \psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

Solution:

باستخدام المعادلات

$$y\psi_n=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y)+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y) \qquad (a)$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y) \qquad (b)$$

من معادلة (a)

$$\psi_{n-1}(y)=\sqrt{\tfrac{2}{n}}\left\{y\ \psi_n(y)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)\right\} \qquad (c)$$

وبالتعويض عن قيمة c اي $\psi_{n-1}(y)$ في معادلة (b) ينتج

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\left\{\sqrt{\tfrac{2}{n}}(y\psi_n(y)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(y))\right\}$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+2y\psi_n(y)-2\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(y)$$

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

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

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

$\therefore\quad \hat{a}^+\psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$ وهو المطلوب

س 8 / برهن ان القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة للمتذبذب التوافقي لحالة ذاتية للطاقة هي

$$< V(x) >= \tfrac{1}{2}(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$= \tfrac{1}{2} E_n$$

Solution:

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

بضرب في $\psi_{n+1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\psi_{n+1}(y)\ dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة وعيارية اي ان

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy = 0$$

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \qquad \text{(b)}$$

وبضرب في $\psi_{n-1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\psi_{n+1}(y)\ dy$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \qquad \text{(c)}$$

القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة تساوي

$$< V(x) >= \tfrac{1}{2} m\omega^2 < x^2 >$$

$$= \frac{1}{2} m\omega^2 < \frac{y^2}{\alpha^2} >$$

$$= \frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2} < y^2 >$$

وبضرب طرفي المعادلة (a) في $y\ \psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y^2 \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy$$

وبالتعويض عن (b) ، (c) في المعادلة الاخيرة ينتج

$$< y^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y^2 \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n}{2}} + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}$$

$$< y^2 >= \frac{n}{2} + \frac{n+1}{2} = n + \frac{1}{2}$$

$$\therefore \quad < V(x) >= \frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2} < y^2 >$$

$$< V(x) >= \frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2}(n + \frac{1}{2})$$

$$\because \quad \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$< V(x) >= \frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{m\omega}\hbar\ \ (n + \frac{1}{2})$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\ (n + \frac{1}{2})$$

$$= \frac{1}{2}E_n$$ وهو المطلوب

9. Prove that expectation value of kinetic energy for harmonic oscillator

$$<T>=\frac{1}{2}\,(n+\frac{1}{2})\hbar\,\omega=\frac{1}{2}E_n$$

القيمة المتوقعة للطاقة الحركية $<T>=\dfrac{<p^2>}{2m}$

$$<T>=\frac{<p^2>}{2m}=\frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;p^2\psi_n(x)\;dx$$

$$<T>=\frac{<p^2>}{2m}=\frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;\frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2}\;dx$$

نجد $\dfrac{\partial^2\psi_n(y)}{\partial y^2}$ **باستخدام دالة الموجة للمتذبذب التوافقي** $\psi_n(y)=N_n e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$ **او بلستخدام معادلة**

(2)

باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=N_n\;\;e^{-\frac{1}{2}y^2}(-y)H_n(y)+N_n\;\;e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{d\,y}=N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)-y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$$

باخذ المشتقة لثانية للمعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$\frac{d^2\psi_n(y)}{d\,y^2}=N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n''(y)-y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)-N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$$

$$-y\left(-y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)+N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)\right)$$

$$=N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n''(y)-2y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)-N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)+y^2\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$$

باستخدام العلاقة $H_n''(y)-2yH_n'(y)+2nH_n(y)=0$ والتعويض في المعادلة اعلاه

$$= N_n e^{-\frac{1}{2}y^2}\left(2yH_n'(y) - 2nH_n(y)\right) - 2y N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

$$- N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + y^2 N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

$$= 2y N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y) - 2n N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) - 2y N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

$$- N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + y^2 N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

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

معادلة (2)

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

او بدلالة x **حيث ان** $y = \alpha x$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = \alpha^2(\alpha^2 x^2 - \varepsilon_n)\,\psi_n$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\,\alpha^2(\alpha^2 x^2 - \varepsilon_n)\,\psi_n(x)\,dx$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;\alpha^4 x^2 \psi_n(x)\,dx - \alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon_n\;\psi_n(x)\psi_n(x)\,dx\right]$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2\alpha^4}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;x^2\psi_n(x)\,dx + \frac{\varepsilon_n\hbar^2\alpha^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\psi_n(x)\,dx$$

لاحظ السؤال السابق

$$\because\quad < x^2 >= \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2})$$

$$\therefore\quad < T >= \frac{-\hbar^2\alpha^4}{2m}\frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2}) + \frac{\varepsilon_n\hbar^2\alpha^2}{2m}$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2\alpha^2}{2m}\,(n + \frac{1}{2}) + (2n+1)\,\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$$

$$< T > = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}(n + \frac{1}{2})$$

$$< T > = \hbar^2 \frac{m\omega}{2\hbar m}(n + \frac{1}{2})$$

$$< T > = \frac{1}{2}(n + \frac{1}{2})\hbar\,\omega = \frac{1}{2}E_n$$ وهو المطلوب

تكاملات مفيدة: اولا

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = 0 \qquad (n \text{ odd})$$

اذا كانت n فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

Example: 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\; e^{-ax^2} dx = 0$$

Example: 2

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = 0$$

ثانيا

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

وباخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ (a) نحصل على

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

وباجراء نفس العمل اي باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ (a) نحصل على

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$$

س12 : برهن ان الدوال الموجية التالية هي دوال متعامدة وعيارية

$$\psi_0 = (\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_1 = (\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

لقد بينا في الفصل الثاني ان مجموعة من الدوال التي تحقق المعادلة

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

تسمى مجموعة من الدوال العيارية المتعامدة Orthonormal Set of Function

$\delta_{mn} = 1$ at $m = n$ تكون عيارية اذا

$\delta_{mn} = 0$ at $m \neq n$ تكون متعامدة اذا

<u>اولا</u>

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_1(x)\ dx = \frac{2\alpha^2}{2^{\frac{1}{2}}\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x\ e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0$$

من الملاحظ ان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر اذن الدوال متعامدة

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_1(x)\ dx = 0$$

<u>ثانيا</u>

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_0(x)\ dx = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} = 1$$

اذن الدوال عيارية

اخيرا

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\ \psi_1(x)\ dx = \frac{4\alpha^3}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3} = 1$$

اذن الدوال عيارية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\ \psi_1(x)\ dx = 1$$

وهو المطلوب

س 13: جد $\Delta x\Delta p$ مستخدما $\psi_0(x)$ في السؤال التاسع

Solution:

التفاوت (Variance) في الموضع Δx هو

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta x = \left(<x^2> - <x>^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

التفاوت في الزخم Δp_x هو

$$(\Delta p_x)^2 = <p_x^2> - <p_x>^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta p_x = \left(<p_x^2> - <p_x>^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

اذن يجب عبينا ايجاد كل من $<x>^2$ ، $<x^2>$ ، $<p_x>^2$ ، $<p_x^2>$ وبعد ذلك ايجاد $\Delta x\Delta p$

اولا ايجاد $<x>$

$$<x> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \hat{x}\ \psi_0(x)\ dx$$
$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} x\ dx$$
$$= 0$$

لان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

$$<x> = 0 \quad \Rightarrow \quad <x>^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $<x^2>$

$$<x^2> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \hat{x}^2\ \psi_0(x)\ dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha^2}$$

$$\Delta x = \left(<x^2> - <x>^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=(\frac{1}{2}\frac{1}{\alpha^2}-0)^{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha}$$

ثالثا ايجاد $< p_x >$

$$< p >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\ \ \hat{p}_x\ \psi_0(x)\ \ dx$$

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

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \ dx$$

$$=\frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \frac{\partial}{\partial x}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \ dx$$

$$=\frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ (-\alpha^2x)\ \ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \ dx$$

$$=\frac{i\hbar\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x\ e^{-\alpha^2x^2}dx$$

لان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

$$\therefore\ \ < p_x >=0\qquad\Rightarrow\qquad < p_x >^2=0$$

رابعا ايجاد $< p_x^2 >$

$$< p_x^2 >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\ \ \hat{p}_x^2\ \psi_0(x)\ \ dx$$

بما ان $\hat{p}_x^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \ dx$$

$$= \frac{-\alpha\,\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\, dx$$

ايجاد $\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(-\alpha^2 x\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= -\alpha^2 \frac{\partial}{\partial x}\left(x\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= -\alpha^2\left(e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} - \alpha^2 x^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= -\alpha^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} + \alpha^4 x^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\therefore \quad = \frac{-\alpha\,\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} \left(-\alpha^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} + \alpha^4 x^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right) dx$$

$$= \frac{\alpha^3 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx - \frac{\alpha^5 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha^3 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} - \frac{\alpha^5 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}$$

$$= \alpha^2 \hbar^2 - \frac{1}{2} \alpha^2 \hbar^2$$

`

$$= \frac{1}{2} \alpha^2 \hbar^2$$

$$\Delta p_x = \left(< p_x^2 > - < p_x >^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left(\frac{1}{2} \alpha^2 \hbar^2 - 0 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \ \hbar$$

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \ \hbar \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\alpha}$$

$$\therefore \quad \Delta p_x \Delta x = \frac{1}{2} \hbar$$ وهو المطلوب

Q 14) Using the uncertainty relation $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ estimate the energy ground state of harmonic oscillator

استخدم مبدا الادقة $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ خمن طاقة الحالة الارضية للمتذبذب التوافقي

Solution:

ان هاملتوني المتذبذب التوافقي هو (The Hamiltonian of H.O is)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

القيمة المتوقعة للطاقة هي (The expectation value of energy is)

$$\langle H \rangle = E = \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} < x^2 >$$

$$\because \quad (\Delta p)^2 = < p^2 > - < p >^2 \qquad , \qquad (\Delta x)^2 = < x^2 > - < x >^2$$

ويمكن اثبات بان للمتذبذب التوافقي $< p > = < x > = 0$ وكما يلي

اولا ايجاد $< x >$ (القيمة المتوقعة للموضع)

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n(y) = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$$

بضرب المعادلة اعلاه في $\psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة اذن

$$< y > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = 0 \qquad \Rightarrow \qquad < y >^2 = 0$$

$\because \quad y=\alpha x$

$\therefore \quad <x>^2=0$

ثانيا ايجاد $<p>$ (القيمة المتوقعة للزخم)

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ \hat{p}\ \psi_n(y)\ dy=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ (-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})\ \psi_n(y)\ dy$$

باستخدام المعادلة التالية لايجاد $\dfrac{\partial\psi_n}{\partial y}$

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

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)(-i\hbar)\{-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)\}\ dy$$

$$=-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy-i\hbar\sqrt{2n}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy$$

$$=0 \quad \Rightarrow \quad <p>^2=0$$

$$(\Delta p)^2=<p^2>-0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta p)^2=<p^2>$$

$$(\Delta x)^2=<x^2>-0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta x)^2=<x^2>$$

$$\Delta p\Delta x=\frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p=\frac{\hbar}{2\Delta x}$$

$$\therefore \quad (\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

$$E=\frac{<p^2>}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}<x^2>$$

بتعويض عن $< x^2 >$ ، $< p^2 >$

$$E=\frac{(\Delta p)^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

لدينا $(\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$ وبالتعويض بالمعادلة اعلاه ينتج

$$E=\frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

ولايجاد اقل قيمة للطاقة نفاضل العلاقة الاخيرة وجعلها تساوي صفر

$$\frac{dE}{d(\Delta x)}=-\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3}+m\omega^2(\Delta x)=0$$

$$\therefore \quad (\Delta x)^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$$

وبالتعويض عن $(\Delta x)^2$ لايجاد الطاقة

$$E=\frac{\hbar^2}{8m\cdot(\Delta x)^2}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2=\frac{\hbar}{8m\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)}+\frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$=\frac{1}{4}\hbar\omega+\frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\therefore \quad E=\frac{1}{2}\hbar\omega$$ وهو المطلوب

س15 / برهن اذا كانت n زوجية فان $H_n(-y)=H_n(y)$ واذا كانت n فردية فان $H_n(-y)=-H_n(y)$

البرهان

باستخدام المعادلة

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

When n even =2

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

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

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

$$=e^{y^2}\left\{(-2y)\cdot(-2y)e^{-y^2}-2e^{-y^2}\right\}$$

$$=4y^2-2$$

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

$$\therefore \quad H_n(-y)=H_n(y)$$

When n odd=1

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

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

$\therefore \quad H_n(-y)=-H_n(y)$ When n odd وهو المطلوب

16.) Consider a simple harmonic oscillator find $\Delta p\,\Delta x$.

