قائمة الثوابت الفيزيائية

Quantity	Symbol,equation	Value
speed of light	c	$2.9979 \times 10^{8}\ \mathrm{m\,s^{-1}}$
electron charge	e	$1.602 \times 10^{-19}\ \mathrm{C}$
Planck constant	h	$6.626 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$
Planck constant, reduced	$\hbar = h/2\pi$	$1.055 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$
conversion constant	$\hbar c$	$197.327\ \mathrm{MeV\,fm} = 197.327\ \mathrm{eV\,nm}$
electron mass	m_e	$9.109 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg} = 0.511\ \mathrm{MeV}/c^2$
proton mass	m_p	$1.673 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg} = 938.272\ \mathrm{MeV}/c^2$
neutron mass	m_n	$1.675 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg} = 939.566\ \mathrm{MeV}/c^2$
fine structure constant	$\alpha = e^2/\hbar c$	$1/137.036$
classical electron radius	$r_e = e^2/m_e c^2$	$2.818 \times 10^{-15}\ \mathrm{m}$
electron Compton wavelength	$\lambda = h/m_e c = r_e/\alpha$	$2.426 \times 10^{-12}\ \mathrm{m}$
proton Compton wavelength	$\lambda = h/m_p c$	$1.321 \times 10^{-17}\ \mathrm{m}$
Bohr radius	$a_0 = r_e/\alpha^2$	$0.529 \times 10^{-10}\ \mathrm{m}$
Rydberg energy	$\mathcal{R} = m_e c^2 \alpha^2/2$	$13.606\ \mathrm{eV}$
Bohr magneton	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	$5.788 \times 10^{-11}\ \mathrm{MeV\,T^{-1}}$
nuclear magneton	$\mu_N = e\hbar/2m_p$	$3.152 \times 10^{-14}\ \mathrm{MeV\,T^{-1}}$
Avogadro number	N_A	$6.022 \times 10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$
Boltzmann constant	k	$1.381 \times 10^{-23}\ \mathrm{J\,K^{-1}}$
		$= 8.617 \times 10^{-5}\ \mathrm{eV\,K^{-1}}$
Gas constant	$R = N_A k$	$8.31\ \mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$
Gravitational constant	G	$6.673 \times 10^{-11}\ \mathrm{m^3\,kg^{-1}\,s^{-2}}$
permittivity of free space	$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	$8.854 \times 10^{-12}\ \mathrm{F\,m^{-1}}$
permeability of free space	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}\ \mathrm{N\,A^{-2}}$

Conversion of units

$1\ \mathrm{fm} = 10^{-15}\ \mathrm{m}$ $\quad$ $1\ \mathrm{barn} = 10^{-28}\ \mathrm{m^2} = 100\ \mathrm{fm^2}$ $\quad$ $1\ \mathrm{G} = 10^{-4}\ \mathrm{T}$

$1\ \mathrm{atmosphere} = 101\,325\ \mathrm{Pa}$ $\quad$ thermal energy at $T = 300\ \mathrm{K}$: $kT = [38.682]^{-1}\ \mathrm{eV}$

$0\ ^\circ\mathrm{C} = 273.15\ \mathrm{K}$ $\quad$ $1\ \mathrm{eV} = 1.602 \times 10^{-19}\ \mathrm{J}$ $\quad$ $1\ \mathrm{eV}/c^2 = 1.783 \times 10^{-36}\ \mathrm{kg}$

الباب الأول

تطور الميكانيكا الكلاسيكية إلى الموجية

(١) **معادلة هاملتون جاكوب للجسيم الواحد :** حركة جسيم كتلته m في الفراغ تتحدد تماما بإحداثيلته المعممة (x, y, z) وكميات حركته (p_x, p_y, p_z) حيث أن له ثلاث درجات حرية وعندئذ تأخذ دالة هاملتون لهذ الجسيم الصورة

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V \qquad (١-١)$$

حيث $V(x, y, z)$ تمثب دالة الجهد وكما نعلم $p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k} = \frac{\partial S^0}{\partial q_k}$ فإن

$$p_x = \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\partial S^0}{\partial x}, p_y = \frac{\partial S}{\partial y} = \frac{\partial S^0}{\partial y}, p_x = \frac{\partial S}{\partial z} = \frac{\partial S^0}{\partial z} \qquad (٢-١)$$

أى أن

$$\vec{p} = \vec{\nabla} S = \vec{\nabla} S^0 \qquad (٣-١)$$

حيث $S(x, y, z, t)$ تحقق معادلة هاملتون جاكوب غير المستقرة

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V = 0 \qquad (٤-١)$$

بينما $S^0(x, y, z)$ تحقق معادلة هاملتون جاكوب المستقرة

$$-E + \frac{(\vec{\nabla} S^0)^2}{2m} + V = 0 \qquad (٥-١)$$

حيث S, S^0 ترتبطان بالعلاقة $S = S^0 - Et$ وبذلك يمكن تخيل مجموعة من السطوح الثابتة فى الفراغ $S^0 = a, S^0 = a + Et_1, S^0 = a + Et_2, ...$ وأن

هناك سطح $S = a$ ينطبق على السطح الأول $S^0 = a$ عند اللحظة الزمنية $t = 0$ وعلى السطح الثانى $S^0 = a + Et_1$ عندما $t = t_1$ وهكذا، أى أن $S = const.$ يترك فى الفراغ مع الزمن حيث S هى نفس الدالة التى تحدد حركة الجسيمفى الفراغ. بالتالى فإن سرعة هذا السطح تكون عمودية عليه ويمكن تحديدها كالآتى:

عند الزمن dt ينطبق السطح $S = a$ على السطح $S^0 = a + Edt$ حيث $dS^0 = Edt$. بفرض أن إحدى نقط هذا السطح قطعت فى الاتجاه العمودى عليه مسافة dx فى فترة زمنية dt فإن سرعة هذه النقطة (سرعة السطح) u تساوى $u = \frac{dx}{dt}$ وكما نعلم أن $\vec{\nabla} S = \vec{\nabla} S^0$ عمودى أيضا على السط $S = const.$ أى فى نفس اتجاه السرعة u كما أن $\frac{dS^0}{dx} = \left|\vec{\nabla} S_0\right|$ وبذلك نحصل على

$$\frac{dS^0}{dx} = \frac{dS^0}{dt} \square \frac{dt}{dx} = \left|\vec{\nabla} S_0\right| = p \qquad (١-٦)$$

ومنها نجد أن

$$E \square \frac{1}{u} = p \Rightarrow u = \frac{E}{p} = \frac{E}{mv} \qquad (١-٧)$$

حيث v سرعة الجسيم.

يمكن النظر إلى ذلك باعتبار أن حركة الجسيم على مساره بالسرعة v تكافئ تماما ركة سطح عمودى على هذا المسار بسرعة u فى نفس اتجاه سرعة

الجسيم v وبذاك تظهر فكرة أن الجسيم يمكن أن تكون له الخاصية الموجية باعتبار أن هذا السطح المتحرك يمثل صدر الموجة. يلاحظ أن

$$u = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} = \frac{T + V}{\sqrt{2mT}} \qquad (١-٨)$$

وإذا كانت $V = 0$ فإن $u = \frac{1}{2}v$ وبازدياد طاقة الجهد V تزداد السرعة u بدون حد. أما معادلة هاملتون جاكوب بدلالة السرعة u (الصورة الموجية) تكون

$$(\vec{\nabla} S)^2 = p^2 = \frac{E^2}{u^2} = \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 \qquad (١-٩)$$

(٢) النظرية الكلاسيكية

أولا الميكانيكا الكلاسيكية

النموذج الأساسى لدراسة الحركة ى الميكانيكا الكلاسيكية هو الجسيم الممثل بمقدار من من المادة مركزة فى نقطة ويميز بكتلته m ومتجه موضعه $\vec{r}$ وكمية حركته $\vec{p}$ وطاقته الكلية E . أى أن حالته الميكانيكية تتحدد بتحديد هذه الكميات فى الأزمنة المختلفة. ومن المعروف أن الموضع وكمية الحركة مترافقان وكذلك الطاقة والزمن. وبالنسبة لأى مجموعة ميكانيكية فتعتبر مكونة من عدد من الجسيمات. ولقد تمت دراسة الحركة فى الميكانيكا الكلاسيكية طبقا للتسلسل الآتى:

- نظام نيوتن: فى هذا النظام نجد أن الجسيم يسم مسارا فى الفراغ الثلاثى وتتعين الحركة بواسطة دالة العجلة $\vec{a}$ التى تحقق قانون نيوتن $\vec{F} = m\vec{a}$ لكل جسيم على حده.

- نظام لاجانج: وفيه توجد نقطة ممثلة للمجموعة الميكانيكية التى تتحرك فى فراغ أبعاده n تساوى عدد درجات حرية المجموعة ويتحدد موضعها بواسطة دالة لاجرانج L التى تحقق معادلاته

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}, \quad \dot{p}_k = \frac{\partial L}{\partial q_k} \qquad (١٠-١)$$

- نظام هاملتون: وأساسه نقطة نقطة ممثلة للمجموعة الميكانيكية تتحرك فى فراغ أبعده $2n$ يسمى فراغ الطور حيث n عدد درجات الحرية أيضا. وموضع هذه النقطة يتحدد فى هذا الفراغ بمجموعة الإحداثيات q_k , p_k لسم المسار فى هذا الفراغ وتتغير الحركة بواسطة دالة هاملتون H التى تحقق معادلاته

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \qquad (١١-١)$$

- نظام هاملتون جاكوب: وفيه تتعين الحركة بواسطة دالة الفعل التى تحقق معادلة هاملتون جاكوب $\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0$ وفى حالة الجسيم الواحد نجد أن حكته تتحدد تماما بحركة السطح $S = const$. فى الفراغ بسرعة $u = \frac{E}{p}$ والتى تحقق المعادلة

$$(\vec{\nabla} S)^2 = \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 \qquad (١٢-١)$$

ثانيا النظرية الضوئية:

تفسر الظواهر الضوئية بإحدى طيقتين:

١. **الطريقة الهندسية:** وفيها يعتبر الضوء جسيم مادى (فوتون) مساه هو الشعاع الضوئي الذى يميز بالدالة ϕ التى تحقق المعادلة:

$$(\nabla\phi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 \qquad (١-١٣)$$

حيث n معامل الانكسار، c سرعة الضوء فى الفراغ، $u = \frac{c}{n}$ سرعته فى الوسط. ومن الواضح أن سعته (إتجاه الشعاع الضوئى) تكون عمودية على السطح المتحرك $\phi = const.$. الدالة ϕ عديمة الأبعاد وتسمى الطور وتتحدد كالآتى:

$$\phi = 2\pi\left(\frac{S}{\lambda} - \nu t\right) = 2\pi\nu\left(\frac{S}{u} - t\right) = \omega\left(\frac{n}{c}S - t\right)$$

حيث S المسافة التى يقطعها شعاع الضوء فى الزمن t

٢. **الطريقة الموجية (النظرية الكمية للضوء)**

كان التفسير المعمول به أن العالم من حولنا مكون من جسيمات مادية (الكترونات وأيونات و .....) ومجالات الضوء وهو ما يسمى التفسي الكلاسيكى ثم ظهرت حقائق تجريبية لا يمكن تفسيرها فى حدود هذا التفسير الكلاسيكى فتم تفسيرها بناءا على الخواص الموجية للضوء (التداخل والحيود) وظلت حقائق تجريبية أخرى تفسر فقط على أساس الخواص المادية للضوء (توزيع الطاقة وطيف الأجساد السوداء- التأثير الكهروضوئى- تأثير كمبتون)

أساس النظرية الإلكترونية:

ينشأ المجال الإلكترومغناطيسى الذى يحكمه قانون كولوم $V = \frac{e_1 e_2}{r^2}$ من التأثير المتبادل بين الشحنات المتحركة بينما الإلكتروستاتيكى ينشأ من التأثير المتبادل بين الشحنات الساكنة وفى العموم فإن سلوك المجالات الإلكتروستاتيكية يحكمها معادلات ماكسويل-لورانتس:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\varepsilon}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 4\pi\rho\frac{\vec{v}}{c} \qquad \vec{\nabla}\cdot\vec{H} = 0 \qquad (١-١٤)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} - \frac{\mu}{c}\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = 0 \qquad \vec{\nabla}\cdot\vec{E} = 4\pi\rho \qquad (١-١٥)$$

حيث $\vec{H}, \vec{E}$: تمثلان شدتى المجالين الكهربى والمغناطيسى على الترتيب تمثل ρ كثافة الشحنة (الإلكترونات مثلا)، $\vec{v}$ سرعتها، أما ε, μ تمثلان سماحية المجالين الكهربى والمغناطيسى على الترتيب حيث $n = \sqrt{2\mu}\, c$ معامل الإنكسار حيث أن الشحنات المتحركة يمكن اعتبارها تيارا كهربائيا يتبادل التأثير مع المجال المغناطيسى فإنه يوجد بين المجالات الكهربائية والمغناطيسية تأثير متبادل مرتبط بوجود المصدر (الشحنات مثلا).

المجال الكهرومغناطيسى يمبز عادة بالموجات الكهرومغنطيسية التى تتحرك بسرعة الضوء c (الموجات الضوئية-موجات الراديو). مصدر إشعاع الموجات الضوئية يتركز فى عجلة الشحنات المتحركة لذلك فإن كمية الطاقة المشعة فى الثانية تتحدد بالعلاقة

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\Omega^2$$

حيث e الشحنة، Ω عجلتها

اتضح بعد ذلك أن وجود الموجات الكهرومغناطيسية لا يعتمد على وجود المصدر لذلك فإن المعادلة التى تصف انتشار الموجات الضوئية يمكن الحصول عليها من المعادلتين (١-١٤،١٥) عندما نضع $\rho = 0$ وذلك بحذف المجالين الكهربى والمغنطيسى $\vec{H},\vec{E}$ على الترتيب فى الصورة

$$\nabla^2\vec{f} - \frac{n^2}{c^2}\frac{\partial^2\vec{f}}{\partial t^2} = 0 \qquad (١-١٦)$$

حيث تمثل $\vec{f}$ أيا من المتجهين $\vec{H},\vec{E}$.

كما يتضح من تحليل معادلات ماكسويل-لورانتس أن الموجات الكهرومغناطيسية موجات عرضية أى أن متجهى شدة المجال الكهربى $\vec{E}$ والمغناطيسى $\vec{H}$ متعامدين وعموديان على اتجاه انتشار الموجة الكهرومغناطيسية $\vec{k}$ أى أن المتجهات الثلاثة $\vec{E},\vec{H},\vec{k}$ تكون مجموعة يمينية $\vec{H} = \overrightarrow{k^0} \times \vec{E}$ حيث $\overrightarrow{k^0} = \vec{k}/k$ وبذلك يضح أن الضوء مزدوج الخاصية، مادية طبقا للطريقة الهندسية وموجية طبقا للطريقة الموجية. وعند دراسة ظاهرة الإشعاع الضوئى فرض ماكس بلانك أن الجسيمات المتذبذبة تشع او تمتص الضوء بطريقة متقطعة طاقة كل دفعة أو ومضة منها $E = h\nu = \hbar\omega$ حيث $h = 2\pi\hbar$ ثابت بلانك، $\hbar = 1.05 \times 10^{-27} erg.sec$ وحدة كمية حركة زاوية. ثم بين اينشتين ان مقدار الطاقة $h\nu$ المشعة كضوء انما تشع فى

اتجاه معين مثل حركة الجسيم الذى يتحرك فى مسار معين، لذا سمى المقدار $\hbar\omega$ بالكم الضوئى أو الفوتون. يتحرك الفوتون فى الفراغ بسرعة تساوى سرعة الضوء c وكمية حركته $\vec{\Pi} = \hbar\vec{k}$ حيث $\vec{k}$ تسمى المتجه الموجى أما مقدار كمية الحركة $\left|\vec{\Pi}\right| = \frac{\varepsilon}{c} = \frac{h}{\lambda}$ وعندئذ فإن $\left|\vec{k}\right| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ يسمى العدد الموجى.

٣. معادلة الضوء الهندسى تقريب لمعادلة الضوء الموجى:

للموجات القصيرة تظل شدة المجال $\vec{E}$ ثابتة خلال المسافة المساوية لطول الموجة، ومعامل الانكسار لا يكاد يتغير $(\nabla n \approx 0)$ كما أن الشعاع الضوئى لا يتباعد $(\vec{\nabla} \cdot \vec{e_s} = 0)$ حيث $\vec{e_s}$ متجه وحدة فى اتجاه الشعاع. فى وجود هذه الشروط نحصل من معادلة الضوء الموجى (١-١٦) على معادلة الضوء الهندسى (١-١٣) على الصورة

$$\vec{\nabla} \cdot \left(ie^{i\emptyset}\vec{\nabla}\emptyset\right) = \frac{n^2}{c^2}\left(i\frac{\partial^2\emptyset}{\partial t^2} - \left[\frac{\partial\emptyset}{\partial t}\right]^2\right)e^{i\emptyset} \quad (١-١٧)$$

$$i\vec{\nabla}^2\emptyset - \nabla\emptyset^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(i\frac{\partial^2\emptyset}{\partial t^2} - \left[\frac{\partial\emptyset}{\partial t}\right]^2\right)e^{i\emptyset} \quad (١-١٨)$$

ولكن $\emptyset = \omega\left(\frac{n}{c}S - t\right), \ \vec{\nabla}S = \vec{e_s}$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\omega, \quad \frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = 0, \quad \vec{\nabla}\phi = \frac{\omega}{c}\left(n\vec{\nabla}S + S\vec{\nabla}n\right)$$

$$\simeq \frac{n\omega}{c}\vec{e_s}$$

$$\vec{\nabla}^2\phi = \frac{\omega}{c}\left(n\vec{\nabla}\cdot\vec{e}_s + (\vec{\nabla} n)\vec{e}_s\right)$$

وبذلك فإن (١-١٦) تصبح

$$(\vec{\nabla}\phi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2$$

وهى معادلة الضوء الهندسى (١-١٣).

٤. مقارنة بين الميكانيكا الكلاسيكية والنظرية الضوئية

- فى الميكانيكا الكلاسيكية يتحرك الجسيم بسرعة v فى مسار عمودى على السطح $S = const.$ الذى يتحرك بسرعة $u = E/p$ حيث $p = mv$ بينما الفوتون فى الضوء الهندسى يتحرك بسرعة $u = c/n$ فى مسار عمودى على السطح $\emptyset = const.$ الذى يتحرك بنفس السرعة
- فى الميكانيكا الكلاسيكية تخضع حركة الجسيم للمعادلة

$$(\vec{\nabla}S)^2 = \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2$$

بينما فى الضوء الهندسى تخضع حركة الفوتون للمعادلة

- في الضوء الموجي ينتشر الضوء في موجة كهرومغنطيسية بسرعة $u = \lambda\nu$ ومعادلة الضوء الهندسي تقريب لمعادلة الضوء الموجي
- يمكن اعتبار أن الجسيم المادي له طبيعة موجية أي يمكن تمثيل حركته بواسطة موجة تحقق معادلة موجية جديدة بحيث تكون معادلة في الميكانيكا الكلاسيكية تقريبا لها

٥. النظرية الكلاسيكية للإشعاع المستقر

الإشعاعات المستقرة هي إشعاعات الأجسام السوداء وتحليلها يلعب دورا هاما في تكوين النظرية الكمية كما أنه في نفس الوقت يفسر الكثير من الظواهر في النظرية الكلاسيكية. وظل ذلك حتى أدخل بلانك مفهوما جديدا للإشعاعات. ومن خلال النظرية الكلاسيكية تتميز الإشعاعات بكثافة الطيف ρ_ω التي ترتبط بكثافة الطاقة الكهرومغناطيسية .

$$u = \frac{1}{8\pi}(E^2 + H^2) \qquad (١-١٩)$$

بالعلاقة

$$\rho_\omega = \frac{du}{d\omega} \qquad (١-٢٠)$$

حيث du تمثل كثافة طاقة الإشعاع في فترة التردد من ω إلى $\omega + d\omega$ وعندئذ فإن

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega \qquad (١-٢١)$$

ولقد تبين من القانون الثاني للديناميكا الحرارية أن الكثافة ρ_ω تعتمد أيضا على درجة حرارة الوسط أي أن $\rho_\omega = f(\omega, T)$ وبالأخذ في الاعتبار

أن أى شريحة من المادة يمكن تمثيلها بمجموعة من المتذبذبات فإن متوسط الطاقة يتحدد تماما بكثافة طيف الإشعاعات المستقرة ويمكن الوصول إلى العلاقة بينهما فى الصورة

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\bar{E} \qquad (١-٢٢)$$

والتى تعتبر أساس نظرية الإشعاعات المستقرة فى النظرية الكلاسيكية.

فى الفيزياء الإحصائية الكلاسيكية فإن توزيع الجسيمات بالنسبة للطاقة يتحدد بالعلاقة

$$N(E) = A\, e^{-\beta E} \qquad (١-٢٣)$$

حيث $\beta = (kT)^{-1}, \quad \mathrm{k} = 1.38 \times 10^{-16} erg.deg^{-1}$

ثابت بولتزمان، T درجة حرارة الوسط، وعندئذ فإن متوسط الطاقة يساوى

$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E\, e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^\infty e^{-\beta E} dE$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta} ln\beta = \beta^{-1} = kT \qquad (١-٢٤)$$

بالتعويض فى (١-٢٢) نحصل على علاقة تدعى علاقة رالى-جينز

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \qquad (١-٢٥)$$

هذه النتيجة تتفق مع النتائج المعملية للترددات العالية فقط كما أن استخدامها فى تحديد كثافة طاقة الإشعاع (١-٢١) يؤدى إلى تكامل متباعد

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 \, d\omega \Rightarrow \infty \qquad (١-٢٦)$$

وقد سماه العالم إيرنست كارثة او نكبة فوق بنفسجية وبذلك يتضح أن النظرية الكلاسيكية ليست فى الوضع الذى يمكنها من من الوصف الدقيق للإشعاعات المستقرة

٦. صيغة بلانك

لإزالة هذا القصور وضع بلانك فرضا مهما غير كثيرا من الأوضاع الأساسية فى الفيزياء الكلاسيكية. فقد افترض بلانك أن طاقة الجسيمات الميكروسكوبية (الذرات والجزيئات،...) لا تأخذ إلا قيما محددة متفرقة وبالتحديد فإن طاقة المتذبذب طبقا لهذا الفرض يجب أن تكون مكررات قيمة صغيرة ε أى أن

$$E = n\varepsilon, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (١-٢٧)$$

تطبيقا لذلك فإنه عند تحديد القيمة المتوسطة للطاقة يجب استبدال التكامل فى (١-٢٤) إلى مجموع لنحصل على

$$\bar{E} = \frac{n \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon e^{-n\beta\epsilon}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\epsilon}} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon e^{-n\beta\epsilon}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \frac{\varepsilon}{1 - e^{-\beta\varepsilon}} = \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \qquad (١-٢٨)$$

بوضع هذه القيمة للطاقة فى (١-٢٢) نحصل على كثافة طاقة الإشعاع فى الصورة

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 \left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)} \qquad (١-٢٩)$$

وهى صيغة بلانك والتى تعتبر أساس النظرية الكمية.

للترددات الصغيرة $\left(\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1\right)$ فإن الدالة الأسية $e^{\hbar\omega/kT}$ يمكن وضعها فى صورة متسلسلة فى قوى $\frac{\hbar\omega}{kT}$ والاكتفاء بالحد الخطى وعندئذ صيغة بلانك إلى صيغة رالى —جينز (١-٢٥) بينما فى حالة الترددات العالية فيمكن إهمال الواحد الصحيح فى المقام لنحصل على

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/kT} \qquad (١-٣٠)$$

صيغة بلانك (١-٢٩) والتى تصف ارتباط كثافة طيف الإشعاع ρ_ω بالتردد ω تكاد تتطابق مع النتائج المعملية.

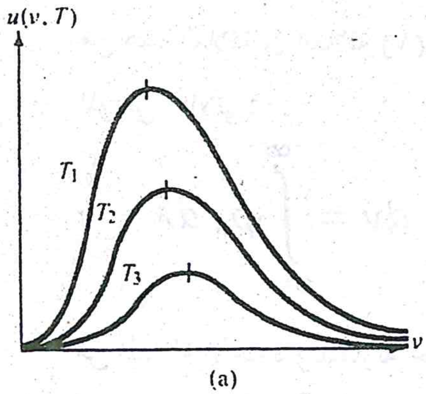
بالتعويض من (١-٢٩) فى (١-٢٦) نحصل على تكامل كثافة طاقة الإشعاع

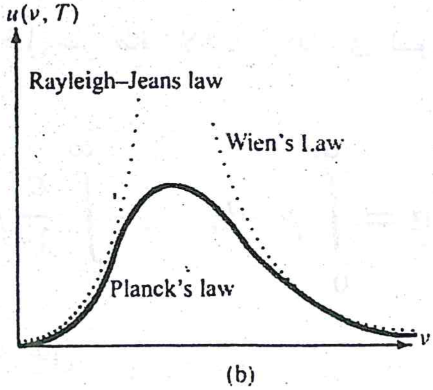
$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

وباستخدام التعويض $\eta = \frac{\hbar\omega}{kT}$ مع الأخذ فى الاعتبار أن $\int_0^\infty \frac{\eta^3 d\eta}{e^\eta - 1} = \frac{\pi^4}{15}$ نحصل على القانون المعروف بقانون ستفان–بولتزمان

$$u = \frac{\pi^2}{15} \frac{k^4 T^4}{c^3 \hbar^3} = aT^4 \qquad (١-٣٢)$$

حيث $a = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} = 7.56 \times 10^{-13} erg.cm^{-3}.deg^{-4}$





(أ) كثافة الطاقة الطيفية المعملية لقيم مختلفة لدرجات الحرارة T_1, T_2, T_3 حيث $T_1 > T_2 > T_3$،
(ب) المنحنى المتصل يمثل التوزيع القيم المعملية وقيم التوزيع طبقا لنظرية بلانك حيث ينطبقا تماما، المنحنى النقطى يناظر توزيعى رالى- جينز وفين.