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2$$

$$(\Delta p)^2 = <p^2> - <p>^2$$

اولا ايجاد $<x>$

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n(y) = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\;\psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\;\psi_{n+1}(y)$$

بضرب المعادلة اعلاه في $\psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;y\;\psi_n(y)\;dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;\psi_{n-1}(y)\;dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;\psi_{n+1}(y)\;dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة اذن

$$<y> = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;y\;\psi_n(y)\;dy = 0 \qquad \Rightarrow \qquad <y>^2 = 0$$

$$\because\quad y = \alpha x$$

$$\therefore\quad <x>^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $<x^2>$

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\;\psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\;\psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

بضرب في $\psi_{n+1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\;y\;\psi_n(y)\;dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\;\psi_{n-1}(y)\;dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\psi_{n+1}(y)\;dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة وعيارية اي ان

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy = 0$$

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_{n}(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \qquad \text{(b)}$$

وبضرب في $\psi_{n-1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_{n}(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y) \psi_{n+1}(y)\ dy$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_{n}(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \qquad \text{(c)}$$

وبضرب طرفي المعادلة (a) في $y\ \psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n}(y)\ y^2 \psi_{n}(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_{n}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_{n}(y)\ dy$$

وبالتعويض عن (b) ، (c) في المعادلة الاخيرة ينتج

$$< y^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n}(y)\ y^2 \psi_{n}(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n}{2}} + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}$$

$$< y^2 > = \frac{n}{2} + \frac{n+1}{2} = n + \frac{1}{2}$$

$$y = \alpha x \qquad , \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\because \quad <y^2>=\alpha^2<x^2> \qquad\qquad <x^2>=\frac{y^2}{\alpha^2}$$

$$\therefore \; <x^2>=\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \; (\Delta x)=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})}$$

ملاحضة يمكن ايجاد القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة $<V(x)>$

$$<V(x)>=\frac{1}{2}m\omega^2<x^2>$$

$$<V(x)>=\frac{1}{2}\hbar\omega\,(n+\frac{1}{2})=\frac{1}{2}E_n$$

ثالثا ايجاد $<p>$

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;\hat{p}\;\psi_n(y)\;dy=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})\;\psi_n(y)\;dy$$

باستخدام المعادلة التالية لايجاد $\frac{\partial\psi_n}{\partial y}$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\;\psi_{n-1}(y)$$

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)(-i\hbar)\{-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\;\psi_{n-1}(y)\}\;dy$$

$$=-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;y\;\psi_n(y)\;dy-i\hbar\sqrt{2n}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\;\psi_{n-1}(y)\;dy$$

$$=0 \quad\Rightarrow\quad <p>^2=0$$

رابعا ايجاد $<\hat{p}^2>$

$$<p^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ p^2\psi_n(x)\ dx$$

$$<p^2>=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ \frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2}\ \ dx$$

باستخدام معادلة رقم (2)

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0$$

او

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2}=\frac{m\omega}{\hbar}(\frac{m\omega}{\hbar}x^2-\varepsilon_n)\ \psi_n \qquad \text{Where } \varepsilon_n=(2n+1) \text{ and } \alpha^2=\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2}=\alpha^2(\alpha^2x^2-\varepsilon_n)\ \psi_n$$

$$<p^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ p^2\psi_n(x)\ dx$$

$$<p^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ (-\hbar^2\ \frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2})\ \ dx$$

$$<p^2>=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ \alpha^2(\alpha^2x^2-\varepsilon_n)\ \psi_n\ dy$$

$$<p^2>=-\hbar^2\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ \ \alpha^4x^2\psi_n(x)\ dx-\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon_n\ \psi_n(x)\psi_n(x)\ dx\right]$$

$$<p^2>=-\hbar^2\ \alpha^4\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ x^2\psi_n(x)\ dx+\varepsilon_n\,\hbar^2\ \alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\ \psi_n(x)\psi_n(x)\ dx$$

$$\because \quad <x^2> = \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \quad <p^2> = -\hbar^2 \alpha^4 \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) + \varepsilon_n \hbar^2 \alpha^2$$

$$<p^2> = -\hbar^2 \alpha^2 \ (n+\frac{1}{2}) + (2n+1)\ \hbar^2 \alpha^2$$

$$<p^2> = \hbar^2 \alpha^2 \ (n+\frac{1}{2})$$

$$<p^2> = \hbar^2 \frac{m\omega}{\hbar} \ (n+\frac{1}{2})$$

$$<p^2> = \hbar m\omega \ (n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \quad (\Delta p) = \sqrt{\hbar m\omega \ (n+\frac{1}{2})}$$

$$\therefore \quad \Delta p \, \Delta x = \sqrt{\hbar m\omega \ (n+\frac{1}{2})} \ \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})}$$

$$\therefore \quad \Delta p \, \Delta x = (n+\frac{1}{2}) \ \hbar$$

ملاحضة يمكن ايجاد القيمة المتوقعة للطاقة الحركية $<T>$

$$<T> = \frac{<p^2>}{2m} = \frac{\hbar m\omega}{2m} \ (n+\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2}) \ \hbar\omega = \frac{1}{2} E_n$$

Chapter Five

The One Electron Atom الذرة الاحادية الالكترون

يتضمن هذا الفصل المسائل التي يكون فيها الجهد او (الطاقة الكامنة) متناظرة كرويا الذي يطلق عليه من الناحية الكلاسيكية بالجهد المركزي (Central Potential) والمقصود به هو ان الطاقة تعتمد فقط على المسافة القطرية بين الجسم ونقطة الاصل وتعرف رياضيا بـ $V(\vec{r}) = V(r)$

Central potential: is the potential that depend only on the radial distance i.e.

$$V(\vec{r}) = V(r)$$

وفي هذا الفصل سنقوم بدراسة الذرة الاحادية الالكترون التي تتكون من نواة ذات شحنة (ze) وإلكترون يدور حولها وسندرس بشكل مركز على النظرية الكمية لذرة الهيدروجين Quantum Theory of Hydrogen Atom

أن الطاقة الكامنة الناتجة من تجاذب الالكترون والنواة هو $V(r) = -\dfrac{k}{r}$ ، حيث ان k مقدار ثابت ويساوي $ze^2/4\pi\varepsilon_\circ$ (حيث ان $z=1$ لذرة الهيدروجين)

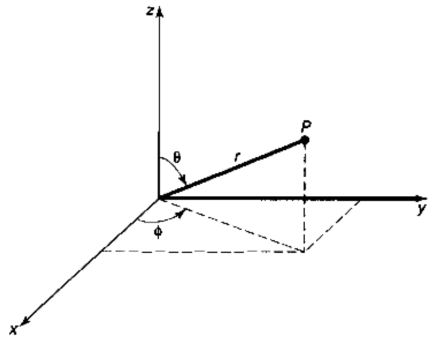
$$\therefore \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$$

من المعادلة الاخيرة نلاحظ ان الطاقة الكامنة تعتمد على الاحداثي القطري فقط .

في الأبعاد الثلاثة ترتبط المسافة r بين الجسم ونقطة الاصل بالاحداثيات الكارتيزية كما يلي

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$$

اي ان دالة الطاقة لجهد مركزي $V(r)$ هي دالة للمتغيرات الثلاثة x, y, z أو $V = V(x, y, z)$ في المحاور الكارتيزية لهذا السبب يفضل استخدام الاحداثيات القطبية الكروية (r, θ, ϕ) لكي تبقى الطاقة الكامنة معتمدة على متغير واحد هو r



أن الإحداثيات القطبية الكروية ترتبط مع الاحداثيات الكارتيزية بالعلاقات التالية:

$$\left.\begin{aligned} x &= r\ \sin\theta\cos\phi \\ y &= r\ \sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\} \qquad (a)$$

اما معكوس هذه التحولات فهي كالاتي

$$\left.\begin{aligned} r^2 &= x^2 + y^2 + z^2 \\ \tan\phi &= \frac{y}{x} \\ \cos\theta &= \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}\right\} \qquad (b)$$

$\theta =$ الزاوية المحصورة بين المتجه الشعاعي $(\vec{r})$ والاتجاه الموجب للمحور z وتدعى بزاوية السمت

(Zenith angle)

$\phi =$ الزاوية المحصورة بين مسقط المتجه الشعاعي $(\vec{r})$ على المستوي xy والاتجاه الموجب للمحور (x)

وتدعى بزاوية الزوال (Azimuth angle)

The domain of r is $0 \to \infty$

The domain of θ is $0 \to \pi$

The domain of ϕ is $0 \to 2\pi$

The element volume $d\tau = dv = dx\ dy\ dz$ in Cartesian coordinate become in spherical coordinate $d\tau = r^2 \sin\theta\, dr\ d\theta\ d\phi$

$d\tau = r^2 \sin\theta dr\ d\theta\ d\phi$ (عنصر الحجم التفاضلي في المحاورالقطبية الكروية)

The form of del operator $\vec{\nabla}$ is

$$\vec{\nabla} = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z}$$ (مؤثر ديل في الاحداثيات الكارتيزية)

ولغرض تحويل المركبات اعلاه الى المحاور الكروية فاننا نحتاج الى تفاضلات المحاور z, y, x بدلالة المحاور الكروية. ويتم ذلك باستخدام قاعدة التفاضل المتسلسل كالاتي

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

لاحظ اننا لكي نجد $\frac{\partial}{\partial x}$ ، $\frac{\partial}{\partial y}$ ، $\frac{\partial}{\partial z}$ فإننا يجب أن نجد التفاضلات $\frac{\partial r}{\partial x}$ ، $\frac{\partial r}{\partial y}$ ، $\frac{\partial r}{\partial z}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial x}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial y}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial z}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial x}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial y}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial z}$

ويتم ذلك عن طريق المعادلات (b) فيكون لدينا

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$2r\frac{\partial r}{\partial x} = 2x + 0 + 0$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\ \cos\phi$$

وبنفس الأسلوب

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\ \sin\phi$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta$$

ولإيجاد $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ نجري الخطوات التالية

$$\cos\theta = \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$-\sin\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{z}{2}(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{3}{2}}(2x)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{z\,x}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}\sin\theta}$$

$$= \frac{z\,x}{r^3 \sin\theta}$$

$$= \frac{r^2 \cos\theta \; \sin\theta \, \cos\phi}{r^3 \sin\theta}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta \; \cos\phi}{r}$$