مثال:

استخدم قانون بلانك للإشعاع للحصول على كثافة الطاقة كدالة فى الطول الموجى λ. إذا كانت الطاقة قيمة عظمى، احسب قيمة الطول الموجى $\lambda_{\max}$ عند تلك القيمة للطاقة. كذلك بين أن $\lambda_{\max} = b/T$، حيث T درجة الحرارة المطلقة، احسب أيضاً قيمة الثابت b.

الحـــــل

نعلم أن طاقة الإشعاع الكلية تعطى من

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega \, d\omega = \int_0^\infty \rho_\nu \, d\nu \qquad (١)$$

وباستخدام العلاقة $\Rightarrow \nu = c/\lambda$ ، $c = \lambda\nu$ نجد أن $d\nu = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$

حيث c سرعة الضوء.

من هذه العلاقة فى العلاقة (١) نحصل على ظاقة الإشعاع كدالة فى الطول الموجى كالآتى:

$$u = \int_0^\infty \rho_\nu \, d\nu = -\int_0^\infty \frac{c}{\lambda^2} \rho_\nu \, d\nu = \int_0^\infty \rho_\lambda \, d\lambda$$

من المعادلة الأخيرة وبالمقارنة نحصل على

$$\rho_\lambda = -\frac{c}{\lambda^2} \rho_\nu = -\frac{c}{\lambda^2} \frac{h\nu^3}{\pi^2 c^{3(e^{hc/kT}-1)}}$$

$$= \frac{hc^4}{\pi^2 c^3 \lambda^5 (e^{hc/\lambda KT} - 1)} = \frac{hc}{\pi^2 \lambda^5 (e^{hc/\lambda KT} - 1)}$$

العلاقة الأخيرة تعرف بعلاقة الطول الموجى لقانون بلانك. ولإيجاد القيمة العظمى للطول الموجى نوجد النهاية العظمى للكمية ρ_λ وذلك بالتفاضل بالنسبة للطول الموجى λ ثم مساواة ذلك بالصفر، أى أن

$$\frac{d\rho(\lambda)}{d\lambda} = \left(\frac{5}{\lambda^6 (e^{hc/\lambda KT} - 1)} + \frac{hc\, e^{hc/\lambda KT}}{KT\lambda^7 (e^{hc/\lambda KT} - 1)^2} \right) = 0$$

ومنها نجد أن

$$5 - \frac{hc\, e^{hc/\lambda KT}}{KT\lambda^2 (e^{hc/\lambda KT} - 1)} = 0$$

وبوضع $z = \dfrac{hc}{\lambda KT}$ نحصل على

$$5e^z - ze^z - 5 = 0$$

ومنها نجد أن

$$z = 5(1 - e^{z})$$

وهذ المعادلة يمكن حلها عدديا والذى يعطى القيمة $z \approx 4.965$ ومنها نحصل على

$$z = \frac{hc}{\lambda_{\max} KT} \approx 4.965$$

أى أن

$$T\lambda_{\max} = \frac{hc}{4.965\,K} = b \Rightarrow \lambda_{\max} = b/T$$

وهى العلاقة المطلوبة

تمرين(١):

باستخدام الصيغة الناتجة من المثال السابق، قدر درجة الحرارة لسطح نجم إذا أصدر إشعاعا بأقصى طول موجى قيمته ٤٤٦ نانومتر، ماهى كثافة الطاقة الكلية للإشعاع الذى يصدره هذا النجم (استخدم قائمة الثوابت الفيزيائية).

تمرين(٢): باستخدام قائمة الثوابت الفيزيائية قدر الطول الموجى وكثافة الطاقة الكلية لشعلة سبيكة تنجستين إذا كانت درجة حرارة سطحها تساوى ٣٣٠٠ درجة

٧. نهاية الميكانيكا الكلاسيكية وبداية ميكانيكا الكم القديمة

أ- فشل القوانين الكلاسيكية فى دراسة حركة الجسيمات الأولية

لنبين ذلك سنحاول الآن دراسة حركة الإلكترون فى النموذج الكوكبى لرازرفورد فى الذرات الشبيهة بالهيدروجين باستخدام القوانين الكلاسيكية. فى مثل تلك النماذج يدور حول النواة ذات الشحنة الموجبة Ze الكترون واحد شحنته $e_0 = -e$، فلذرة الهيدروجين $Z = 1$ ولذرة الهيليوم المؤينة He^+ $Z = 2$ وهكذا.

باستخدام الإحداثيات القطبية (r, θ) نجد أن طاقة الحركة T وطاقة الجهد V فى مجال كولوم تساويان على الترتيب

$$T = \frac{m_0}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\emptyset}^2\right), \quad V = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (١-٣٣)$$

وتأخذ دالة لاجرانج الصورة

$$L = \frac{m_0}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\emptyset}^2\right) + \frac{Ze^2}{r} \qquad (١-٣٤)$$

ومنها نحصل على معادلات حركة الإلكترون فى الصورة

$$\frac{dp_r}{dt} = \frac{\partial L}{\partial r}, \qquad \frac{dp_\emptyset}{dt} = \frac{\partial L}{\partial \emptyset} \qquad (١-٣٥)$$

حيث كميتى الحركة المعممتين $p_r,\ p_\emptyset$ المقابلتين للإحداثيين المعممين $r, \emptyset$ تساويان على الترتيب

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m_0\dot{r}, \quad p_\emptyset = \frac{\partial L}{\partial \dot{\emptyset}} = m_0 r^2\dot{\emptyset} \qquad (١-٣٦)$$

وحيث أن $\emptyset$ إحداثى مختفى فإن كمية الحركة المقابلة له $p_\emptyset$ تكون كمية ثابتة أى أن

$$p_\emptyset = m_0 r^2 \dot{\emptyset} = const. \tag{١-٣٧}$$

تمثل قانون بقاء كمية الحركة الزاوية أما قانون البقاء الثانى الذى يمثل ثبوت الطاقة الكلية E أثناء الحركة والذى يتضح من عدم اعتماد دالة لاجرانج على الزمن بصراحة فيأخذ الصورة

$$E = T + V = \frac{m_0}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\emptyset}^2\right) - \frac{Ze^2}{r} = const.$$

(١-٣٧)

وفى حالة المسارات الدائرية حيث $\dot{r} = 0$ نحصل على

$$\frac{\partial L}{\partial r} = m_0 r\dot{\emptyset}^2 - \frac{Ze^2}{r^2} = 0 \tag{١-٣٨}$$

ومنها نجد أن

$$\dot{\emptyset}^2 = \frac{Ze^2}{m_0 r^2} \tag{١-٣٩}$$

وعندئذ فإن الطاقة الكلية تساوى

$$E = \frac{m_0}{2} r^2\dot{\emptyset}^2 - \frac{Ze^2}{r} = \frac{Ze^2}{2r} = \frac{V}{2} \tag{١-٤٠}$$

وبإدخال اللاتغيرى الأدياتيكى I الذى يتحدد بالعلاقة

نجد أن الشرط (١-٣٧) يؤدى إلى (حيث $q_\beta = \emptyset$)

$$p_\emptyset = m_0 r^2\dot{\emptyset} = I \Rightarrow \dot{\emptyset} = \frac{I}{m_0 r^2} \tag{١-٤١}$$

وبذلك يمكن الحصول على كل من $r, \emptyset$ بدلالة اللتغيرى الأدياتيكى من (١-٣٩)، (١-٤١) فى الصورة

$$r = \frac{I^2}{m_0 Z e^2}, \quad \dot{\emptyset} = \frac{m_0 Z^2 e^4}{I^3} \qquad (١-٤٢)$$

وكذلك فإن الطاقة الكلية E من (١-٤٠)

$$E = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2I^2} \qquad (١-٤٣)$$

ومنها نوجد التردد الميكانيكى للذبذبة ω_0 فى الصورة

$$\omega_0 = \frac{\partial E}{\partial I} = \frac{m_0 Z^2 e^4}{I^3} \qquad (١-٤٤)$$

مما سبق تتضح المشاكل الآتية عند تطبيق القوانين الكلاسيكية لتضع حدا لاستخدام مثل هذه القوانين لدراسة مثل تلك الجسيمات

- فرض أن الإلكترون أثناء دورانه حول النواة يفقد طاقة نتيجة لوجود العجلة المركزية وباستمرار فقد الطاقة ينتقل الإلكترون إلى مستويات طاقة أقل ومن ثم يصل فى النهاية إلى النواة ويتفى النموذج المفروض للذرة
- تردد الذبذبة الميكانيكية المساوى لتردد الإشعاع لا يستطيع تفسير سلسلة بالمر التجريبية لخطوط طيف الإشعاع

ب- ظهور ميكانيكا الكم القديمة

بدأت بفرض بوهر فرضين طبقا على النموذج الكوكبى للذرة

الفرض الأول: يوجد لكل ذرة مجموعة من المنازل المستقرة المنفصلة يتحرك فيها الإلكترون بعجلة دون أن يفقد أو يشع طاقة ويتم تطبيق ذلك بقاعدة ويلسون ـــــ سمرفيلد لتكميم اللاتغيرى الأدياباتيكى

$$I = (2\pi)^{-1} \oint p\,dq = n\hbar \qquad (١-٤٥)$$

حيث n تسمى العدد الكمى وتكون أعداد صحيحة $n = 0, 1, 2, \ldots$ على عكس الميكانيكا الكلاسيكية التى يأخذ فيها أى قيمة ثابتة

<u>الفرض الثانى:</u> عند انتقال الإلكترون من إحدى المنازل المستقرة (الابتدائية) ذات الطاقة E_n إلى أخرى (النهائية) ذات الطاقة $E_{\acute{n}}$ $(E_{\acute{n}} < E_n)$ فإن الذرة يجب أن تشع كمية من الطاقة بمقدار الفرق بين طاقتى المنزلتين وتساوى وبذلك فإن التردد الزاوى للإشعاع يتحدد من العلاقة

$$\omega = \frac{E_n - E_{\acute{n}}}{\hbar} \qquad (٤٦-٢)$$

ولتطبيق فروض بوهر على ذرة الهيدروجين $Z = 1$ نقوم باستبدال اللاتغيرى الأدياباتيكى فى النتائج الكلاسيكية بقيمته الكمية ثم نوجد تردد الإشعاع باستخدام الفرض الثانى

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{m_0 e^2} = n^2 a_0, \quad E_n = -\frac{m_0 e^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2n^2 a_0} \qquad (٤٧-١)$$

حيث $a_0 \approx 0.529 \times 10^{-8} cm.$ نصف قطر بوهر أول مسار لبوهر

$$\omega_{n\acute{n}} = \frac{E_n - E_{\acute{n}}}{\hbar} = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{\acute{n}^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R\left(\frac{1}{\acute{n}^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (٤٨-١)$$

حيث $R = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^3}$ تحدد العلاقة بين ثابتى رايدبيرج وبلانك.

بالرغم من وجود مظاهر التأييد لنظرية بوهر إلا أن بها بعض القصور فى تفسير الظواهر الطبيعية الخاصة بالجسيمات الأولية وذلك للأسباب الآتية

❖ النظرية خليط من العالجة الكلاسيكية والكمية (شبه الكلاسيكية) مع وجود التعارض بينهما الذى ينص عليه فرض بوهر الأول

❖ تسمح بحساب تردد خطوط الطيف دون شدتها

❖ تتضمن الأعداد الكمية الصحيحة فقط فى حين توجد مجموعات ميكانيكية تحتاج فى وصفها لأعداد كسرية

❖ لا تتمكن من معالجة الذرات كثيرة الإلكترونات بما فى ذلك ذرة الهيليوم التى تحتوى على إلكترونين فقط

تمرين (١): البوزيترونيوم هو الحالة المحدودة للإلكترون والبروتون، ويمكن اعتباره ذرة هيدروجين قصيرة زمن الحياة حيث يمكن استبدال البوزيترون بالبروتون:

(أ): احسب طاقة ونصف قطر البوزيترونيوم $\bar{E}_n$ ، r_n

(ب): قدر قيم الطاقة لأدنى ثلاث حالات وكذلك انصاف أقطار ممداراتها

(ج): احسب التردد والطول الموجى للإشعاع الكهرومغناطيسى الذى فقط يؤين ذرة البوزيترونيوم عندما يكون فى الحالة المسارة الأولى.

تمرين(٢):

كلاسيكياً، يشع إلكترون يدور فى مدار دائرى عند تردد مساوٍ لتردد حركته حول المدار، أى أن:

$$\nu = \mathrm{v}/2\pi r$$

حيث ν تردد الإشعاع المنبعث، v سرعة الإلكترون المدارية و r نصف قطر المدار. احسب تردد الإشعاع المنبعث نتيجة لإنتقال الإلكترون من المدار $(n+1)$ إلى المدار n ثم بين كيف يعمل مبدأ التناظر فى حالة قيم n الكبيرة.

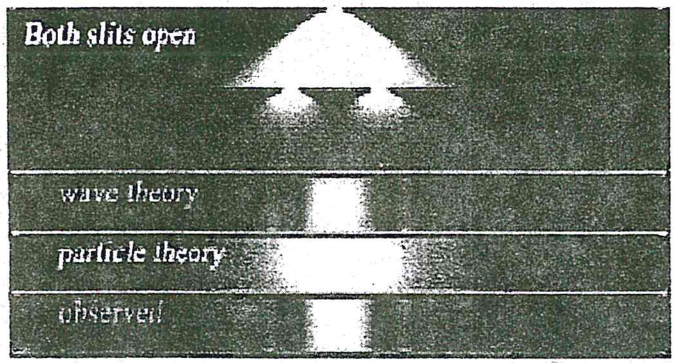
الباب الثانى

أساسيات ميكانيكا الكم والنظرية الكمية الحديثة

(١-٢) النظرية الكمية الحديثة:

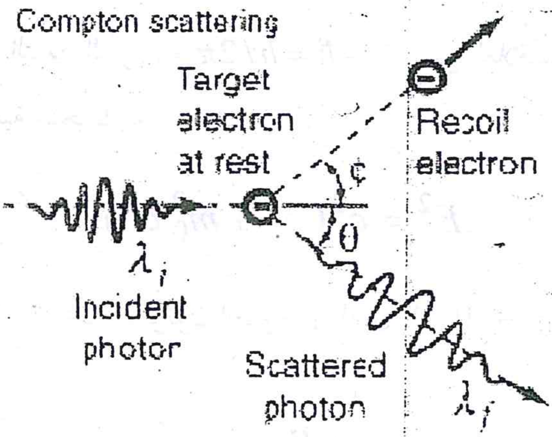
✓ **فرضيّة دو بروجليه و الخاصية المزدوجة(الجسيمية ـ الموجية) للجسيم:**

في بداية القرن التاسع عشر كان النقاش -محتدماً بين الفيزيائيين على طبيعة الضوء، موجات هو أم جسيمات؟ انحسم النقاش (مؤقتاً) بتجربة يونغ (*Young*) والتي برهن فيها على أن الأشعة الضوئية الصادرة من مصدرين مختلفين تتداخل مع بعضها تداخلات هدّامة وبنّاءة (*constructive & destructive interference*) وأنّه لا يمكن تفسير هذه الظاهرة إلاّ إذا اعتُبِر الضوء موجات.



في المقابل لا يمكن تفسير نتائج تجارب التأثير الضوئي إلاّ إذا اعتبر الضوء جسيمات صغيرة (سمّيناها الفوتونات). كما أكّدت التجارب التي

أجراها كومبتون (*Compton*) في العام ١٩٢٢ أنّ الفوتونات هذه جسيمات حيث أنّها تملك عزماً (زَخَماً *momentum*)، فعند اصطدام الضوء بجسيمات خفيفة كالإلكترونات مثلاً فإنّ الإلكترونات تغيّر مسارها، كما أنّ الضوء الساقط على هذه الالكترونات يتغيّر طوله الموجي حسب ما يقتضيه قانون حفظ العزم، ممّا يشير أنّ "جسيمات" الضوء نقلت جزءاً من عزمها إلى الالكترونات وفقدت بذلك جزءاً من طاقتها فطالت موجتها (تصادم مرن *elastic collision*).



نظر عالم الرياضيات دو بروليّ متأمّلاً في هذه التجارب المتعلّقة بطبيعة الضوء والتي تشير إلى أنّ الضوء ذو طبيعة ثنائية، فتارةً يمكن اعتباره موجة وتارةً يمكن اعتباره جسيمات وتساءل فيما إذا كان من الممكن أن يُوسّع مفهوم الطبيعة الثنائية ليشمل الجسيمات الأخرى مثل الالكترونات على سبيل المثال. ولكن ما الذي يمكن أن يربط بين الأمواج والجسيمات؟

قدّمت النظرية النسبية لآينشتاين جواباً مقنعا للسؤال الفائت: إنّها الطاقة! فالكتلة —وهي صفة من صفات الأجسام- ما هي إلاّ شكل من أشكال الطاقة، وقد لخّص آينشتاين هذه الحقيقة في معادلته المشهورة والتي تقرّر أنّ محتوى طاقة أيّ جسم يساوي كتلة ذلك الجسم مضروباً بمربّع سرعة الضوء. وحيث أنّ الفوتون له طاقة، فهو ولا شكّ له كتلة وبالتالي له عزم (تذكّر أنّ العزم يساوي الكتلة مضروبةً بالسرعة $p=m\times v$):

من المعادلة (١-١-١):

$$E=\hbar\omega \qquad (١-٢-١)$$

حيث $\omega=2\pi\nu$ التردد الزاوى و $\hbar=h/2\pi$. ومن العلاقة النسبية المعروفة لجسيم كمية التحرك له $p=m\,v$:

$$E^2=c^2(p^2+m_0^2c^2) \qquad (١-٢-٢)$$

والتى تأخذ الصورة فى حالة فوتون الضوء (الذى له $m_0=0$ فى حالة السكون) نجد أن:

$$E=cp \qquad (١-٢-٣)$$

كذلك من نظرية الموجات نجد أن التردد الزاوى يرتبط مع المتجه الموجى بالعلاقة:

$$\omega=ck \qquad (١-٢-٤)$$

وبربط العلاقات السابقة (١-٢-١) إلى (٤-٢-١) يمكننا الحصول على:

$$cp = \hbar ck \qquad (١-٢-٥)$$

ومنها:

$$p = \hbar k \qquad (١-٢-٦)$$

حيث كما ذكرنا $p = m\,v$ كمية التحرك لجسيم كتلته m، ومن هنا اقترح (دى بروجليه) أن هذه المعادلة تتحقق لكل الموجات الجسيمية التى لها كتلة غير صفرية . وحيث أن العدد الموجى $k = 2\pi/\lambda$ حيث λ الطول الموجى، فإن المعادلة (٦-٢-١) تأخذ أيضاً الصورة:

$$\lambda = h/p = h/mv \qquad (١-٢-٧)$$

أو بمعنى آخر فإن الطول الموجى للجسيم يتناسب تناسباً عكسياً مع كمية تحركه، وثابت التناسب فى هذه الحالة هو ثابت بلانك.

حسب ما تقتضيه معادلة دو بروليّ (المعادلة الأخيرة) فإنّ أيّ جسمٍ يتحرك يمكن اعتباره موجة!! حتّى الأجسام الضخمة يمكن أن نعتبرها موجة!!!!

ويجب ان نلاحظ أن ازدواج الخاصية للجسيمات تتلاشى تماماً إذا آل ثابت بلانك إلى الصفر.

مما سبق نصل إلى أنه من وجهة النظر الموجية تكون العلاقات التى تحكم سلوك الجسيم هى:

$$E = \hbar\omega,\ \vec{p} = \hbar\vec{k},\ p = h/\lambda,\ k = 2\pi/\lambda \qquad (١-٢-٨)$$

أما من وجهة النظر الجسيمية فيحكم سلوك الجسيم العلاقات:

$$E = mc^2,\ \bar{p} = m\bar{v},\ E^2 = c^2(p^2 + m_0^2 c^2) \qquad (٩-٢-١)$$

وبذلك نجد أننا فى حاجة إلى معادلة جديدة لتصف حركة هذه الأجسام الدقيقة والتى لها الطبيعة الموجية. وقد يمكن العالم شرودنجر من الحصول على هذه المعادلة الموجية الجديدة التى تصف هذا السلوك لهذه الأجسام من الناحية الموجية، والتى تعتبر أساس الميكانيكا الكمية، والتى سوف نتناولها بالتفصيل فى الأجزاء والفصول اللاحقة.

مثال: احسب طول الموجة التي يمثّلها لاعب كرة قدم كتلته ٦٠ كجم يتحرّك في الملعب بسرعة ١٠ كم/ساعة؟

الحـــل

$$v = 10\,km/h = \frac{10000\ m}{3600\ s} = 2.778\ m/s$$

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.6\times10^{-34}\ Js\ s}{60\times 2.778\ \ kg\,m} = 3.96\times10^{-35}\,m$$

تمرين (١): احسب كتلة فوتون طوله الموجي ٤٥٠ nm.

تمرين (٢): احسب الطول الموجي لإلكترون واقع تحت تأثير جهد كهربائي مقداره ١٠٠ V.

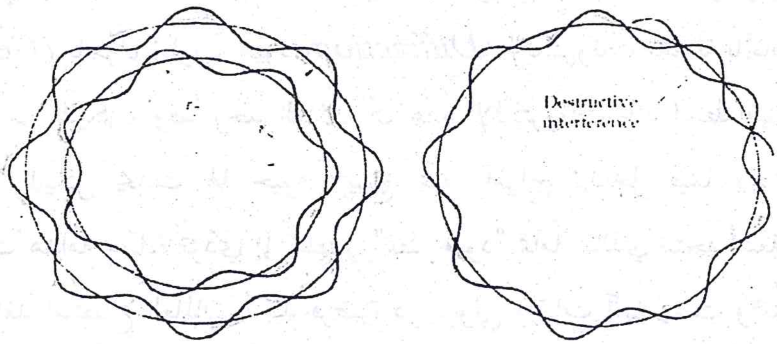
تمرين (٣): احسب الطول الموجي لدى بروجليه لإلكترون طاقة حركته ٧٠ ميجا إلكترون فولت وحدة طاقة حركة

في العام ١٩٢٧ قام العالمان ديفيسون (*Davisson*) وجرمر (*Germer*) بإجراء تجارب حيود (*Diffraction*) لإلكترونات معجّلة باتجاه صفيحة من النيكل، وقد وجد العالمان أنّ هذه الإلكترونات عند اصطدامها بصفيحة النيكل يحدث لها حيود وينتج عنها أمواج تتداخل فيما بينها تداخلات هدّامة وبنّاءة تؤدّي إلى ظهور "نمط حيود" تماماً كالذي تنتجه أشعّة إكس. لقد استطاع العالمان تأكيد فرضية دو برولّي وإثبات أنّها ليست وهماً رياضيّاً بل حقيقة عمليّة. ومن الجدير بالذكر أنّ المايكروسكوب الإلكتروني يّعتمد في مبدأ تشغيله على حقيقة أنّ الإلكترونات هي أمواج.

من الواجب ذكره في هذه المرحلة أنّ فرضيّة دو برولّي قدّمت تفسيراً علميّاً لبعض مسلّمات نظرية بور. فبور لم يقدّم أيّ تفسير لماذا يجب أن يكون العزم الزاويّ من مضاعفات $h/2\pi$، ولماذا تكون الالكترونات في مدارات محدّدة، كما أنّه لم يقدّم تفسيراً حقيقيّاً لماذا لا تُصدر الإلكترونات أشعّة كهرومغناطيسيّة عند دورانها حول النواة. وسنوجز فيما يلي نتائج فرضيّة دو برولّي فيما يخصّ نظرية بور:

١. يوضّح الرسم التالي أنّ محيط المدار الموجود فيه الإلكترون يجب أن يكون من مضاعفات الطول الموجي لذلك الإلكترون وإلاّ تداخلت

موجة الإلكترون مع بعضها تداخلاً هدّاماً مّما يؤدّي إلى فناء الالكترون (b). من هذا نستنتج أنّ هناك مدارات محدّدة يتواجد فيها الإلكترون.



(a) (b)

٢. رياضيّاً يكتب الشرط أعلاه على النحو التالي:

$$2\pi r = n\lambda$$

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

$$2\pi r = n\frac{h}{mv}$$

$$mvr = L = n\frac{h}{2\pi}$$

ومنه يتبيّن أنّ العزم الزاويّ من مضاعفات $h/2\pi$.

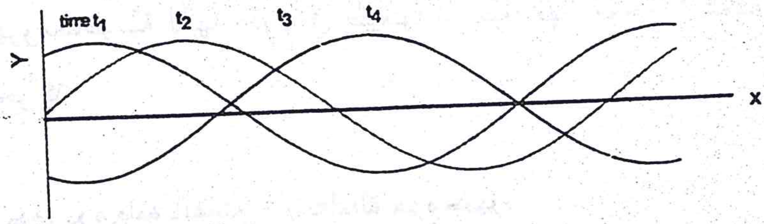
٣. لا تصدر الإلكترونات خلال دورانها حول النواة موجات كهرومغناطيسيّة لأنّها تكون في طبيعتها الموجيّة، فهي موجة لا شحنة متحرّكة.

✓ **موجة دي بروجليه المستوية ومعادلة شرودنجر:**

ولكن إذا كان الإلكترون موجة، فكّر شرودنجر، فإنّنا ولا شكّ نستطيع أن نطبق عليه معادلة الموجات:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

المعادلة السابقة هي معادلة موجة في بُعدٍ واحد، بمعنى أنّ الموجة تتحرّك فقط في اتّجاهٍ واحد، وليكن في اتّجاه محور السينات $X\text{–}axis$. تمثّل c في المعادلة أعلاه السرعة التي تتحرّك بها الموجة والتي تساوي سرعة الضوء في حالة الأمواج الكهرومغناطيسيّة. أمّا y فتسمّى الإزاحة. ولتوضيح معنى الإزاحة وتأثّرها بالزمن t والمسافة X التي تقطعها الموجة نتأمّل في الموجة الناتجة عن إلقاء حجر في بركة ماء، والمتمثّلة بـ"القمم والوديان" التي تبدأ بالتحرك بعيداً عن مركز إلقاء الحجر.