وبالاسلوب نفسه

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta \; \sin\phi}{r}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$$

بقي لدينا تغيير ϕ بالنسبة لكل من z, y, x كل على انفراد

$$\tan\phi = \frac{y}{x}$$

$$\sec^2\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{r\,\sin\theta\,\sin\phi}{r^2\sin^2\theta\,\cos^2\phi}\,\cos^2\phi$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$

والنتائج اعلاه يمكن ادراجها في الجدول ادناه

$$\frac{\partial r}{\partial x}=\sin\theta\cos\phi \qquad \frac{\partial r}{\partial y}=\sin\theta\sin\phi \qquad \frac{\partial r}{\partial z}=\cos\theta$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x}=\frac{\cos\theta\ \cos\phi}{r} \qquad \frac{\partial\theta}{\partial y}=\frac{\cos\theta\ \sin\phi}{r} \qquad \frac{\partial\theta}{\partial z}=-\frac{\sin\theta}{r}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial x}=-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta} \qquad \frac{\partial\phi}{\partial y}=\frac{\cos\phi}{r\sin\theta} \qquad \frac{\partial\phi}{\partial z}=0$$

$$\therefore\quad \frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$=\sin\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+(-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$=\sin\theta\ \sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\ \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$=\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}+(-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})$$

مؤثر ديل في الاحداثيات الكروية

$$\therefore\quad \vec{\nabla}=\hat{r}\frac{\partial}{\partial r}+\hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

المؤثرالابلاسي بدلالة الاحداثيات القطبية الكروية

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

معادلة شرودنكر في الاحداثيات القطبية الكروية

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi)+V(r)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi) \qquad (1)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)\,\psi(r,\theta,\phi)=E\,\psi(r,\theta,\phi) \qquad (2)$$

لأجل حل المعادلة (2) نستخدم طريقة فصل المتغيرات Separation of variable وذلك بوضع

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y(\theta,\phi) \qquad (3)$$

حيث R دالة لـ r بينما Y هي دالة لـ θ , ϕ فقط

من معادلة (3) نستطيع كتابة

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial r}&=Y\frac{\partial R}{\partial r}\\ \frac{\partial\psi}{\partial\theta}&=R\frac{\partial Y}{\partial\theta}\\ \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}&=R\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

واذا عوضنا عن $\psi(r,\theta,\theta)=R(r)\,Y(\theta,\phi)$ ومشتقاتها من المعادلتين (3) ، (4) نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\,Y\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,R\frac{\partial Y}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}R\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)\,RY=ERY$$

وعند قسمة المعادلة اعلاه على $R\,Y$ نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)=E \qquad (5)$$

نضرب طرفي المعادلة (5) بالمقدار $(-\frac{2mr^2}{\hbar^2})$ وإعادة ترتيب المعادلة نحصل على المعادلة التالية

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \tag{6}$$

نلاحظ ان الطرف الايسر من المعادلة (6) يعتمد على r فقط ، بينما الطرف الايمن على ϕ,θ فقط . لذا يجب ان يكون كل طرف منهما مساوي الى عدد ثابت مثل λ

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=\lambda$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=\lambda$$

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]R=\lambda R \tag{7}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0 \tag{8}$$

ولحل المعادلة (8) ينبغي فصل متغيريها θ , ϕ وذلك بوضع

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\ \Phi(\phi) \tag{9}$$

وبتعويض المعادلة (9) في المعادل (8) نحصل على

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\ \Phi(\phi)\ \frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\ \Theta(\theta)\ \frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda\ \Theta(\theta)\ \Phi(\phi)=0$$

وبالقسمة على $\Theta(\theta)\ \Phi(\phi)$

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\ \frac{1}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\ \frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\frac{1}{\Phi(\phi)\ \sin^2\theta}\ \frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda=0$$

نضرب المعادلة اعلاه بـ $\sin^2\theta$ وتحويل الحد الثاني الى الجهة الاخرى

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\ \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\ \frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\lambda\ \sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi(\phi)}\ \frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}$$

ونفس النقاش السابق نرى ان الطرف الايمن من المعادلة اعلاه يعتمد على θ بينما الطرف الايسر يعتمد على ϕ

لذا يجب ان يكون كل طرف منهما مساوي الى عدد ثابت مثل μ

$$-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}=\mu \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+\mu\ \Phi(\phi)=0 \tag{10}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\,\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{\mu}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \tag{11}$$

حل المعادلات التفاضلية <u>Solution of Differation Equation</u>

نلاحظ من المعادلات السابقة اننا ادخلنا ثابتي الفصل λ , μ ومن الملاحظ ايضا ان الطاقة الكامنة $V(r)$ تظهر فقط في المعادلة (7) اي معادلة R.اي ان الدالة R والمعادلة التفاضلية الخاصة بها تعتمد بشكل ظاهر على نوع دالة الطاقة الكامنة $V(r)$ بينما الدالتان Θ,Φ ومعادلتهما التفاضليتان لاتختلفان اذا اختلف نوع دالة الطاقة الكامنة لان $V(r)$ لاتظهر في هاتين المعادلتين.

الشرط العياري لدالة الموجة

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

حيث ان

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\ \Theta(\theta)\ \Phi(\phi)$$

$$\psi^*(r,\theta,\phi)=R^*(r)\ \Theta^*(\theta)\ \Phi^*(\phi)$$

وبما اننا استخدامنا الاحداثيات القطبية الكروية عنصر الحجم $d\tau$ هو

$$d\tau=r^2\sin\theta\ dr\ d\theta\ d\phi$$

$$\therefore\quad \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}R^*(r)R(r)\ \Theta^*(\theta)\Theta(\theta)\ \Phi^*(\phi)\Phi(\phi)\ r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi=1$$

$$\int_0^\infty R^*(r)R(r)\ r^2dr\int_0^\pi\Theta^*(\theta)\ \Theta(\theta)\ \sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}\Phi^*(\phi)\ \Phi(\phi)\ d\phi=1$$

$$\Rightarrow$$

$$\int_0^\infty R^*(r)\,R(r)\ r^2dr=1$$

$$\int_0^{\pi} \Theta^*(\theta)\ \Theta(\theta) \sin\theta\ d\theta = 1$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\phi)\ \Phi(\phi)\ d\phi = 1$$

<u>اولا حل المعادلة الخاصة لـ</u> $\Phi(\phi)$

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + \mu\ \Phi(\phi) = 0 \qquad (10)$$

نفرض ان الحل للمعادلة اعلاه هو

$$\Phi(\phi) = Ae^{ik\phi}$$

وباخد المشتقة الثانية للمعادلة $\Phi(\phi) = Ae^{ik\phi}$ وتعويضها في معادلة (10) نحصل على

$$\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} = ik\,Ae^{ik\phi} \quad , \quad \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -k^2 Ae^{ik\phi}$$

$$-k^2 Ae^{ik\phi} + \mu\, Ae^{ik\phi} = 0$$

$$(-k^2 + \mu) Ae^{ik\phi} = 0$$

$$-k^2 + \mu = 0 \quad \Rightarrow \quad k^2 = \mu \quad ، \quad k = \pm\sqrt{\mu}$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi) = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi}$$

وبما ان دالة الموجة يجب ان تكون فريدة او احادية القيمة في اي نقطة اي ان

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$$

$$Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,(\phi + 2\pi)}$$

$$Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} \cdot e^{\pm i\sqrt{\mu}\,2\pi}$$

$$e^{\pm i\sqrt{\mu}\,2\pi)} = 1$$

وباستخدام العلاقة $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\sin\theta$

$$\cos 2\pi\sqrt{\mu} \pm i\sin 2\pi\sqrt{\mu} = 1$$

وواضح ان الحد الخيالي يجب ان يساوي صفر

$$\sin 2\pi\sqrt{\mu} = 0$$

$$\cos 2\pi\sqrt{\mu}=1 \quad \Rightarrow \quad 2\pi\sqrt{\mu}=\cos^{-1}1$$

$$\therefore \quad \sqrt{\mu}=m \qquad (12)$$

حيث أن $m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots\cdots\cdots$

ويسمى $m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots$ بالعدد الكمي المغناطيسي (Magnetic quantum number)

$$\therefore \quad \Phi(\phi)=Ae^{im\phi}$$

ولإيجاد A نستخدم الشرط العياري وكما يلي

$$\int \Phi^*(\phi)\, \Phi(\phi)\, d\phi=1$$

$$\int_0^{2\pi} A^* e^{-im\phi} A e^{im\phi}\, d\phi=1$$

$$A^2\int_0^{2\pi} d\phi=1$$

$$A=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \qquad (13)$$

حيث ان $m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots\cdots$

تماثل الجزء الزوالي لدالة الموجة

في الاحداثيات الكارتيزية تماثل الدالة ψ يعني التحويل من $\vec{r}\rightarrow -\vec{r}$ ، ولكن في الاحداثيات القطبية الكروية يعني

$$r\rightarrow r \quad ، \quad \theta\rightarrow \pi-\theta \quad ، \quad \phi\rightarrow \pi+\phi$$

$$\phi(\pi+\phi)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\, e^{im(\phi+\pi)}$$

$$=(2\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{im\phi}\cdot e^{im\pi}$$

$$e^{im\pi}=\cos m\pi+i\sin m\pi$$

1. $\sin m\pi=\sin 0=\sin\pi=\sin 2\pi=0$
2. $\cos m\pi=(-1)^m$

$$\therefore \quad \Phi(\pi+\phi)=(-1)^m\,\Phi(\phi)$$

$$\therefore \quad \text{Parity of } \ \Phi(\phi) \ \text{ is } \ (-1)^m$$

اي بعبارة اخرى ان تماثل Φ فهو يعني ان الدالة $e^{im\phi}$ يجب ان تضرب بالعامل $e^{im\pi}$ والذي يساوي $(-1)^m$

حل المعادلة الخاصة بـ $\Theta(\theta)$ المعادلة (11)

$$\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\,\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{\mu}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \qquad (11)$$

وبالتعويض عن الكمية $\mu=m^2$ في المعادلة اعلاه ينتج

$$\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\,\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \qquad (14)$$

ولاجل حل المعادلة اعلاه نعمل بعض التسهيلات الرياضية

نفرض ان $\omega=\cos\theta$ ، $\Theta(\theta)=p(\omega)$

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{d\omega}{d\theta}\cdot\frac{d}{d\omega}$$

$$\frac{d}{d\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d\omega}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\,(-\sin\theta\frac{d}{d\omega})(\sin\theta(-\sin\theta\,\frac{d}{d\omega}\,p(\omega)))+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\,p(\omega)=0$$

$$\frac{1}{d\omega}(\sin^2\theta\,\frac{dp(\omega)}{d\omega})+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})p(\omega)=0$$

$$\because\quad \cos^2\theta+\sin^2\theta=1\quad\rightarrow\quad \sin^2\theta=1-\cos^2\theta$$

$$\therefore\quad \sin^2\theta=1-\omega^2$$

$$\frac{1}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\,\frac{dp(\omega)}{d\omega}\right]+(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2})\,p(\omega)=0 \qquad (15)$$

بما ان قيم $0\le\theta\le\pi$ فان قيم ω المقابلة ستكون $-1\le\omega\le+1$. لو لاحضنا المعادلة (15) نجد انها معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية فيها الثابت λ (Second order non linear differential equation) مجهول بينما m له قيم محددة وكما بينا سابقا وكما في المعادلات (12) (13) ، بصورة عامة فان حلولها تصبح مالانهاية في $\omega=\pm1$ وهذه هي حلول غير مقبولة فيزيائيا. اما الحل المقبول يقابل حالة خاصة فيها

$$\lambda=\ell(\ell+1)\quad ،\quad \ell=0,1,2,3,\cdots\cdots\quad ,\ \ell\ge|m|$$