تسمّى الموجة الناتجة من إلقاء حجر في الماء موجةً عرضيّة لأنّ جزيئات الماء لا تتحرّك باتّجاه الموجة (X) وإنّما تكون حركتها عموديّةً على اتّجاه الموجة، فالجزيئات تتحرّك إلى الأعلى وإلى الأسفل في الاتّجاه Y، ويطلق على المسافة التي تقطعها الجزيئات فوق وتحت مستوى الماء الساكن (مستوى الصفر) قبل إلقاء الحجر مصطلح الإزاحة وتكون الإزاحة سالبة إذا كانت الجزيئات تحت مستوى الماء الساكن وموجبةً إذا كانت فوقه. ونلاحظ من الرسم أعلاه أنّ مقدار الإزاحة يعتمد على أمرين اثنين: الأول هو بعد الجزيئات، X، عن مركز الموجة (موضع إلقاء الحجر) والثاني هو الزمن، t، بعد إلقاء الحجر. فنرى في الرسم أنّه عند نقطة زمنيّة محدّدة (t_1 مثلاً) تختلف قيمة الإزاحة Y بحسب قيمة X، كما وأنّه عند قيمة محدّدة لـ X فإنّ الإزاحة تتغيّر مع مرور الزمن (من t_1 إلى t_4).

اقترح شرودنجر أن يُعوَّض في معادلة الأمواج بدلاً من الإزاحة دالّة أخرى تمثّل الموجة الإلكترونيّة وأعطيت هذه الدالّة الرمز ψ ، وتسمّى أيضاً الدالّة الموجيّة:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

من الناحية الرياضيّة فإنّ المعادلة أعلاه هي معادلة تفاضليّة جزئيّة من الدرجة الثانية، ويأخذ الحلّ العام لمثل هذه المعادلات الشكل التالي:

$$\psi(x,t) = C\, e^{i(kx - Qt)} \qquad (١-٢-١٥)$$

وبالنسبة للموجات فإنّ

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad Q = \omega = 2\pi\nu \qquad C = amplitude$$

يتمّ الآن تعويض الطول الموجي للإلكترون من معادلة دو بروليّ وتردد موجته من معادلة بلانك:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{2\pi p}{h}$$

$$\upsilon = \frac{E}{h} \quad \Rightarrow \quad Q = \frac{2\pi E}{h}$$

تصبح بذلك الدالة ψ على النحو التالي:

$$\psi(x,t) = C \cdot e^{2\pi i x p_x / h} \cdot e^{-2\pi i E t / h} \qquad .....(2.1)$$

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

$$\psi(x) = C \cdot e^{2\pi i x p_x / h} \qquad \phi(t) = e^{-2\pi i E t / h} \qquad ...(2.2)$$

نلاحظ أنّه في المعادلة الأخيرة تمّ قصر p على مركّبتها في البعد X (p_x) حيث أنّ الموجة موجودة فقط في البعد X. كما نلاحظ أنّنا قمنا بتقسيم الدالة الكلّيّة

إلى دالّتين فرعيّتين، إحداهما تعتمد فقط على المكان (X) والأخرى تعتمد فقط على الزمن (t).

نقوم الآن باشتقاق الدالة الكلية بالنسبة للزمن:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = C \cdot e^{2\pi i x p_x / h} \cdot \left(-\frac{2\pi i E}{h} e^{-2\pi i E t / h} \right)$$

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{2\pi i E}{h} \cdot \psi(x,t)$$

$$-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial [\psi(x,t)]}{\partial t} = E\psi(x,t)$$

نرمز للعملية الرياضية على يسار المعادلة الأخيرة والتي أُخضعت لها الدالة الكلية بالرمز $\hat{H}$، وتصبح المعادلة على النحو التالي:

$$\hat{H} \equiv -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \qquad ....(2.3)$$

$$\Rightarrow \qquad \hat{H}\psi(x,t) = E\psi(x,t)$$

نتنبّه إلى أنّه لا يمكننا "شطب" ψ من طرفي المعادلة حيث $\hat{H}$ ليست شيئاً مستقلاً بل هي عملية رياضية مثل عملية إيجاد الجذر التربيعي في المعادلة $1 \times 1 = \sqrt{1}$، إذ لا يمكننا أن "نشطب" الواحد من كلا الطرفين ونحصل على $1 = \sqrt{}$. نرمز بشكلٍ عام لأي عملية رياضية بحرف لاتيني كبير فوقه "قبّعة" ($\hat{O}$) ويسمّى مؤثّراً رياضيّاً (*mathematical operator*). وحسب المعادلة الأخيرة فإنّ $\hat{H}$ هي المؤثّر الرياضي الذي إذا أُخضعت له الدالة الكلية فإنّه يُنتج نفس الدالة مضروبة بالطاقة، وتسمّى $\hat{H}$ لذلك بالمؤثّر الهاميلتوني.

ولكن سرعان ما اكتشف أنها لا يمكن تطبيقها مع الإلكترونات، حيث لا تعطى الطيف الصحيح لذرة الهيدروجين. كما أنه عند التعويض عن الدالة الموجية (١-٢-١٥) فى المعادلة:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2}=\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi \qquad (١-٢-١٨)$$

سوف نحصل على العلاقة النسبية بين الطاقة وكمية الحركة:

$$E^2=c^2(p^2+m^2c^2) \qquad (١-٢-١٩)$$

فحول نظره إلى الشكل التالى الذى يربط المشتقة الأولى فى الزمن للدالة الموجية $\Psi(x,t)$ بمشتقتها الثانية فى الإزاحة، كالآتى:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad (١-٢-١٦)$$

وذلك ضرورياً لكى تعطى الحلول لمعادلته موجات دى برولى النسبية فى الحدود اللانسبية. لنرى ذلك، نعتبر حل معادلة شرودنجر هو موجة دى برولى المستوية (١-٢-١٥) وبالتعويض فى معادلة شرودنجر (١-٢-١٦) نحصل على:

$$E=\frac{p^2}{2m} \qquad (١-٢-١٧)$$

وهى العلاقة اللانسبية الصحيحة بين الطاقة وكمية التحرك [illegible] الحرة.

✓ **معادلة شرودنجر فى بعد واحد:**

فى العادة أو من المعروف أن المعادلات الموجية الحقيقية تربط المشتقة الثانية فى الزمن للدالة الموجية $\Psi(x,t)$ بمشتقتها الثانية فى الإزاحة ولكن تربط معادلة شرودنجر للدالة الموجية $\Psi(x,t)$

ويبرز هنا تساؤل هام، لماذا حدد شرودنجر هذه الصورة بالذات؟!، يجيب شرودنجر أن

هناك تساؤل آخر يحتاج إلى إجابة، ما الذى يحدث إذا بدأ شرودنجر بالمشتقة الثانية فى الزمن للدالة الموجية؟!.

والإجابة تكون يسيرة إذا اتبعنا نفس الإجراء السابق وهو التعويض عن الدالة الموجية (١-٢-١٥) فى المعادلة:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2}=\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi \qquad (١-٢-١٨)$$

سوف نحصل على العلاقة النسبية بين الطاقة وكمية الحركة :

$$E^2=c^2(p^2+m^2c^2) \qquad (١-٢-١٩)$$

على أى حال، لابد وأن يكون هناك ثمن لخرق القواعد الأساسية للدوال الموجية. حيث أن حلول معادلة شرودنجر فى هذه الصورة (١-٢-١٦) ليست موجات فيزيائية حقيقية، بل دوال مركبة لها جزء حقيقى وآخر تخيلى، والذى وضع الفيزيائيين والرياضيين فى ورطة حقيقية لإيجاد تفسير لهذه الحلول، وهو الإجابة على التساؤل، ماذا تعنى الدالة الموجية الناتجة من حل معادلة

شرودنجر فيزيائياً؟!. الخروج من المأزق كان بواسطة التفسير الـــذى اقترحـــه العالم (ماكس بورن)

✓ التفسير الاحتمالى للدالة الموجية:

تسمّى المعادلة (٢.٧) معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن (*time-dependent*). في حالات كثيرة يكون النظام مستقراً (*stationary*) ممّا يعني أنّ النظام لا يتغيّر مع الزمن، عندها تكون الدالة الفرعية $\psi(t)$ ثابتة لا متغيرة ويمكن بالتالي حذفها من طرفي المعادلة لنحصل على معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن (*time-independent*) (٢.٩):

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2+V(x,y,z,t)\right]\psi(x,y,z,t)=E\psi(x,y,z,t)$$

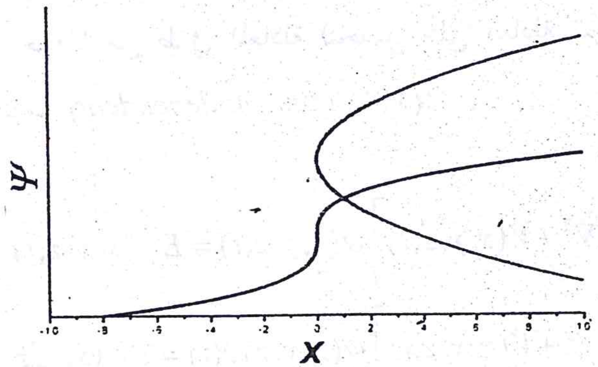
$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2+V(x,y,z,t)\right]\psi(x,y,z)\phi(t)=E\psi(x,y,z)\phi(t)$$

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2+V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \qquad ....(2.9)$$

تنبع أهمّية معادلة شرودنجر من أنّها –إذا استطعنا حلّها- نحصل على الدالة $\psi(t)$ والتي بدورها هي مصدر كلّ المعرفة عن صفات النظام الفيزيائية. إلاّ أنّ حلّ معادلة شرودنجر ليس سهلاً كما قد يبدو للوهلة الأولى، بل على العكس تماماً. وفي معظم الأحيان يكون الحلّ مضبوطاً (*exact*) متعذّراً، الأمر الذي أدّى إلى تطوير طرق حلّ تقريبية لإعطاء جواب تقريبي. وممّا يساعد على

الحلّ أنّ هناك شروطاً رياضية يجب توفّرها في الدالة الموجية حتى تكون مقبولة نوجزها فيما يلي:

أ. أن تكون الدالة أحاديّة القيمة (*single-valued*)، بمعنى أنّه لكلّ قيمة محدّدة من X هنالك قيمة واحدة فقط للدالة يمثّل الرسم التالي دالّتين، إحداهما أحادية القيمة (الأزرق) والأخرى متعدّدة القيمة (الأحمر) حيث نجد في الأخيرة أنّ هناك قيمتين مختلفتين للدالة $\psi(t)$ لنفس القيمة من X، مثلاً $X=6$.



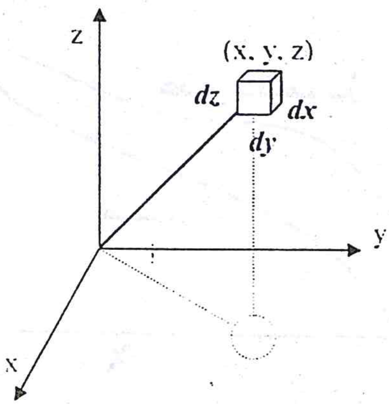
ولكن لماذا يشترط في الدالة الموجية أن تكون أحادية القيمة؟ إنّ الدالة الموجية هي مجرّد دالّة رياضيّة لا تحمل أيّ معنىً فيزيائيّ، وممّا يدل على ذلك أنّ الدالة الموجيّة تحتوي في كثيرٍ من الأحيان على أعداد خياليّة. إلاّ أنّ العالم ماكس بورن أعطى مربّع الدالة الموجيّة $\psi^2(t)$ (أو حاصل ضرب الدالة بقرينتها إنْ كانت مركّبة $\psi\psi^*$) معنىً فيزيائياً هو احتمالية تواجد الجسم الموصوف بهذه الدالة في نقطة مكانيّة محدّدة (ونقطة زمانيّة

محدّدة إذا لم تكن الحالة الموجود فيها ذلك الجسم مستقرّة). فإذا عرفنا الدالة الموجية الخاصة بإلكترون يدور حول نواة ذرة الهيدروجين فإنّنا نستطيع أن نعرف من مربّع الدالة الموجية احتمالية تواجد الإلكترون في الأمكنة المختلفة المحيطة بالنواة. نعبّر رياضيّاً عن هذه الفكرة بالمعادلة التالية:

$$P(x,y,z) = \psi^2 d\tau \qquad\qquad P(x,y,z) = \psi\psi^* d\tau$$

$$d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$$

حيث أنّ P هي احتمال تواجد الجسم في حجم غير متناه في ضآلته $(d\tau)$ عند النقطة (X,Y,Z) في الفضاء.

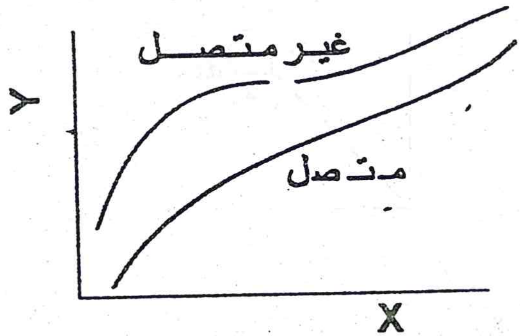


ويطلق أيضاً على مربّع الدالة الموجية $|\psi|^2$ ($\psi\psi^*$) مصطلح كثافة الاحتمالية (*probability density*) لأنّه حاصل قسمة الاحتمالية على الحجم كما يتّضح من المعادلة السابقة:

$$\psi^2 = \frac{P(x,y,z)}{d\tau} \qquad\qquad \psi\psi^* = \frac{P(x,y,z)}{d\tau}$$

إذا أقررنا بصحة تفسير بورن لمربع الدالة الموجية، وجب أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة، إذ لو كانت متعددة القيمة (قيمتان مختلفتان للدالة ψ) لوجب أن يكون هناك احتمالان مختلفان لتواجد الجسم في نفس النقطة، وهذا بالبداهة مرفوض.

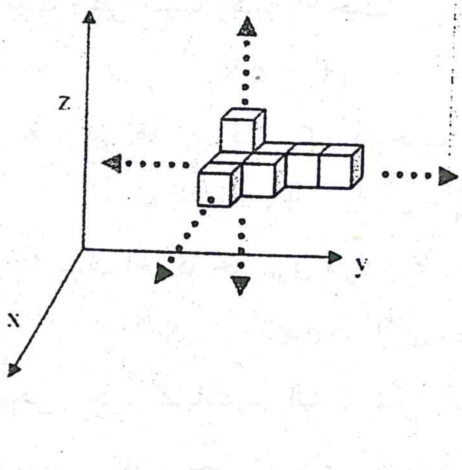
ب. يجب أن تكون الدالة الموجية ψ متّصلة (*continuous*) وكذلك أنْ تكون مشتقتها متّصلة، فهذا ممّا يضمن قابليّتها للاشتقاق وهو ما نحتاجه في معادلة شرودنجر. كما أنّ كون الدالة غير متّصلة يؤدّي إلى كون احتمال تواجد الجسم في نقطة عدم الاتصال غير معرّف.



ت. يجب أن يكون لتكامل مربع الدالة الموجية قيمة معرّفة وليس ما لا نهاية (*quadratically integrable*). كما أنّ الدالة نفسها يجب أن تكون معرّفة في كلّ نقطة ولا يجوز أن تكون مالانهاية وإلاّ كان احتمال تواجد الجسيم في تلك النقطة مالانهاية وهو أمر غير مقبول فيزيائيًا.

نتساءل الآن: ما هو احتمال أن نجدَ مثلاً الإلكترون الدائر حول نواة ذرة الهيدروجين في الفضاء الممتدّ إلى المالانهاية؟ نحن لا نشكّ بوجود ذلك الإلكترون، نحن متأكّدون من أنّه موجود في كوننا، وعلى هذا فاحتمال وجوده في الفضاء الممتدّ إلى المالانهاية حول نواة الهيدروجين هو ١٠٠% أو ١. وإذا كان احتمال تواجد الإلكترون في الحجم $d\tau$ الموجود عند النقطة (X,Y,Z) في الفضاء هو $P(x,y,z)=\psi^2 d\tau$، فإنّ احتمال تواجد الإلكترون في الفضاء الممتدّ إلى المالانهاية هو مجموع احتمالات تواجده في كلّ الأحجام $d\tau$ المتراصّة حول بعضها مكوّنةً الفضاء إلى المالانهاية. والمجموع في لغة الرياضيات هو التكامل، إذاً

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^2 d\tau=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi^* d\tau=1$$



تُسمّى المعادلة الأخيرة شرط العيارية (*Normalization condition*)، وهي السبب فيما اشترط سابقاً من كون مربّع الدالة الموجية قيمة معرّفة لا مالانهاية.

✓ **مبدأ التركيب:**

كما نلاحظ، معادلة شرودنجر معادلة خطية، ولذلك فإن أى تركيبة خطيـــة لمجموعة من الحلول لهذه المعادلة تشكل حزمة موجية يكون حلاً لها أيضاً، وهو ما يعرف بمبدأ التركيب، وهو من المبادىء الأساسية فى ميكانيكا الكم. ويمكن صياغة المبدأ فى الخواص الآتية للدالة الموجية:

أ- ضرب الدالة الموجية فى أى عدد مركب لا يساوى الصفر يمثل دالة موجية جديدة تصف أيضاً نفس المنزلة للمجموعـــة الميكانيكيـــة الموصوفة بالدالة الأصلية، دون تغيير فى صفاتها.

ب- إذا تواجدت مجموعة ما فى المنازل الموصوفة بالدوال الموجيـــة Ψ_1 و Ψ_2 فإنها يمكن أن تتواجد فى النازل الموصوفة بالدوال الموجيةالمكونة بتركيب خطى منهما ولتكن Ψ حيث:

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \qquad (١-٢-٢٣)$$

أى أعداد مركبة. وعلى هذا إذا كان c_1 و c_2 حيث

$$\Psi_1 = e^{ik_1 x}, \quad \Psi_2 = e^{ik_2 x} \qquad (١-٢-٢٤)$$

حيث Ψ_1 و Ψ_2 تصفان الحركة لجسيم فى منزلتين مختلفتين، فإن

$$\Psi = c_1 e^{ik_1 x} + c_2 e^{ik_2 x} \neq c e^{ikx} \qquad (١-٢-٢٥)$$

أى أنه من الممكن وجود كميات فيزيائية لا يمكن تحديدها، وهو ما يعرف بمبدأ عدم التحديد، والذى ليس له نظير كلاسيكى، ويستنتج من مبدأ

التركيب. أيضاً من هذا المبدأ نستنتج أن ظاهرة السكون ليس لها وجود فى الميكانيكا الكمية، اختلافاً عن الميكانيكا الكلاسيكية، فإذا حدث ووجد جسيم ليس له دالة موجية فى منزلة ما، $\Psi = 0$، فإن ذلك يعنى عدم تواجد الجسيم فى هذه المنزلة ويوجد فى منزلة أخرى. من مبدأ التركيب أيضاً نجد أنه إذا كانت نتيجة التكامل للإحتمال $P(r,t) = |\psi(r,t)|^2$ بالنسبة لكل الإحداثيات الممكنة متقاربة أى أن:

$$\int P(r,t)\, d\tau = \int |\psi(r,t)|^2 d\tau = M \qquad (١-٢-٢٦)$$

فإنه يمكن اختيار دالة جديدة بحيث يكون $\psi'(r,t) = \sqrt{M}\,\Psi$ لتحقق الشرط:

$$\int |\psi'(r,t)|^2 d\tau = 1 \qquad (١-٢-٢٧)$$

وهو ما يعرف بشرط المعايرة. وتسمى الدالة $\psi'(r,t)$ فى هذه الحالة دالة متعايرة.

✓ المؤثرات في ميكانيكا الكمّ

تلعب المؤثّرات الرياضية دوراً مركزيّاً في ميكانيكا الكمّ، فهي تمكّننا من معرفة أيّة صفة فيزيائية للنظام الذي ندرسه. كلّ ما علينا القيام به هو معرفة الدالّة ψ التي تصف النظام ومن ثَمَّ نقوم بتشغيل المؤثر الرياضي الخاص بتلك الصفة على الدالة ψ لنحصل على قيمة الصفة الفيزيائية التي نرغب في معرفتها.

لنقل مثلاً إنّنا نريد معرفة العزم، p، لنظامٍ ما، ولنفرض أنّ المؤثر الرياضي الخاص بالعزم معروف لدينا وليكن $\hat{p}$. في حالة العزم بالذات، سنجد أنّ تشغيل المؤثر $\hat{p}$ على الدالة ψ ينتج الدالة ψ مضروبة بالعزم، أي

$$\hat{p}\psi = p\psi \tag{٢.٤}$$

ولكن كيف نعرف كُنْهَ المؤثر $\hat{p}$؟ للإجابة عن هذا السؤال نقوم باشتقاق الدالة الكلّية $\psi(x,t)$ بالنسبة للمتغير x:

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = C\cdot e^{-2\pi iEt/h}\left(2\pi i\frac{p_x}{h}\cdot e^{2\pi ixp_x/h}\right) = 2\pi i\frac{p_x}{h}\psi(x,t)$$

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi \qquad \Rightarrow \hat{p}_x = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{.........(2.5)}$$

المعادلة الأخيرة إذاً، تعطينا مقدار المؤثّر الخاص بالمركّبة السينية للعزم.

بنفس الطريقة نحصل على المؤثّرين الخاصّين بالمركّبتين الأخريين للعزم:

$$\hat{p}_y = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial y} \qquad\qquad \hat{p}_z = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}$$

وعلى هذا فإنّ المؤثّر الخاص بالعزم الكلّيّ هو:

$$\vec{p} = \vec{p}_x + \vec{p}_y + \vec{p}_z$$

$$\hat{p} = \hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z$$

$$\hat{p} = \frac{h}{2\pi i}\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

في الغالب نستطيع معرفة المؤثّر الخاص بأية صفة فيزيائية وذلك من القانون الفيزيائي التقليدي الخاص بتلك الصفة. لنقل مثلاً أنّنا نريد معرفة المؤثّر الخاص بطاقة الحركة. نعرف من الفيزياء التقليدية أنّ طاقة الحركة تساوي:

$$E_{kinetic} = K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\nabla^2$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla^2 \qquad \textit{Laplacian Operator}$$

بالإضافة للمؤثّرات الرياضية الخاصة بالعزم وطاقة الحركة نذكر أيضاً المؤثّرين التاليين:

الصفة الفيزيائية	رمزها	المؤثر
الموقع (المكان)	x	x
طاقة الوضع	V	V

بإمكاننا الآن تحديد المؤثّر الخاص بالطاقة الكلّيّة للنظام والمتمثّلة بمجموع طاقتي الوضع والحركة. هذا المؤثّر هو المؤثّر الهاميلتوني:

$$E_{total} = E_{kinetic} + E_{potential} = K + V$$

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\nabla^2 + V \qquad ......(2.6)$$

بمقارنة المعادلتين (٢.٦) و(٢.٣) نستنبط أنّ:

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V(x,y,z,t) = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V(x,y,z,t)\right]\psi(x,y,z,t) = E\psi(x,y,z,t) = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t} \qquad .....(2.7)$$

من الواجب ذكره بالنسبة للمؤثّرات أنْ ليس كلّ الصفات الفيزيائيّة تنطبق عليها المعادلة (٢.٤). نميّز هنا بين حالتين:

أ. الصفة الفيزيائية تنطبق عليها المعادلة (٢.٤)، أي أنّ $\hat{F}\psi = F\psi$ حيث أنّ $\hat{F}$ هو المؤثر الخاص بالصفة الفيزيائية F. في هذه الحالة فإننا عندما نقوم بقياس القيمة الفيزيائية F، نحصل في كلّ مرّة على نفس القيم المحدَّدَة للصفة F، وحسب ما تحدده المعادلة (٢.٤) الطاقة والعزم من هذه الصفات.

ب. الصفة الفيزيائية لا تنطبق عليها المعادلة (٢.٤). في هذه الحالة فإنّنا عندما نحاول قياس F ، فإنّنا كلّ مرة نقوم فيها بالقياس نحصل على قيمة مختلفة بعض الشيء عن التي قبلها ممّا يعني أنّ هناك توزيعاً إحصائيّاً لقيم F، عندها نستطيع حساب متوسط حسابي أو ما يسمّى بالقيمة المتوقعة (*expectation value*) لقيم F على النحو التالي:

$$\overline{F} \equiv \langle F \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{F} \psi \, d\tau}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, d\tau} \qquad (٢.٨)$$

ψ^* هي الدالة القرينة (*conjugate function*) بالنسبة للدالآت المركبة (*complex functions*) والتي تحتوي على العدد التخيّلي i. ويتمّ تعويضها في المعادلة إذا كانت الدالة مركّبة، أمّا إذا كانت الدالة ψ حقيقية فإنّ الدالة القرينة ψ^* هي نفس الدالة ψ ، $\psi = \psi^*$.

[تكتب الأعداد المركبة على الصورة $a+bi$ حيث أنّ a و b هي أعداد حقيقية و i هي $\sqrt{-1}$. عند تربيع هذا العدد فإنّ i لا تختفي $(a+bi)(a+bi)=a^2+2abi-b^2$، أمّا إذا ضربنا $(a+bi)$ ب $(a-bi)$ فإنّنا نحصل على (a^2-b^2) ويختفي بذلك العدد التخيّلي i. يُسمّى $(a-bi)$ بالعدد القرين للمقدار $(a+bi)$. وبنفس الطريقة فإنّ الدالة (e^{-ix}) هي القرينة للدالة (e^{ix}) لأنّ حاصل ضربهما يؤدي إلى اختفاء i بخلاف ما إذا ضربت الدالة بنفسها.