حيث ان ℓ يسمى العدد الكمي للزخم الزاوي المداري Angular Momentum Quantum Number

فالحلول المقبولة للمعادلة (15) تدعى دوال ليجندر المترافقة Associated Legender functions اي ان

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} p_\ell(\omega) \tag{16}$$

$$\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \quad , \ \ell \geq |m|$$

حيث تسمى الدالة $p_\ell(\omega)$ كثير حدود ليجندر (Legender polynomial) من الرتبة ℓ والمعرفة بالمعادلة

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} \left[(\omega^2 - 1)^\ell \right] \tag{17}$$

في حالة $m = 0$ فان المعادلة (16) تعطينا

$$p_\ell^0(\omega) = p_\ell(\omega) \tag{18}$$

اي ان كثيرات حدود ليجندر تحقق المعادلة (15) عندما يكون $m = 0$ والذي يعني $p_\ell(\omega)$ تحقق المعادلة التالية

$$\frac{d}{d\omega}\left[(1-\omega^2) \frac{dp_\ell}{d\omega} \right] + \ell(\ell+1) p_\ell = 0 \tag{19}$$

صفات دوال ليجندر

اولا $p_\ell(\omega)$ هي دوال حقيقية على شكل كثيرات حدود في ω ومن درجة ℓ وتماثل $(-1)^\ell$ ندرج بعض منها:

$$p_0(\omega)=1$$

$$p_1(\omega)=\omega$$

$$p_2(\omega)=\tfrac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_3(\omega)=\tfrac{1}{2}(5\omega^2-3\omega)$$

ثانيا الدوال $p_\ell^m(\omega)$ هي عبارة عن الكمية $(1-\omega)^{\frac{|m|}{2}}$ مضروبة في كثيرة حدود حقيقية من الدرجة $(\ell-|m|)$

ولها تماثل $(-1)^{\ell-|m|}$ وفي مايلي بعض من دوال ليجندر المترافقة

$$p_1^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \qquad \ell=1 \ ، \ m=\pm1$$

$$p_2^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega \qquad \ell=2 \ ، \ m=\pm1$$

$$p_3^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot \tfrac{3}{5}(5\omega-1) \qquad \ell=3 \ ، \ m=\pm1$$

$$p_2^{\pm2}(\omega)=(1-\omega^2)\cdot 3 \qquad \ell=2 \ ، \ m=\pm2$$

$$p_3^{\pm2}(\omega)=(1-\omega^2)\cdot 15\omega \qquad \ell=3 \ ، \ m=\pm2$$

$$p_3^{\pm3}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{3}{2}}\cdot 15 \qquad \ell=3 \ ، \ m=\pm3$$

Example : Set up the following associated Legender function $p_2^1(\omega)$

Solution: $\ell = 2$ ، $m = 1$

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} p_\ell(\omega)$$

حيث ان

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$\ell = 2 \;\Rightarrow\; p_2(\omega) = \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{d\omega^2}\left[(\omega^2-1)^2\right]$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} \cdot \frac{d}{d\omega}(\omega^2-1)^2$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega}\, 2\cdot(\omega^2-1)\cdot 2\omega$$

$$= \frac{1}{2} \frac{d}{d\omega}(\omega^3-\omega)$$

$$= \frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_2^1(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{d\omega} \frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$= (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \cdot 3\omega$$

$\therefore \quad p_2^1(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{1}{2}} \cdot 3\omega$ وهو المطلوب

ثالثا الدوال $p_\ell^m(\omega)$ هي دوال متعامدة مع بعضها التعض لقيم $-1 \le \omega \le +1$

$$\int_{-1}^{+1} p_\ell^m(\omega) p_{\ell'}^m(\omega) \; d\omega = 0$$

لكنها غير عياريه أي أن

$$\int_{-1}^{+1} \left|p_\ell^m(\omega)\right|^2 d\omega = \frac{2}{2\ell+1} \cdot \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}$$

وعند ضرب دوال ليجندر المترافقة $p_{\ell'}^m(\omega)$ بالعدد $\left[\frac{2}{2\ell+1} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$ تكون عندئذ دوال عيارية

Spherical Harmonics   التوافقيات الكروية

Spherical Harmonics function is simply the product result of zenithal times azimuthal parts of the wave function i.e.

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = p_\ell^m \cdot \Phi_m(\phi)$$

تدعى حاصل ضرب الجزء السمتي بالجزء الزوالي من دالة الموجة بالتوافقيات الكروية اي عند مزج Θ ، Φ نحصل على:

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = N_\ell^m \, p_\ell^m(\cos\theta) \cdot e^{im\phi} \qquad (20)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots\cdots \quad ، \quad \ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots \quad , \quad \ell \geq |m|$$

حيث ان N_ℓ^m يدعى بثابت المعايرة لدالة التوافقيات الكروية ويعطى بالعلاقة التالية

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}}$$

ان دالة التوافقيات الكروية تكون مجموعة من الدوال الذاتية العيارية والمتعامدة كما ان الدالة Y_ℓ^m هي دالة ذاتية للمعادلة (8) بقيمة ذاتية قدرها $\lambda_\ell = \ell(\ell+1)$ والمسالة منحلة بدرجة انحلال مقدارها $(2\ell+1)$ وذلك لان لكل قيمة من ℓ هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m اي ان

$$m = -\ell \, , \, \ell+1, \cdots\cdots\cdots \ell-1 \, , \, \ell$$

Example $\quad \ell = 1 \;\Rightarrow\; m = -1,0,1$

$\qquad\qquad \ell = 2 \;\Rightarrow\; m = -2,-1,0,1,2$

ان تماثل دالة التوافقيات الكروية هو $(-1)^\ell$ لان تماثل الدالة $p_\ell^m(\cos\theta)$ الجزء السمتي هو $(-1)^{(\ell-|m|)}$ وتماثل الجزء الزوالي هو $(-1)^{|m|}$ لذا فان تماثل دالة التوافقيات الكروية يصبح $(-1)^\ell$ وادناه بعض الدالات التوافقيات الكروية لقيم مختلفة لـ ℓ ، m

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm1} = \pm\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm1} = \pm\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta\cos\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2\theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

Example : Set up the following Spherical Harmonics function Y_2^{+1}

Solution:

$$Y_2^{+1} \Rightarrow \quad \ell = 2 \quad ، \quad m = 1$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = N_\ell^m \, p_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}$$

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= (-1)^{\frac{1}{2}\cdot 2} \cdot \left(\frac{5}{4\pi} \cdot \frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left(\frac{5}{24\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} \, p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$= \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{d\omega^2}\left[(\omega^2-1)^2\right]$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} \frac{d}{d\omega} (\omega^2-1)^2$$

$$=\frac{1}{8}\frac{d}{d\omega}2(\omega^2-1)\cdot 2\omega$$

$$=\frac{1}{2}\frac{d}{d\omega}(\omega^3-\omega)$$

$$=\frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_2^1(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\omega}\frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega$$

$$=3\cos\theta\sin\theta$$

$$\therefore \quad Y_2^1=-\left(\frac{5}{24\pi}\right)^{\frac{1}{2}}3\cos\theta\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$=-\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\sin\theta\, e^{i\phi}$$

بعد الحصول على الحل الرياضي الخاص بـ Θ ، Φ وجدنا ان الدالة Φ تحتوي على الثابت الوسيط m المحدد بالاعداد الصحيحة الموجبة والسالبة اي ان

$m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots\cdots\cdots$ (العدد الكمي المغناطيسي)

بينما الدالة Θ تحتوي على ثابت وسيط آخر ℓ محدد باعداد صحيحة موجبة اكبر او تساوي $|m|$

$\ell=0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots$ $\quad \ell\geq|m|$ العدد الكمي للزخم الزاوي (المداري)

ثالثا الجزء القطري

من المعادلة (7) وبعد التعويض عن $\lambda=\ell(\ell+1)$ تتحول الى

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}(E-V(r))=\ell(\ell+1)R$$

وبالقسمة على r^2 والترتيب نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0 \qquad (21)$$

تسمى المعادلة (21) بمادلة شرودنكر القطرية ولاجل ايجاد الجزء القطري لدالة الموجة R يجب معرفة الطاقة الكاملة $V(r)$ وفي هذا الفصل سندرس ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة لها متناولين في دراستنا الجهد المتبادل بين الالكترون والنواة

The Hydrogen and Hydrogen Like Atom ذرة الهيدروجين والذراة الشبيهة لها

من المعروف ان الذرة الشبيهة بذرة الهيدروجين تتكون من نواة شحنتها Ze ويدور حولها الكترون واحد في مدارها الخارجي ، وعلية ان الطاقة الكامنة للنظام

$$V(r)=\frac{-Ze}{4\pi\varepsilon_\circ r} \quad\Rightarrow\quad V(r)=\frac{-k}{r} \quad ، \quad k=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$$

وبالتعويض عن $V(r)=\dfrac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$ بالمعادلة (21) نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E+\frac{k}{r})-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0$$

وبضرب المعادلة الاخيرة بالكمية $\dfrac{-\hbar^2}{8mE}$

$$\frac{-\hbar^2}{8mEr^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(\frac{-\hbar^2}{8mE})(E+\frac{k}{r})+\frac{\hbar^2}{8mE}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0$$

$$\frac{-\hbar^2}{8mEr^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})-\frac{kR}{4Er}+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{8mEr^2}R-\frac{R}{4}=0 \qquad (22)$$

نفرض ان

$$\alpha^2 = \frac{-8mE}{\hbar^2} \qquad (23)$$

$$n = \frac{-\alpha k}{4E}$$

وبالتعويض بالمعادلة (22) ينتج

$$\frac{1}{\alpha^2 r^2}\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) - \frac{n}{\alpha}\frac{R}{r} + \frac{\ell(\ell+1)}{\alpha^2 r^2} R - \frac{R}{4} = 0$$

نبدل المتغير المستقل بـ ρ من خلال العلاقة

$$\rho = \alpha r$$

$$\therefore \ \frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr} \cdot \frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{d}{dr} = \alpha \frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{1}{\rho^2}(2\rho \frac{dR}{d\rho} + \rho^2 \frac{d^2R}{d\rho^2}) + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right] R = 0$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right] R = 0 \qquad (24)$$

لقيم كبيرة لـ ρ المعادلة (24) تختصر الى

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} - \frac{R}{4} = 0$$

لحل المعادلة اعلاه نفرض الحل بالصيغة هو

$$R(\rho) = e^{c\rho}$$

لايجاد قيمة الثابت c نعوض الحل في المعادلة وكما يلي:

$$c^2 e^{c\rho} - \frac{e^{c\rho}}{4} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad (c^2 - \frac{1}{4})e^{c\rho} = 0$$

$$e^{c\rho} \neq 0 \qquad \Rightarrow \qquad c^2 - \frac{1}{4} = 0$$

$$\therefore \quad c = \pm\frac{1}{2}$$

الحل بصيغة الاس الموجب غير مقبول فيزياويا وذلك لانه يقترب من المالانهاية عندما تقترب ρ من المالانهاية وياخذ الحل السالب لانه يحقق الشرط الحدودي.