هناك صفات عديدة هامّة فيما يخصّ المؤثّرات تشترطها ميكانيكا الكم لا مجال الآن لذكرها ولكن تجدر الإشارة إلى صفة التبادليّة في المؤثّرات لما يترتّب عليها من أهمّية. لنفرض أنّ المؤثر $\hat{F}$ هو المؤثر الخاص بالصفة الفيزيائية F، وأنّ المؤثر $\hat{O}$ هو المؤثر الخاص بالصفة الفيزيائية O؛ يكون المؤثّران تبادليّين إذا تحقّق الشرط التالي:

$$\hat{F}(\hat{O}\psi)=\hat{O}(\hat{F}\psi)$$

بمعنى أنّه لا فرق فيما إذا "شُغِّل" المؤثّر $\hat{O}$ أوّلاً على الدالة ψ ومن ثَمّ "شُغِّل" المؤثّر $\hat{F}$ على الناتج أو العكس (مثل ٣×٥=٥×٣). في مثل هذه الحالة يمكن قياس الصفتين الفيزيائيتين F و O في نفس الوقت بدقة. أمّا إذا لم يتحقّق شرط التبادليّة فلا يمكن قياس الصفتين في نفس الوقت بدقّة وإنّما تكون مَعْرِفة صفة على حساب معرفة الأخرى.

✓ شرط التعامد (*Orthogonality condition*)

عند تشغيل مؤثّر ما ($\hat{O}$) على دالّة ما (f) ويكون ناتج تلك العملية الرياضية هو نفس الدالة f مضروبة بعدد (λ)، فإنّ المعادلة التي تمثّل العمليّة أعلاه تسمّى معادلة القيمة المميّزة أو معادلة القيمة الذاتيّة (*eigenvalue equation*). تسمّى الدالة f الدالة المميزة (أو الذاتيّة) (*eigenfunction*) للمؤثّر $\hat{O}$، كما يسمّى العدد λ بالقيمة المميّزة (*eigenvalue*).

$$\hat{O}f=\lambda\cdot f$$

إنّ الهدف من حلّ معادلات القيمة المميزة هو معرفة أي الدالّات هي دالاّت مميزة للمؤثّر المستخدم، ومن ثَمّ معرفة القيمة المميزة لكل دالّة مميزة. وعندما نقوم بحلّ معادلات القيمة المميزة فإنّنا نحصل على ما لانهاية من الدالاّت التي تصلح لأنْ تكون دالاّت مميزة، وهنا نفرّق بين حالتين:

أ. أنْ يكون لكلّ دالة مميزة قيمة مميزة تختلف عن الأخرى.

ب. أنْ يكون لدالّات مميّزة مختلفة نفس القيمة المميّزة، وهنا نتكلّم عمّا يسمّى بحالة التفسّخ (*degeneracy*).

لتوضيح المفاهيم السابقة نتأمّل في معادلة شرودنجر. إنّ معادلة شرودنجر هي معادلة قيمة مميّزة كما هو واضح، حيث أنّ المؤثّر المستخدم هو مؤثّر الطاقة والقيمة المميّزة هي طاقة النظام. ولنكون أكثر تحديداً، نتأمّل في معادلة شرودنجر الخاصّة بذرّة الهيدروجين.

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

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

يرمز الحرف n الذي تمّت إضافته في المعادلة إلى أنّ هناك عدة دالّات (n من الدالّات) تصلح لأن تكون دالات مميّزة، وأنّ هناك قيمة مميّزة من الطاقة لكل دالّة مميّزة. ويوضّح الجدول التالي بعضاً من هذه الدالّات المميّزة وطاقتها لإلكترون ذرة الهيدروجين:

n	الدالّة المميزة	القيمة المميزة
1	ψ_{1s}	E_{1s}
2	ψ_{2s}	E_{2s}
3	ψ_{2p_x}	E_{2p}
4	ψ_{2p_y}	E_{2p}
5	ψ_{2p_z}	E_{2p}
6	ψ_{3s}	E_{3s}

نلاحظ في الجدول أعلاه أنّ هناك ثلاث دالات مميزة لها نفس القيمة المميزة وهي الدالات الخاصة بالفلك p. نقول إنّ الأفلاك p_x وp_y وp_z متفسّخة (*degenerate*).

في حال الدالاّت المميّزة غير المتفسخة (*non-degenerate*) ينطبق شرط التعامد: لتكن ψ_i دالة مميزة و ψ_j دالة مميزة أخرى لها قيمة مميزة مختلفة عن تلك التي للدالة ψ_i. ينصّ شرط التعامد على أنّ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j \psi_i \, d\tau = 0 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* \psi_i \, d\tau = 0$$

أمّا شرط العياريّة فيكون

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^2 \, d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_i \, d\tau = 1$$

تمرين (١): أيٌّ من الدالات التالية هي دالّة مميّزة للمؤثّر $\frac{d}{dx}$، وأيٌّ منها هو دالّة مميّزة للمؤثّر $\frac{d^2}{dx^2}$. احسب القيمة المميّزة إنْ أمكن.

أ. e^{ikx} ب. $\cos(kx)$ ج. k

د. kx هـ. e^{-ax^2}

تمرين (٢): هل تصلح الدالة e^{ikx} لأن تكون دالّة موجيّة؟ وضّح إجابتك!

تمرين (٣): أوجد في كلٍّ من الدالات التالية قيمة الثابت A بحيث تكون الدالة عياريّة.

(أ): $\psi = Ae^{-kx}$، $(0 \leq x < \infty)$

(ب): $\psi = A\sin(ax/L)$، $(0 \leq x \leq L)$

تمرين (٤): هل تصلح الدالة $\sin(ax/L)$ لأن تكون دالّة موجيّة؟ وضّح إجابتك!

تمرين (٥): هل الدالّتان $2e^{-2x}$ و $4e^{-8x}$ متعامدتان $(0 \leq x < \infty)$؟ وضّح إجابتك!

<u>تمرين (٦):</u>

(أ) عاير الدوال الموجية الآتية:

$$u_1(x) = A_1\, e^{-\alpha x^2}$$
$$u_2(x) = A_2\, x\, e^{-\alpha x^2}$$

خلال الفترة $-\infty \leq x \leq \infty$. هل هاتان الدالّتان متعامدتان خلال تلك الفترة.

(ب) هل هاتان الدالتان متعامدتان خلال الفترة $0 \leq x \leq \infty$.

(٤-٢) شدة احتمال التيار ومعادلة الاستمرار:

عودة إلى التفسير الاحتمالى، لأنه عند أى زمن ابتدائى $t = 0$، من المؤكد (بنسبة ١٠٠٪) أن يكون الجسيم فى أى مكان فى الفراغ، لذلك، لأى دالة موجية متعايرة تصف الجسيم، يجب أن يكون:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t=0)\, dx = 1 \qquad (1\text{-}2\text{-}61)$$

العلاقة السابقة تستلزم أن نقيد الدوال التى تستخدم فى ميكانيكا الكم أن تكون من النوع المكامل تربيعياً والتى لها:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(x,t)\right|^2 dx < \infty \qquad (1\text{-}2\text{-}62)$$

أى أن $\psi(x,t)$ يجب أن تتقارب إلى الصفر عندما $x \to \infty$. أيضاً يجب أن تكون هذه الدوال ومشتقاتها متصلة. ولكى نرى أهمية شرط الاتصال، سوف نثبت أنه إذا تحققت العلاقة (١-٢-٦١) لأى منزلة اختيارية ابتدائية فإنها تتحقق للدالة الموجية عند أى لحظة زمنية أخرى، وهو ما سنحاول الوصول إليه من خلال معادلة الاستمرار كالآتى:

المرافق المركب لمعادلة شرودنجر (١-٢-١٦) يعطى من:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x,t)}{\partial x^2} \qquad (1\text{-}2\text{-}63)$$

وحيث أننا نعلم أن احتمال وجود الجسيم عند أى موضع وأى لحظة زمنية هو $P(x,t)=\psi^*(x,t)\psi(x,t)$، بأخذ المشتقة التفاضلية الزمنية للاحتمال، والذى يعطى من:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (١-٢-٦٤)$$

بالتعويض من معادلة شرودنجر(١-٢-١٦) والمعادلة المرافقة لها (١-٢-٦٣) فى المعادلة (١-٢-٦٤) نحصل على:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)$$

$$=-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\right]$$

والذى يمكن وضعه فى الصورة:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\right]=0 \qquad (١-٢-٦٥)$$

وبتعريف شدة احتمال التيار$j(x,t)$:

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

يمكننا وضع العلاقة (١-٢-٦٥) فى الصورة:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)=0 \qquad (١-٢-٦٦)$$

والتى تمثل معادلة الاستمرار، والتى تماثل معادلة الاستمرار بين كثافتى الشحنة والتيار فى الإلكتروديناميكا. هنا $P(x, t)$ و $j(x, t)$ يمثلان الكثافة الاحتمالية وكثافة احتمال التيار على الترتيب.

الآن، بتكامل معادلة الاستمرار (٦٦-٢-١) بالنسبة إلى الموضع، نحصل على:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty}P(x,t)\,dx=-\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)\,dx=0 \qquad (١-٢-٦٧)$$

وذلك لأنه للدوال المكاملة تربيعياً $j(x.t)\to 0$ عندما $x=\pm\infty$. أى أن:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}P(x,t)\,dx=const. \qquad (١-٢-٦٨)$$

أى أن المقدار $\int_{-\infty}^{+\infty}P(x,t)\,dx$ لا يتغير مع الزمن، أى أنه إذا عايرنا الدالة الموجية عند لحظة زمنية ابتدائية، تظل الدالة الموجية متعايرة عند أى لحظة زمنية أخرى.

أيضاً معادلة الاستمرار (٦٦-٢-١) تمثل قانوناً لبقاء الكثافة الاحتمالية للجسيم، هذا القانون يصف الحقيقة التى تقول أن التغير فى كثافة احتمال الجسيم فى موضع ما من الفراغ يكافىء التغير فى السريان فى هذا الموضع:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b P(x,t)\,dx = -\int_a^b \frac{\partial}{\partial x} j(x,t)\,dx = j(a,t) - j(b,t) \qquad (١-٢-٦٩)$$

<u>تمرين</u> احسب شدة احتمال التيار $j(x)$ للدالة الموجية

$$\psi(x) = u(x)\,e^{i\phi(x)}$$

حيث الدالتين u و ϕ حقيقيتين.

الحـــل

نعلم أن شدة تيار الاحتمال تعطى بالعلاقة:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*(x)}{\partial x}\psi(x)\right) \qquad (١)$$

نأتي الآن لحساب الحدود المطلوبة. أولاً نجد أن مرافق الدالة الموجية يعطى من:

$$\psi^*(x) = u(x)\,e^{-i\phi(x)} \qquad (٢)$$

مشتقة الدالة الموجية بالنسبة للموضع تعطى من:

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} = e^{i\phi(x)}\left(\frac{\partial u(x)}{\partial x} + i\phi(x)u(x)\frac{\partial\phi(x)}{\partial x}\right) \qquad (٣)$$

لأما مشتقة الدالة المرافقة فتعطى من:

$$\frac{\partial\psi^*(x)}{\partial x} = e^{-i\phi(x)}\left(\frac{\partial u(x)}{\partial x} - i\phi(x)u(x)\frac{\partial\phi(x)}{\partial x}\right) \qquad (٤)$$

ومنها نجد أن:

$$\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} = u\,e^{-i\phi}\,e^{i\phi}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + i\phi u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = u\frac{\partial u}{\partial x} + i\phi u^2\frac{\partial\phi}{\partial x} \qquad (٥)$$

$$\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} = u e^{-i\phi} e^{i\phi}\left(\frac{\partial u}{\partial x} - i\dot{\phi} u \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) = u\frac{\partial u}{\partial x} - i\phi u^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \qquad (٦)$$

بطرح (٦) من (٥) والتعويض فى (١) نحصل على:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(2i\phi u^2 \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{m}\phi u^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \qquad (٧)$$

✓ علاقة عدم التأكيد(التحديد) لهايزنبرج (Heisenberg Uncertainty Principle)

هل بالإمكان أن نحدد في نفس الوقت مكان وسرعة أي جسم بدقّة كبيرة؟ للإجابة على هذا السؤال نحتاج –حسب قواعد ميكانيكا الكم– إلى معرفة فيما إذا كان المؤثر الخاص بالمكان والمؤثّر الخاص بالعزم (العزم=السرعة مضروبة بالكتلة) تبادليّين، كما قدّمنا عند الكلام على المؤثّرات (ص ٣٧). لنجرّب ذلك على أيّ جسم موصوف بالدالّة الموجية ψ:

$$\hat{p}_x = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{x} = x$$

$$\hat{x}(\hat{p}_x\psi) = \hat{x}\left(\frac{h}{2\pi i}\cdot\frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = x\frac{h}{2\pi i}\cdot\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x}\psi) = \hat{p}_x(x\psi) = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial(x\cdot\psi)}{\partial x} = \frac{h}{2\pi i}\left(\psi + x\frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = \frac{h}{2\pi i}\psi + x\frac{h}{2\pi i}\cdot\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x}\psi) \neq \hat{x}(\hat{p}_x\psi)$$

حيث أنّ المؤثّرين غير تبادليين فإنّه لا يمكننا في نفس الوقت أن نحدّد مكان الجسم وعزمه (وبالتالي سرعته) بدقّة كبيرة، فإذا أمكننا تحديد مكانه بدقّة كبيرة فإنّ ذلك يعني أنّنا لا نعرف سرعته بدقة، والعكس صحيح. رياضيّاً يُعبّر عن هذه العلاقة والتي تسمّى بمبدأ عدم التحديد لهايزنبرج بالمعادلة التالية:

$$\Delta q \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

حيث أنّ Δq هو مقدار الخطأ في تحديد الموقع و Δp هو مقدار الخطأ في تحديد العزم وبالتالي السرعة.