$$\therefore \quad R(\rho) = e^{-\rho/2} \tag{25}$$

للحصول على الحل المضبوط للمعادلة 24 فاننا نضرب المعادلة 25 بدالة الى ρ مثل $F(\rho)$ وكما يلي

$$R(\rho) = F(\rho)\, e^{-\rho/2} \tag{26}$$

ونفرض ان

$$F(\rho) = \rho^s L(\rho) \tag{27}$$

حيث ان s هو عدد موجب وان $L(\rho)$ هي متسلسلة لانهائية بالصيغة

$$L(\rho) = a_\circ + a_1\rho + a_2\rho + \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots = \sum_{\upsilon=0}^{\infty}\rho^{\upsilon}$$

وان $a_\circ \neq 0$

بتعويض المعادلة 25 في المعادلة 24 نحصل على

$$R'(\rho) = -\frac{1}{2}e^{-\rho/2}F(\rho) + e^{-\rho/2}F'(\rho)$$

$$R''(\rho) = \frac{1}{4}e^{-\rho/2}F(\rho) + (-\frac{1}{2}e^{-\rho/2}F'(\rho)) + \{-\frac{1}{2}e^{-\rho/2}F'(\rho) + e^{-\rho/2}F''(\rho)\}$$

$$R''(\rho) = (F''(\rho) - F'(\rho) + \frac{1}{4}F(\rho))e^{-\rho/2}$$

وبالتعويض عن $R(\rho)$ ، $R'(\rho)$ ، $R''(\rho)$

$$\{F''(\rho)-F'(\rho)+\frac{1}{4}F(\rho)\}e^{-\rho/2}+\frac{2}{\rho}\{F'(\rho)-\frac{1}{2}F(\rho)\}e^{-\rho/2}$$

$$+\{\frac{n}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}\}F(\rho)e^{-\rho/2}$$

وبالقسمة على $e^{-\rho/2}$ والتبسيط نحصل

$$F''(\rho)+(\frac{2}{\rho}-1)F'(\rho)+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})F(\rho)=0 \qquad (28)$$

وبتعويض المعادلة 27 في المعادلة 28 نحصل على

$$F'(\rho)=s\rho^{s-1}L(\rho)+\rho^{s}L'(\rho)$$

$$F''(\rho)=s(s-1)\rho^{s-2}\cdot L(\rho)+s\rho^{s-1}L'(\rho)+s\rho^{s-1}L'(\rho)+\rho^{s}L''(\rho)$$

$$=\rho^{s}L''(\rho)+2s\,\rho^{s-1}L'(\rho)+s(s-1)\rho^{s-2}L(\rho)$$

بتعويض $F(\rho)$ ، $F'(\rho)$ ، $F''(\rho)$ نحصل على

$$=\rho^{s}L''(\rho)+2s\,\rho^{s-1}L'(\rho)+s(s-1)\rho^{s-2}L(\rho)$$

$$+(\frac{2}{\rho}-1)\,[\rho^{s}L'(\rho)+s\,\rho^{s-1}L(\rho)]+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell-1)}{\rho^2})\rho^{s}L(\rho)=0$$

وبضرب العلاقة الاخيرة بـ $\dfrac{\rho^2}{\rho^s}$

$$\rho^2\,L''(\rho)+2s\,\rho^{s}L'(\rho)+s(s-1)L(\rho)+(\frac{2}{\rho}-1)[\rho^{s}L'(\rho)+s\rho^{s}L(\rho)]$$

$$+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell-1)}{\rho^2})\rho^2L(\rho)=0$$

والعلاقة الاخيرة يمكن كتابتها بالشكل التالي

$$\rho^2\,L''(\rho)+[2s\,\rho+(2\rho-\rho^2)]L'(\rho)+[s(s-1)+s(\frac{2}{\rho}-1)\rho]L(\rho)$$

$$+(\rho(n-1)-\ell(\ell-1))L(\rho)=0$$

$$\therefore\ \rho^2 L''(\rho)+\rho\,[(2s+1)-\rho]L'(\rho)+[s(s-1)+\rho(n-s-1)-\ell(\ell-1)]\,L(\rho)=0 \qquad (29)$$

وبما ان $L(0)\neq 0$ والمعادلة 29 يجب ان تكون صحيحة لكل قيم ρ ، لذلك لقيمة $\rho=0$ نحصل على

$$s(s-1)=\ell(\ell-1)$$

وبحل هذه المعادلة للمتغير s

$$s^2+s-\ell(\ell+1)+s\ell-s\ell=0$$

$$s^2+s(\ell+1)-s\ell-\ell(\ell+1)=0$$

$$s[s+(\ell+1)]-\ell[s+(\ell+1)]$$

$$[s+(\ell+1)](s-\ell)=0$$

$$s=\ell \qquad \text{or} \qquad s=-(\ell+1)$$

وبما ان $\ell\geq 0$ فان الحل $s=-(\ell+1)$ يجب ان يهمل لانه يجعل المعادلة $R(\rho)$ لانهاية عند $\rho=0$ لذلك فان المعادلة 29 تصبح

$$\rho L''(\rho)+[(2\ell+1)-\rho]L'(\rho)+(n-\ell-1)L(\rho)=0 \qquad (30)$$

واذا عوضنا عن $L(\rho)=\sum_{\upsilon=0}^{\infty}a_\upsilon\rho^\upsilon$ في المعادلة 30 نحصل :

$$L'(\rho)=\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}$$

$$L''(\rho)=\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-2}$$

$$\therefore\quad \sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=0}^{\infty}a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}=0$$

$$\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}$$

$$+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_\circ=0$$

لنفرض ان $\upsilon=m+1$ ونعوض عن ذلك في الحد الاول والحد الثالث من العلاقة الاخيرة فنحصل على

$$\sum_{m=1}^{\infty}(m+1)m\;a_{m+1}\,\rho^m-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\,a_\upsilon\,\rho^\upsilon+2(\ell+1)\sum_{m=1}^{\infty}(m+1)\;a_{m+1}\,\rho^m$$

$$+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty} a_{\upsilon}\,\rho^{\upsilon} + 2(\ell+1)\,a_1 + (n-\ell-1)\,a_{\circ} = 0$$

بابدال الرمز m في الحد الاول والحد الثالث بالرمز υ

$$\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\{\upsilon(\upsilon-1)\,a_{\upsilon+1} - \upsilon\,a_{\upsilon} + 2(\ell+1)(\upsilon+1)\,a_{\upsilon+1} + (n-\ell-1)\,a_{\upsilon}\}\rho^{\upsilon}$$

$$+2(\ell+1)\,a_1 + (n-\ell-1)\,a_{\circ} = 0$$

لاجل ان تحقق هذه العلاقة يجب ان يكون

$$2(\ell+1)\,a_1 + (n-\ell-1)\,a_{\circ} = 0$$

$$a_{\upsilon+1}\,(\upsilon+1)\,(\upsilon+2(\ell+1)) - a_{\upsilon}\,(\upsilon-n+\ell+1) = 0$$

ومن ذلك نحصل

$$a_1 = \frac{-(n-\ell-1)}{2(\ell+1)}\,a_{\circ}$$

$$\frac{a_{\upsilon+1}}{a_{\upsilon}} = \frac{\upsilon-n+\ell+1}{(\upsilon+1)(\upsilon+2\ell+2)}$$

ولقيم كبيرة لـ υ نجد ان

$$\frac{a_{\upsilon+1}}{a_{\upsilon}} = \frac{1}{\upsilon}$$

لذلك فان

$$L(\rho) \approx e^{\rho}$$

وعليه فان الدالة القطرية

$$R(\rho) = e^{\rho}\cdot e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$\approx e^{\frac{\rho}{2}}$$

وهذا غير مسموح لان $R(\rho)$ تزداد اسيا مع ρ وعندما $\rho \to \infty$ فانها تتباعد ولم تعد صالحة كحل ولتحقيق المحدودية فان يجب ان تقطع اي بعبارة اخرى ان تكون الدالة $F(\rho)$ كثيرة حدود بدلا من متسلسلة لانهائية وذلك يمكن عن طريق اختيار n عدد صحيح موجب بحيث ان

$$\upsilon = n - \ell - 1$$

او ان نقول

$$n = \upsilon + \ell + 1$$

وهذا الاجراء يجعل $a_{\upsilon+1}$ (او $a_{n-\ell}$) وكل المعاملات اللاحقة صفر

بما ان اقل قيمة لـ υ هي الصفر فهذا يعني

$$n \geq \ell + 1$$

او ان

$$n > \ell$$

ومن المعروف مسبقا ان $\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \geq |m|$ لذلك فان

$$n = 1,2,3,\cdots\cdots\cdots\cdots > \ell$$

اذن الحالة $n > \ell$ فانه يوجد حل للدالة القطرية بالصيغة

$$R_{n\ell}(\rho) = \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, L_{n\ell} \qquad (31)$$

الدالة $L_{n\ell}(\rho)$ هي كثيرة الحدود ذا الدرجة $(n-\ell-1)$ لذا فان الدالة القطرية $R(\rho)$ هي عبارة عن المقدار $e^{-\frac{\rho}{2}}$ مضروبة في كثيرة حدود من الدرجة $(n-1)$

في الرياضيات الدالة $L_q^p(\rho)$ التي تحقق المعادلة التالية

$$\rho \frac{d^2 L_q^p}{d\rho^2} + (p + 1 - \rho)\,\frac{dL_q^p}{d\rho}(q - p)\, L_q^p = 0 \qquad (*)$$

تسمى بمتسلسلة لاكور المترافقة (Associated Laguerre Polynomials)

التي يعبر عنها رياضيا

$$L_p^q(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho)$$

حيث ان $L_q(\rho)$ تعرف بمتسلسلة لاكور (Laguerre polynomials)

$$L_q(\rho) = e^{\rho}\,\frac{d^q}{d\rho^q}\,(e^{-\rho}\rho^q)$$

بمقارنة المعادلة 30 مع المعادلة التفاضلية (*) نجد ان

حيث $q = n + \ell$ ، $p = 2\ell + 1$ $\qquad L_{n\ell}(\rho) = L_q^p(\rho) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$

اذن المعادلة القطرية بصيغتها النهائية هي :

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\ \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1} \qquad (32)$$

حيث $N_{n\ell}$ هو ثابت المعايرة ويعطى بالعلاقة

$$N_{n\ell} = -\left[\alpha^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\cdot[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_{\circ}}\right)^3 \cdot \frac{(n-\ell-1)!}{2n\cdot[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (33)$$

متسلسلة لاكور المترافقة Associated Laguerre Polynomials $\quad L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \cdot L_{n+\ell}$

متسلسلة لاكور (Laguerre polynomials) $\quad L_{n+\ell} = e^{\rho} \cdot \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho} \cdot \rho^{n+\ell})$

حيث ان $\alpha = \frac{2z}{na_{\circ}}$ ، $a_{\circ}$ نصف قطر مدار بور الاول ، $\rho = \alpha\, r = \frac{2z}{na_{\circ}} r$

وندرج ادناه بعض الامثلة على الجزء القطري

$$R_{10}(\rho) = 2\left(\frac{z}{a_{\circ}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{20}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_{\circ}}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{21}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_{\circ}}\right)^{\frac{3}{2}} \rho\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{30}(\rho) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{z}{a_{\circ}}\right)^{\frac{3}{2}} (6-6\rho+\rho^2)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

Example: Work out the radial wave function R_{10} , R_{20}

Solution:

اولا

$$R_{10} \Rightarrow n=1 \ , \ \ell=0$$

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell} \ \rho^{\ell} \ e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_{\circ}}\right)^{3} \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^{3}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{10} = -\left[\left(\frac{2z}{1\cdot a_{\circ}}\right)^{3} \frac{(1-0-1)!}{2\,1[(1+0)!]^{3}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{a_{\circ}}\right)^{3} \frac{1}{2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -2\left(\frac{z}{a_{\circ}}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \cdot L_{n+\ell}$$

$$L_{n+\ell} = e^{\rho} \ \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho} \ \rho^{n+\ell})$$

$$\therefore \quad L_{1} = e^{\rho} \frac{d}{d\rho}(e^{-\rho} \ \rho)$$

$$= e^{\rho} \ (e^{-\rho} - \rho \ e^{-\rho})$$
$$= 1-\rho$$

$$L_{1}^{1}(\rho) = \frac{d}{d\rho} L_{1} = \frac{d}{d\rho}(1-\rho)$$

$$= -1$$

$$\therefore \quad R_{10}(\rho) = -2 \cdot \left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot (-1)$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

ثانيا R_{20}

$$\Rightarrow \quad n = 2 \quad , \quad \ell = 0$$

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\ \rho^{\ell}\ e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{20} = -\left[\left(\frac{2z}{2\cdot a_\circ}\right)^3 \frac{(2-0-1)!}{2\cdot 2\,[(2+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left[\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^3 \frac{1}{4\cdot 8}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{\,2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}}\ L_{n+\ell}(\rho)$$

$$L_{n+\ell}(\rho) = e^{\rho}\ \frac{d^{\,n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}\ (e^{-\rho}\ \ \rho^{n+\ell})$$

$$\therefore \quad L_2(\rho) = e^{\rho}\ \frac{d^2}{d\rho^2}\ (e^{-\rho}\ \rho^2)$$

$$= e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}\frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\ \rho^2)$$

$$= e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}\ (2\rho\, e^{-\rho} - \rho^2\, e^{-\rho})$$

$$= e^{\rho}\ (-2\rho\, e^{-\rho} + 2e^{-\rho} + \rho^2\ e^{-\rho} - 2\rho\, e^{-\rho})$$

$$\therefore \quad L_2 = \rho^2 - 4\rho + 2$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{\,2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}}\ L_{n+\ell}$$

$$\therefore \quad L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ L_2$$

$$L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ (\rho^2 - 4\rho + 2)$$

$$= 2\rho - 4$$

$$L_2^1(\rho) = -2(2-\rho)$$

$$\therefore \quad R_{20}(\rho) = -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\ [-2(2-\rho)]$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)\ e^{-\frac{\rho}{2}} \qquad \text{وهو المطلوب}$$

وللحصول على الدالات الموجية للذرات الاحادية الالكترون او الذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين نمزج حلول $R_{n\ell}(r)$ من المعادلة (32) وحلول $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ من المعادلة (20) في المعادلة 3 نجد ان

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\ Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell\ e^{-\frac{\rho}{2}}\ L_{n+\ell}^{2\ell+1}\quad Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

او

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2z}{na_\circ}\,r\right)^\ell\ e^{-\frac{zr}{na_\circ}}\ L_{n+\ell}^{2\ell+1}\quad Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}\ P_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

$$p_\ell^m(\cos\theta) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} \; p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \, \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} \left[(\omega^2 - 1)^\ell \right]$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \; L_{n+\ell}(\rho)$$

$$L_{n+\ell} = e^\rho \; \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}} (e^{-\rho} \;\; \rho^{n+\ell})$$

وندرج ادناه بعض الامثلة على الذرات الشبيهة لذرة الهيدروجين لبعض قيم لـ n

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_\circ} \right)^{\frac{3}{2}} \; e^{-\frac{z\,r}{a_\circ}}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_\circ} \right)^{\frac{3}{2}} \; (2 - \frac{z\,r}{a_\circ}) \; e^{-\frac{z\,r}{a_\circ}}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_\circ} \right)^{\frac{3}{2}} \; (\frac{z\,r}{a_\circ}) \; e^{-\frac{z\,r}{2a_\circ}} \; \cos\theta$$

مثال: اوجد دالة الموجة للحالة الارضية لذرة الهيدروجين

<u>الحل</u> ايجاد ψ_{100} اي ان $n=1$ ، $\ell=0$ ، $m=0$

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell} \; Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$R_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ} \right)^3 \; \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \; \rho^\ell \;\; e^{-\frac{\rho}{2}} \; L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{1 \cdot a_\circ} \right)^3 \; \frac{(1-0-1)!}{2 \cdot 1[(1+0)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \; \rho^0 \;\; e^{-\frac{\rho}{2}} \; L_{1+0}^{2\cdot 0+1}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \; L_{n+\ell}$$

$$L_{n+\ell} = e^{\rho}\ \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho}\ \rho^{n+\ell}) \qquad\qquad n=1\ ,\quad \ell=0$$

$$L_1 = e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\ \rho) = e^{\rho}\ \ (e^{-\rho} - \rho\ e^{-\rho})$$

$$= 1-\rho$$

$$L_1^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ L_1$$

$$= \frac{d}{d\rho}(1-\rho) = -1$$

$$R_{10}(\rho) = -2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\ (-1)$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}\ e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}\ P_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

$$p_\ell^m(\cos\theta) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}}\ \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}\ p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell\ \ell!}\ \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$\therefore\quad p_0(\omega) = \frac{1}{2^0 0!}\frac{d^0}{d\omega^0}\left[(\omega^2-1)^0\right]$$

$$=1$$

$$\because\quad p_\ell^0 = p_\ell = 1$$ **لاحظ معادلة رقم 18**

$$\therefore\quad Y_0^0 = (-1)^{\frac{0}{2}}\left[\frac{2\cdot 0+1}{4\pi}\cdot\frac{0!}{0!}\right]^{\frac{1}{2}}\cdot 1\cdot 1$$

$$=\left[\frac{1}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore\quad \psi_{100}=2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

وبما ان $z=1$ لذرة الهيدروجين

$$=\frac{a^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{r}{a_\circ}}$$ وهو المطلوب

Energy eigen value

من المعادلة 23 نجد ان

$$\alpha^2=\frac{-8mE}{\hbar^2} \quad ، \quad n=\frac{-\alpha k}{4E}$$

$$\therefore\quad \alpha=\frac{-4En}{k} \quad\Rightarrow\quad \alpha^2=\frac{16E^2n^2}{k^2}$$

$$\therefore\quad \frac{16E^2n^2}{k^2}=\frac{-8mE}{\hbar^2}$$

$$\therefore\quad E=\frac{-mk^2}{2\cdot\hbar^2 n^2}$$

وبالتعويض عن قيمة $k=\dfrac{ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$ ، $k^2=\dfrac{z^2e^4}{16\cdot\pi^2\varepsilon_\circ^2}$

$$\therefore\quad E_n=-\frac{me^4z^2}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} \tag{34}$$

المعادلة (34) هي نفس المعادلة التي سبق ان حصل عليها بور عندما افترض ان الزخم الزاوي للالكترون في مداره حول النواة هو عبارة عن عدد صحيح مضروب في $\hbar$. والمعادلة (34) تبين ان الطاقة E تعتمد على العدد الكمي الاساسي n ولا تعتمد على العدد الكمي ℓ ، m لذلك تكتب E عادة بالشكل E_n بدلالة n فقط. واوطا طاقة تقابل الحالة $(n=1)$ أي أن

$$E_1=-\frac{me^4z^2}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}$$

وهو طاقة المستوى الارضي.

تعلمنا ان لكل قيمة لـ n هنالك n من القيم الممكنة لـ ℓ فمثلا عندما تكون $n=3$ فان $\ell=0,1,2$ كذلك فان لكل قيمة لـ ℓ هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m فمثلا $m=-1,0,+1$ عندما تكون $\ell=1$ لذا يكون مستوى الطاقة لذرة الهيدروجين منحل بدرجة انحلال تساوي $g(n)=\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1}(2\ell+1)$ والتي تساوي n^2

<u>Prove that</u> $\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1}(2\ell+1)=n^2$ **واجب بيتي**

<u>Angular momentum</u> <u>الزخم الزاوي</u>

وفقا للميكانيك الكلاسيكي فان الزخم الزاوي لجسم حول نقطة الاصل يعطى بالعلاقة التالية

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$$

حيث $\vec{r}$ هو متجه الموضع ، $\vec{p}$ الزخم الخطي للجسيم. واذا كان الجسيم تحت تاثير طاقة كامنة متناظرة كرويا $V(r)$ فان الزخم الزاوي ثابت اي ان $\frac{d\vec{L}}{dt}=0$ والان ماهي صفات الزخم الزاوي لهذا الجسيم في الميكانيك الكمي ؟

الصفة الكمية لمؤثر الزخم الخطي هي

$$p=-i\hbar\nabla$$

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

وعليه فان

$$\hat{L}=-i\hbar\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

وهذا يعني ان مركبات مؤثر الزخم الزاوي تاخذ الصيغ الاتية

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$\hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$

$$\hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

ان انسب نوع من الاحداثيات لدراسة الزخم الزاوي بشكل خاص والحركة تحت تاثير القوة المركزية بشكل عام هي الاحداثيات القطبية الكروية.

باستخدام معادلات التحويل من الاحداثيات الكارتيزية الى الاحداثيات الكروية.

$$\left.\begin{aligned} x &= r\ \sin\theta\cos\phi \\ y &= r\ \sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=\sin\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\ \cos\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+(-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\sin\theta\ \sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\ \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}+(-\frac{1}{r})\ \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$$

ويمكن ايجاد مركبات الزخم الزاوي بالاحداثيات الكروية اذا ناخذ كل مركبة بصيفتها في الاحداثيات الكارتيزية ثم نجري التعويضات الازمة كما يلي

اولا $\hat{L}_x$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$=-i\hbar[\{r\sin\theta\sin\phi(\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\ \frac{\partial}{\partial\theta})\}-$$

$$\{r\cos\theta(\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})\}]$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar[r\sin\theta\sin\phi\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\sin\phi\sin^2\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$-r\cos\theta\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}-\cos^2\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}]$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi})$$

ثانيا L_y

$$\hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$

$$=-i\hbar[\{r\cos\theta(\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta})\}$$

$$-\{r\sin\theta\cos\phi(\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\,\frac{\partial}{\partial\theta})\}$$

$$=-i\hbar[r\cos\theta\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\cos^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$-r\sin\theta\cos\phi\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}+\sin^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}_y=i\hbar(\cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}-\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta})$$

ثالثا L_z

$$\hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

$$=-i\hbar[\{r\sin\theta\cos\phi\,(\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})-\{r\sin\theta\sin\phi\,(\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}$$

$$+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})\}]$$

$$= -i\hbar[\{r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r} + \sin\theta\cos\phi\cos\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos^2\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$- r\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial r} - \cos\theta\cos\phi\sin\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \sin^2\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$\therefore$

$$\hat{L}_x = -i\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}) \qquad (35)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

ننتقل الان الى ايجاد $\hat{L}^2$ مربع الزخم الزاوي الكلي

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \qquad (36)$$

وبالتعويض عن قيم $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ من المعادلة 35 في المعادلة 36 ينتج

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2[(\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi})\ (\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$+ (\cot\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta})\ (\cot\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \qquad (37)$$

لنعود الان الى دالة الموجة $\psi(r,\theta,\phi)$ التي تم ايجادها وهي

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\ Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$= R_{n\ell}\ N_\ell^m\ p_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

ولنؤثر عليها بالمؤثر $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$

$$\hat{L}_z \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} [R_{n\ell} \, N_\ell^m \, p_\ell^m (\cos\theta) \, e^{im\phi}]$$

$$= -i\hbar \, R_{n\ell} \, N_\ell^m \, p_\ell^m (\cos\theta) \frac{d}{d\phi} e^{im\phi}$$

$$(-i\hbar)(im)[R_{n\ell} \, N_\ell^m \, p_\ell^m (\cos\theta) \, e^{im\phi}]$$

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar \psi \tag{38}$$

اي ان الدالة ψ هي قيمة ذاتية للمؤثر $\hat{L}_z$ وبقيمة ذاتية تساوي $m\hbar$. وبعبارة اخرى ان مركبة الزخم الزاوي في اتجاه z لجهد مركزي هي ثابت الحركة بقيمة تساوي $m\hbar$

ولنؤثر الان بـ $\hat{L}^2$ (مربع الزخم الزاوي) على دالة الموجة

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell} \, Y_\ell^m (\theta,\phi)$$

$$\hat{L}^2 \psi_{n\ell m} = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \psi_{n\ell m}$$

$$= -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] R_{n\ell} \, Y_\ell^m$$

$$= -\hbar^2 R_{n\ell} [\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}]$$

وتبعا للمعادلة 8 فان الكمية داخل القوسين الكبيرين في هذه النتيجة تساوي $-\lambda Y$ اذن

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 R_{n\ell} (-\lambda Y)$$

$$= \lambda \hbar^2 R_{n\ell} Y$$

$$= \lambda \hbar^2 \psi$$

وبالتعويض عن λ باكمية $\ell(\ell+1)$ يكون

$$\hat{L}^2\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)=\ell(\ell+1)\hbar^2\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) \qquad (39)$$

من المعادلة 39 ان الدالة $\psi_{n\ell m}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{L}^2$ وبقيمة ذاتية تساوي $\ell(\ell+1)\hbar^2$ لذا فان الزخم الزاوي لجسيم في جهد مركزي هو ثابت قيمة $\ell(\ell+1)\hbar^2$. او ان الزخم الزاوي للجسيم له قيمة مضبوطة تساوي $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ وله مركبة في الاتجاه z بقيمة مضبوطة ايضا تساوي $m\hbar$

مقارنة مع النظرية الكلاسيكية Comparison with classical theory

حركة جسيم مركزي الجهد في النظرية الكلاسيكية تبين ثبوت مربع الزخم الزاوي وكذلك مركباته في الاتجاهات الثلاثة اما في النظرية الكمية وجدنا $\hat{L}^2$، $\hat{L}_z$ ثابتتان بينما لم يكن $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ قيمتين معرفتين او ثابتتن لان الدالة ψ ليس بدالة ذاتية لاي من مؤثريها. اضافة الى ذلك فان اهم اسس النظرية الكمية هو مبدا اللادقة هذا المبدا اذا طبق على مركبات الزخم الزاوي سيكون بالشكل

$$\Delta\hat{L}_x\cdot\Delta\hat{L}_y\approx m\hbar$$

على فرض ان $\hat{L}_z$ثابت اي ان $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ في هذه الحالة لايمكن ان يثبتا انيا لان ذلك سيعني ان $\Delta\hat{L}_x=\Delta\hat{L}_y=0$. اما النظرية الكلاسيكية فانها تتغاضى عن الكمية $m\hbar$ الضئيلة المقدار جدا وعندها يصبح بالفعل $\Delta\hat{L}_x$ ، $\Delta\hat{L}_y$ مساوي الى الصفر وهو مايقابل ثبوت كل منهما.

س 1) اذا علمت ان الدالة الموجية لذرة الهيدروجين هي $\psi = \frac{a^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{r}{a_\circ}}$

أ- اوجد $< \frac{1}{r} >$

ب- $< r >$ ، $< r^2 >$ واجب بيتي

<u>**الجواب**</u>

$$< \frac{1}{r} > = \int \psi^* \frac{1}{r} \psi \, d\tau$$

حيث ان $d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$

وبعد التعويض عن دالة الموجة ψ وترتيب الحدود نحصل

$$< \frac{1}{r} > = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{a_\circ^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-r}{a_\circ}} \frac{1}{r} \frac{a_\circ^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-r}{a_\circ}} r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$= \frac{a_\circ^{-3}}{\pi} \int_0^\infty e^{\frac{-2r}{a_\circ}} r \, dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \frac{a_\circ^{-3}}{\pi} 4\pi \int_0^\infty e^{\frac{-2r}{a_\circ}} r \, dr$$

وباستخدام التكامل $\int_0^\infty x^n \, e^{-ax} \, dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$

$$\frac{a_\circ^{-3}}{\pi} 4\pi \frac{1}{(\frac{2}{a_\circ})^2} = \frac{1}{a_\circ}$$

س 2) اذا كانت دالة الموجة لاحد المستويات لذرة الهيدروجين هي

$$\psi(r,\theta,\phi) = A\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\, r^2 \sin\theta \cos\theta\, e^{i\phi}$$

1. استخدم $\hat{L}^2$ (مربع الزخم الزاوي) ، $\hat{L}_z$ (مركبة الزخم الزاوي في اتجاه z) اوجد قيم ℓ ، m ؟
2. باستخدام معادلة شرودنكر اوجد الطاقة E ؟

__الجواب__

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

وبما ان مربع الزخم الزاوي هو دالة لـ θ ، ϕ لذا فان المتغير r يعتبر ثابت لذا نفرض ان

$$\psi(r,\theta,\phi) = C\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

حيث ان $C = A\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\, r^2$

نؤثر المؤثر $\hat{L}^2$ على دالة الموجة ψ

$$\hat{L}^2\psi = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]\psi$$

$$= -\hbar^2 C\, [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}]$$

$$= -\hbar^2 C\, [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta(\cos^2\theta\, e^{i\phi} - \sin^2\theta\, e^{i\phi}) + \frac{\sin\theta\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}e^{i\phi}]$$

وحيث ان $\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}e^{i\phi} = -e^{i\phi}$

$$= -\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(1-\sin^2\theta)\, e^{i\phi}) - \sin^2\theta\, e^{i\phi} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}e^{i\phi}]$$

حيث عوضنا عن $\cos^2\theta = 1 - \sin^2\theta$

$$=-\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\, e^{i\phi}-2\sin^3\theta)\, e^{i\phi})-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}(\cos\theta\, e^{i\phi}-6\sin^2\theta\cos\theta\; e^{i\phi})-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}-6\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[-6\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}]$$

$$=6\hbar^2 C\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$=6\hbar^2\psi$$

وبما ان

$$\hat{L}^2\psi=\hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$

$$6\hbar^2\psi=\hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$

$$6=\ell(\ell+1)\quad\Rightarrow\quad\ell=2$$

وبتاثير المؤثر $\hat{L}_z$ على دالة الموجة ψ

$$\hat{L}_z\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi}$$

$$=-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\phi}\,A\,r^2\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,e^{i\phi}$$

$$=-i\hbar\,Ar^2\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\,e^{i\phi}$$

$$=-i\hbar\,Ar^2\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,e^{i\phi}(i)$$

$$=\hbar\psi$$

وبما ان

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar\psi$$

$$\therefore \quad \hbar\psi = m\hbar\psi \quad \Rightarrow \quad m=1$$

ب. بما ان الطاقة تظهر فقط بمعادلة شرودنكر القطرية اذن نستخدم

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\{\frac{2m}{\hbar^2}(E+\frac{k}{r})-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\}R=0$$

نفرض ان $\psi = R = \beta' r^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$ حيث ان $\beta' = \sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$

$$\frac{dR}{dr}=2r\,\beta'\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}-\frac{\beta' r^2}{3a_\circ}\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$r^2\frac{dR}{dr}=2r^3\,\beta'\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}-\frac{\beta' r^4}{3a_\circ}\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})=6r^2\,\beta'\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}-\frac{2r^3}{3a_\circ}\,\beta'\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}-\frac{4}{3}\frac{\beta' r^3}{a_\circ}\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}+\frac{\beta' r^4}{3a_\circ}\,e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$=6R-\frac{2}{3}\frac{r}{a_\circ}R-\frac{4r}{3a_\circ}R+\frac{r^2}{9a_\circ^2}R$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})=\frac{6R}{r^2}-\frac{2}{r\,a_\circ}R+\frac{1}{9a_\circ^2}R$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2mER}{\hbar^2}+\frac{2mk}{\hbar^2 r}-\frac{6}{r^2}R=0$$

$$\frac{6R}{r^2}-\frac{2R}{a_\circ r}+\frac{R}{9a_\circ^2}+\frac{2mER}{\hbar^2}+\frac{2mk}{\hbar^2 r}-\frac{6R}{r^2}=0$$

$$\frac{-2}{a_\circ}+\frac{2mk}{\hbar^2}=0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{a_\circ}=\frac{mk}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad a_\circ=\frac{\hbar^2}{mk}$$

$$\frac{1}{9a_\circ^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}=0 \qquad E=\frac{-\hbar^2}{18a_\circ^2 m}=\frac{-\hbar^2}{18\cdot\frac{\hbar^4}{m^2k^2}\cdot m}$$

$$=-\frac{m\,e^4}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}\,\frac{1}{9}$$

حيث $k=\dfrac{e^2}{4\pi\,\varepsilon_\circ}$

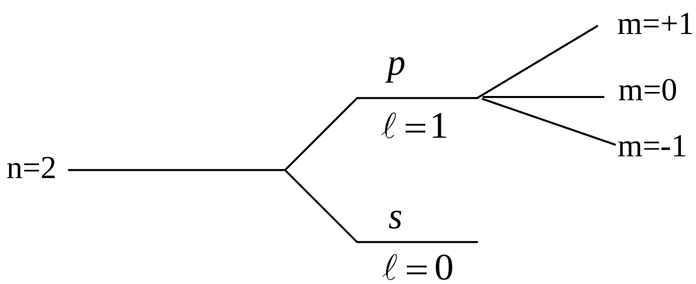
سبق ان بينا ان دالة الموجة ψ هي دالة ذاتية لمربع الزخم الزاوي وبقيمة ذاتية $\ell(\ell+1)\hbar^2$ لذلك فان الزخم الزاوي لجسيم يتحرك في جهد مركزي هو ثابت حركة قيمة هذا الزخم يمكن ان يحدد بدقة وهي تتخذ القيم $\ell = n-1 \;\Rightarrow\; \ell = 0$ ولذلك (في مجال كولوم لاي قيمة n تحدد مستوى الطاقة هنالك n من القيم المميزة للزخم الزاوي المداري. وكذلك بينا ان دالة الموجة ψ هي دالة ذاتية للمركبة z للزخم الزاوي وبقيمة ذاتية $m\hbar$ وهذا يعني ان اي جسيم يتحرك في نظام جهده مركزي فان المركبة z هي ثابت حركة وقيمتها $m\hbar$. ان قيم m تحدد

$$m = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \cdots\cdots\cdots 0, \cdots\cdots\cdots \ell$$

ان الحالات التي تتميز بعدد كمي مداري $\ell = 0$ وعدد كمي مغناطيسي $m = 0$ تسمى بحالات s اما الحالة p فهي تتميز بالعدد الكمي المداري $\ell = 1$ وبذلك ياخذ العدد الكمي المغناطيسي (هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m) القيم $m = -1, 0, 1$ ولهذا توجد ثلاث دوال منحلة وعموما يرمز للحالات ℓ بالرموز الطيفية الاتية

i	.	2	3	4
s	p	d	f	g

لناخذ مثال عندما $n = 2$



نلاحظ ان دوال الموجة هي ψ_{200} ، ψ_{21+1} ، ψ_{210} ، ψ_{21-1} اذن عدد الانحلال هو 4

ان قيمة m لايمكن ان تتعدى قيمة ℓ وهذا مطابق لواقع الحال اذ ان مركبة الزخم الزاوي $\hat{L}_z$ لايمكن ان تساوي تماما قيمة الزخم الزاوي الكلي لان:

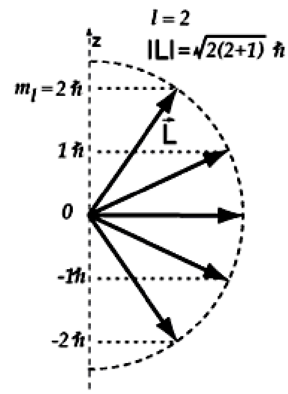
$$\hat{L} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$$

$$(\hat{L}_z)_{\max} = \ell\hbar$$

ان المعادلتين الاخيرتين هما صيغة اخرى لمبدا الدقة فيما ان $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ لاتحقق خاصية التبادل فيما بينهما فمعنى ذلك اننا لانستطيع قياس هذه الكميات بدقة تامة في ان واحد

H.w **Show that** 1) $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z$ 2) $[\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hbar\hat{L}_x$

3) $[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y$



الشكل يبين تكميم الزخم الزاوي (الزخم الزاوي الكلي) ياخذ اتجاهات معينة فقط التي تلك التي تكون فيها مساقط على محور z اي المركبة $\hat{L}_z$ عبارة عن مضاعفات صحيحة للمقدار $\hbar$

H.w **Show that** 1) $[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$ 2) $[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=0$ 3) $[\hat{L}^2,\hat{L}_y]=0$

التفسير الفيزياوي للمعادلات اعلاه ان المؤثر $\hat{L}^2$ يتبادل مع جميع مركبات الزخم الزاوي اي يمكن ايجاد قيم مضبوطة وبنفس الوقت لـ $\hat{L}^2$

Prove that $\left[L_x\,,\,L_y\right]=i\hbar L_z$

$$\left[L_x\,,\,L_y\right]\psi=(L_xL_y-L_yL_x)\,\psi$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\quad,\quad \hat{L}_y=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\quad,\quad \hat{L}_z=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\left[L_x\,,\,L_y\right]\psi$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[\left((y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\cdot(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})\right)-\left((z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})\cdot(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\right)\right]\psi$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\,\frac{\partial}{\partial z}(z\frac{\partial\psi}{\partial x})-y\frac{\partial}{\partial z}(x\frac{\partial\psi}{\partial z})-z\frac{\partial}{\partial y}(z\frac{\partial\psi}{\partial x})+z\frac{\partial}{\partial y}(x\frac{\partial\psi}{\partial z})\right.$$

$$\left.-z\frac{\partial}{\partial x}(y\frac{\partial\psi}{\partial z})+z\frac{\partial}{\partial x}(z\frac{\partial\psi}{\partial y})+x\frac{\partial}{\partial z}(y\frac{\partial\psi}{\partial z})-x\frac{\partial}{\partial z}(z\frac{\partial\psi}{\partial y})\right]$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\frac{\partial\psi}{\partial x}+yz\frac{\partial^2\psi}{\partial z x}-yx\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-z^2\,\frac{\partial^2\psi}{\partial y x}+zx\frac{\partial^2\psi}{\partial y z}-zy\frac{\partial^2\psi}{\partial x z}+z^2\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x y}\right.$$

$$\left.+xy\,\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-x\frac{\partial\psi}{\partial y}-xz\frac{\partial^2\psi}{\partial z y}\right]$$

$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\,\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right]$$

$$=-\left(\frac{\hbar}{i}\right)\left\{\left(\frac{\hbar}{i}\right)\left[x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]\right\}$$

$$=i\hbar\,L_z\,\psi$$

$$=i\hbar\,L_z$$

برم الإلكترون **Electron Spin**

كان نقاشنا للحالات الكمية للذرة الوحيدة الإلكترون محددا بأبسط نموذج ممكن مما جعل الحصول على حل للمسالة بدلالة دوال معروفة امرا سهلا نسبيا. غير أن الأمور تتعقد شيا فشيا عندما نحاول استخدام الميكانيك الكمي لتفسير ظواهر شائعة في التجارب المعروفة عن الأطياف ونخص بالذكر ظاهرة زيمان الشاذة التي قادت الى افتراض البرم الإلكتروني.

يتاثر الإلكترون كأي جسم مشحون اذا ادخل ضمن مجال مغناطيسي. فمثلا لمجال مغناطيسي متجانس شدته H_z وفي الاتجاه z فان طاقة التفاعل التي تدخل في معادلة شرودنكر كحد اضافي هي $\frac{e}{2m}L_z H_z$ حيث L_z هي مركبة الزخم الزاوي المداري للالكترون و $(-e)$ هي شحنة الالكترون و m هي كتلة الالكترون. ولتفسير هذه الطاقة نعطي للالكترون عزما مغناطيسيا من خلال العلاقة

$$\mu = -\frac{e}{2m}L \qquad (1)$$

ان تاثير حد طاقة التفاعل هو تزحزح في مستويات الطاقة الذري يؤدي الى تغير في الطيف الخطي عندما يتسلط مجال مغناطيسي خارجي على الذرة. لقد استطاعت النظرية الكلاسيكية في تفسير ما يسمى ظاهرة زيمان الاعتيادية والتي فيها يتفرق الطيف الى ثلاث ترددات في حين تصبح المسالة معقدة عندما يحصل ما يسمى بظاهرة زيمان الشاذة والتي لايمكن تفسيرها بالطريقة ذاتها لان خطوط الطيف تتفرق بشكل متعدد فجاء افتراض البرم الإلكتروني.

لقد افترض ان للالكترون برم σ وعزم مغناطيسي داخلي μ_s اما مقدار البرم فقد افترض انه يقابل اعدادا كمية بنصف وحدة لمربع البرم ولمركبتة في الاتجاه z. أي القيمة الذاتية الوحيدة الممكنة لمربع σ هي:

$$\sigma \cdot \sigma = \delta(\delta+1)\hbar^2 \qquad (2)$$

حيث $\delta = \frac{1}{2}$ أي ان

$$\sigma^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \qquad (3)$$

ولمركبة σ باي اتجاه مثل الاتجاه z هنالك قيمتين ذاتيتين ممكنتين :

$$\sigma_z = m_s \hbar \qquad (4)$$

حيث $m_s = \frac{1}{2}$ او $-\frac{1}{2}$ اما العزم المغناطيسي فيفترض انه يتناسب مع σ بثابت تناسب يساوي $-e/m$ أي ان

$$\mu_s = -\frac{e}{m}\sigma \qquad (5)$$

وعليه يكون

$$\mu_{s_z} = -\frac{e}{m}\sigma_z$$

واذا عوضنا عن σ_z بـــ $\pm\frac{1}{2}\hbar$ نحصل على

$$\mu_{s_z} = \pm\frac{e\hbar}{2m} \qquad (6)$$

حيث μ_{s_z} يسمى بمغنيطون بور Bohr magneton ويرمز له μ_B

ان برم الاكترون هي صفة كمية ليس لها نضير في الفيزياء الكلاسيكية لان البرم استنادا الى مبدا التقابل يصبح مهملا اذا اهمل ثابت بلانك. ان فكرة البرم تقترن ادخال متغيرات ثلاثة جديدة هي σ_x , σ_y , σ_z لتعريف مسقط البرم على المحاور الثلاثة , وكذلك مؤثرات ثلاثة مقابله هي $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ وطبيعي فان المتغيرات البرمية تتخذ لنفسها القيمتين المتميزتين $\pm\frac{1}{2}\hbar$ فقط. اضافة الى ذلك يجب ان يتصف كل مؤثر بالصفة التالية:

$$\hat{\sigma}_z S = \sigma_\circ S \qquad (7)$$

حيث المعادلة اعلاه هي معادلة قيمة ذاتية فيها $\sigma_\circ = \pm\frac{1}{2}\hbar$ عبارة عن القيمتين الذاتيتين. ودالتا الموجة المقابلتان للمتغير σ_z يرمز لهما $S_{\frac{1}{2}}$ و $S_{-\frac{1}{2}}$ هاتان الدالتان يجب ان تكونا مجموعة عيارية متعامدة كاملة للدوال الموجية البرمية بحيث ان اعتماد البرم على اية دالة يمكن التعبير عنه بالمزج الخطي.

$$S(\sigma_z) = aS_{\frac{1}{2}}(\sigma_z) + bS_{-\frac{1}{2}}(\sigma_z) \qquad (8)$$

وصفة العيارية والتعامد تاخذ هنا صيغة الجمع على القيمتين الممكنتين لـ σ_z

$$\sum_{\sigma_z=-\frac{1}{2}\hbar}^{+\frac{1}{2}\hbar} S^*{}_{m_s}(\sigma_z)\, S_{m_s'}(\sigma_z) = \sigma_{m_s\, m_s'} \qquad (9)$$

في نظرية باولي تمثل المعاملات a و b في المعادلة 8 بمصفوفة عمودية ثنائية هكذا:

$$S = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

ومؤثرات البرم $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ تمثل بالمصفوفات التالية

$$\hat{\sigma}_x = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\sigma}_y = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\sigma}_z = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \qquad (10)$$

هذه المصفوفات اذا اثرت على دالة الموجة فان

$$\hat{\sigma}_z S = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

$$= \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}a\\ -b\end{pmatrix}$$

ودوال الموجة هنا تساوي الى

$$S_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \qquad , \qquad S_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

وفي نظرية باولي فان المصفوفة الاجونية الهرميتية Hermitian Adjoint Matrix تلعب دور الدالة ψ^* في نظرية شرودنكر ونحصل على هذه المصفوفة باستبدال الصفوف بالاعمدة ثم استبدال كل عنصر في المصفوفة الناتجة بمرافقه المعقد فمثلا اذا كان $S = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$ فان $S^+ = \begin{pmatrix}a^* & b^*\end{pmatrix}$ هي المصفوفة الاجونية الهرميتية لـ S. مما تقدم يظهر حاصل ضرب مصفوفة عمودية في مصفوفتها الاجونية هي مصفوفة حقيقية لصف واحد وعمود واحد. يقابل التكامل $\int \psi^* \psi \, d\tau$ أي

$$S^+ S = \begin{pmatrix}a^* & b^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = a^* a + b^* b = 1$$

والقيمة المتوقعه لمتغيرات البرم تكتب على النحو التالي :

$$<\sigma_i> = S^+ \hat{\sigma}_i S \qquad (11)$$

<u>اسئله</u>

س1) جد القيمة المتوقعه لــ σ_z؟

س2) افرض ان $S(\sigma_z)$ معلوم جد a و b

س3) جد مؤثر باولي لمربع البرم ومن ثم اثبت ان أي دالة برمية عيارية هي دالة ذاتية لـ $\hat{\sigma}\cdot\hat{\sigma}$ بقيمة ذاتية تساوي $\tfrac{3}{4}\hbar^2$

-References

- المصادر

- الميكانيك الكمي - د. جاسم الحسيني ، د. عبدالسلام عبد الامير
- اساسسيات ميكانيك الكم – د. سالم حسن الشماع ، د. أمجد عبدالرازق كريجه
- مقدمة فى ميكانيك الكم - د. جاسم عبود ، د. ضياء احمد

- Fundamental University Physics, Alonson and Fin, Part 3.
- Introduction to Quantum Mechanics, Matthews.
- Quantum Mechanics, Powell and Grasmanu.