ولتوضيح علاقة عدم التحديد بين الطاقة والزمن نضرب المثال التالي: تطلق بعض النظائر المشعة جسيمات ألفا من أنويتها بحثاً عن الاستقرار. جسيمات ألفا هذه جسيمات ثقيلة نسبياً إذ إنّها تَعْدِل نواة ذرة الهيليوم (بروتونان ونيوترونان)، ولذلك يمكن تحديد طاقتها عند انطلاقها تاركةً نواة ذلك العنصر المشعّ بدقّة كبيرة، ممّا يعني أنّ ΔE صغيرة جدّاً. ينتج من علاقة عدم التحديد أنّ Δt كبيرة، وهذا يعني أنّه كلّما كانت معرفتنا بطاقة الجسيمات المنبعثة أدقّ كلّما كان جهلنا بالزمن الذي حصل فيه انبعاث جسيمات ألفا من النواة أكبر. بكلمات أخرى، نحن لا نستطيع أن نتنبأ بدقّة متى سيحصل انبعاث جسيمات ألفا.

من الواجب تذكّره عند هذه النقطة أنّ مبدأ عدم التحديد لا يقتصر على السرعة والموقع أو الطاقة والزمن بل يشمل أيّة صفتين فيزيائيتين لا يكون المؤثّران الخاصّان بهما تبادليّين. كما يجب التنبّه إلى أنّ عدم قدرتنا على تحديد هذه الصفات الفيزيائية بدقة لا علاقة له بالتقدّم التكنولوجي للبشرية، فعلاقة عدم التحديد هي علاقة مبدئية من أصول ميكانيكا الكم، ومهما عَلَتْ علومنا لن نستطيع أبداً أن نعرف على سبيل المثال سرعة وموقع إلكترون بدقة بالغة في نفس الوقت.

أخيراً نذكر في هذا المجال معادلةً تساعدنا في تقدير الخطأ المصاحب لقياس أيّة قيمة فيزيائية :

$$\Delta F = \sqrt{\overline{F^2} - \overline{F}^2}$$

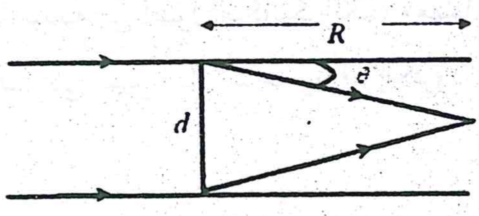
حيث أنّ $\overline{F^2}$ هو المتوسط الحسابي (معدّل) لمربّع القيمة الفيزيائية ، أمّا $\overline{F}^2$ فهو مربّع معدّل القيمة الفيزيائية، ويمكن حساب كلٍّ منهما بواسطة المعادلة (٢.٨).

مثال: كرات بلياردو كتلتها ١٠٠ جم وقطرها ١٠ سم تتحرك بسرعة $v \cong 1\,cm/s$ خلال مسافة $l = 1$ m.

(أ) بفرض أن عدم التأكيد النسبى لموضعها $\Delta x / l$ يساوى عدم التأكيد النسبى لكمية تحركها $\Delta p / m v$ وكان حاصل ضرب قيمتى عدم التأكيد السابقتين $\Delta x \cdot \Delta p$ له أقل قيمة مسموح بها. احسب Δx.

(ب) إذا كانت إحدى الكرات ثابتة وتشتت الكرات الأخرى بالاصطدام بها، بين أن علاقة عدم التجديد تعطى الصيغة المعروفة للحيود بواسطة شاشة دائرية $\sin\theta = \lambda / a$، حيث θ زاوية التشتت، $a = \Delta x$.

الحـــــل



(أ): من علاقة عدم التحديد $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{2}\hbar$، ومن شرط المسألة $\Delta p = \Delta x(p/l)$، بربط العلاقتين نحصل على:

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar l}{2p} \qquad (١)$$

ثم نجد أن:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar l}{2p}} = \sqrt{\frac{\hbar l}{2mv}} \approx 2\times10^{-15}\ \text{cm} \qquad (٢)$$

القيمة السابقة أصغر من قطر البروتون. وهذه القيمة غير المنطقية ناتجة من اختلاف بيئة كرات البلياردو (المنضدة).

(ب): لنفرض أن للكرة المنحرفة أو المشتتة أن $\Delta x = d$. ولأن $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$، نجد أن:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{\hbar}{p\Delta x} = \frac{\hbar}{pd} = \frac{\lambda}{d} \qquad (٣)$$

حيث λ طول دى بروجليه الموجى للكرة. وحيث أن $\frac{\Delta p}{p} = \sin\theta$، حيث كما نعلم أن θ زاوية التشتت للكرة، ينتج أن:

$$d\sin\theta = \lambda \qquad (٤)$$

وهى علاقة الحيود المطلوبة.

يبرز هنا سؤال، على أى بعد يمكن وضع شاشة الحيود لكى نرى أن القيمة العظمى للشدة عند مركز الظل الهندسى (وهو ما يطلق عليه موضع (موضع بواسون - بقعة أو نقطة الضوء الناتج من اصطدام الكرات المنحرفة بالشاشة)؟ يمكن استنتاج ذلك من شكل (١)، ومن الواضح أن:

$$R = \frac{d/2}{\sin\theta} \approx \frac{d^2}{\lambda} \qquad (٥)$$

وحيث أن $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \approx 6\times10^{-21}$ cm ، هذا يعطى:

$$R \approx 10^{23} \qquad (٦)$$

وهى قيمة أكبر من الحجم الفعلى للكون.

تمرين(١): استخدم نتائج التمرين السابق لحساب:

(أ): طاقة الإلكترون اتى نحتاجها فى ميكروسكوب الكترونى لتحليل فاصل بين طبقات كريستال مقداره يساوى $0.27\ nm$.

(ب): عند تشتت بروتون ذو طاقة $2\ eV$ من كريستال، لوحظت خامس قيمة عظمى لشدة المجال عند زاوية تشتت مقدارها ٣٠ درجة، احسب قيمة الفاصل المستوى بين طبقات للكريستالة.

تمرين (٢): عند تحديد سرعة رصاصة كتلتها ١ غم انطلقت من مسدس كان الخطأ التجريبي في قيمة السرعة المحدّدة ٢ $\mu m/s$. احسب مقدار الخطأ في تحديد موقع الرصاصة.

تمرين (٣): حدّد مقدار الخطأ في سرعة إلكترون نعرف أنه يتواجد ضمن فترة (*interval*) عرضها ٥٠ *pm*.

تمرين (٤): قدر مقدار عدم التأكيد فى الموضع للحالات الآتية:

(أ): نيوترون يتحرك بسرعة $5\times10^{6}\ m/s$

(ب): شخص وزنه ٥٠ كجم يتحرك بسرعة ٢ متر/ث

تمرين (٥): استخدم علاقة عدم التحديد لحساب:

(أ): نصف قطر منزلة الطاقة الأرضية لذرة الهيدروجين

(ب): طاقة المنزلة الرضية لذرة الهيدروجين

✓ **علاقة عدم التحديد والقيم المتوسطة للكميات الفيزيائية:**

كما سبق، القيمة المطلقة للدالة الموجية تعطى التوزيع لتواجد الاحتمالى للجسيم عند الموضع x أو تواجده بكمية تحرك $p=\hbar k$، هذه القيمة المطلقة ترسم منحنياً على هيئة جرس مركز عند x_0 أو p_0 طبقاً لفراغ الدالة، انظر شكل (٨)، اتساع المنحنى يمثل عدم التحديد فى موضع الجسيم أو كمية حركته Δx أو Δp على الترتيب، العلاقة بينهما تحقق علاقة هيزينبيرج لعدم التحديد (٨٦-٢-١)، والتى تعنى أنه لا يمكن وفى آن وحد تعيين كل من كمية تحرك الجسيم وموضعه بنفس الدقة. لنفرض أننا قمنا بتجربة تمكنا بها تعيين كمية تحرك جسيم ما بدقة كاملة، بالتالى يكون عدم التحديد فى كمية التحرك تساوى صفر($\Delta p=0$). الآن ما هى أقل قيمة لعدم تحديد الموضع؟!، باستخدام علاقة عدم التحديد (٨٦-٢-١)، نجد أن:

$$\Delta x=\frac{\hbar}{\Delta p}=\frac{\hbar}{0}=\infty \qquad (٩٣-٢-١)$$

أى أن عدم التحديد فى الموضع تصل إلى كمية غير محدودة أو مالانهاية، أى أن الموضع غير محدد تماماً. أى أن هناك عدم تكافؤ فى قياس كل من كمية التحرك والموضع. إذا أمكننا قياس أحدهما بعدم تأكيد مساوياً للصفر(بدقة كاملة)، يصبح الآخر غير محدد تماماً، أى أن أى قيمة مقاسه تصبح لها نفس الاحتمال.

وبالتالى من المستحيل معرفة كمية التحرك والموضع معاً لأى جسيم كمى، مما يعنى أنه من المستحيل توقع المسار المضبوط للجسيم الكمى، لأن التوقع يحتاج إلى معرفة مضبوطة للقيم الابتدائية لكل من كمية التحرك والموضع.

من هذا نخلص إلى أن المسارات الكلاسيكية التى فرضها بوهر فى نموذجه، وهى مسارات محددة يتحرك فيها الالكترون، أى أن مكان الالكترون محدد تماماً، هذه المسارات لا تقدم وصفاً جيداً لحال الالكترون داخل الذرة. فى الواقع لا يمكن القول أن الالكترون يبعد مسافة ما محددة من النواة عندما يكون فى منزلة ما من منازل الطاقة. بدلاً من ذلك يمكن التحدث عن القيمة المتوقعة أو المتوسطة لموضعه أو كمية تحركه.

تعرف القيمة المتوقعة أو المتوسطة لدالة ما f مرتبطة بالنظام المدروس بالصيغة التالية:

$$\langle f \rangle = \int \psi^*(x)\, f\, \psi(x)\, dx \qquad (١-٢-٩٤)$$

حيث $\psi(x)$ دالة موجية متعايرة تصف النظام و $\psi^*(x)$ مرافقها المركب. فى حالة ما إذا كانت الدالة f تمثل موضع نظام مدروس حركته فى اتجاه محور x فى هذه الحالة، قياس موضع الجسيم ينتج عنه القيمة المتوقعة:

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{x}\, \psi(x)\, dx$$
$$= \int x |\psi(x)|^2\, dx \qquad (١-٢-٩٥)$$

وفى حالة تمثيل الدالة f لمركبة كمية تحرك النظام فى اتجاه محور x نجد أن:

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{p}\, \psi(x)\, dx \qquad (١-٢-٩٦)$$

مثال:

تعطى الدالة الموجية لجسيم ما من:

$$u(x) = A\exp\left[i\left(\beta x - \frac{\beta^2 \hbar t}{2m}\right)\right]$$

هل تمثل الدالة دالة ذاتية للمؤثر $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$، احسب القيمة المتوسطة لكمية الحركه.

الحـــــل

باستخدام صيغة القيمة المتوسطة للكميات الفيزيائية، نجد أن:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u^*(-i\hbar\frac{\partial u}{\partial x})\,dx \qquad (١)$$

الآن:

$$-i\hbar\frac{\partial u}{\partial x} = -Ai\hbar \cdot i\alpha \cdot \exp\left[i\left(\alpha x - \frac{\alpha^2\hbar t}{2m}\right)\right] \quad = \alpha\hbar u \qquad (٢)$$

وبذلك نجد أن:

$$\langle p \rangle = \alpha\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} u^* u\, dx = \alpha\hbar \qquad (٣)$$

تمرين (١):

يتكون غاز ما من جسيمات دقيقة كتلتها $m = 10^{-23}$ g مقيد فى صندوق حجمه يساوى $1\ cm^3$. طبقاً نظرية كمية التحرك للغازات تعطى السرعة المتوسطة لجزيئات الغاز تعطى من:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2} kT$$

حيث $k = 1.38 \times 10^{-16}$ ثابت بولتزمان. قدر درجة الحرارة التى عندها يمكن توقع مشاهدة انحراف عن السلوك المتوقع طبقاً لنظرية كمية التحرك.

الباب الثالث

تطبيقات على معادلة شرودنجر

✓ حركة جسيم حر فى صندوق أحادى البعد:

لنفهم كيف تعمل صيغة شرودنجر، سوف نعتبر هنا مثالاً بسيطاً للتكميم طبقاً لصيغة شرودنجر الكمية.

أى جسيم كمى حر يحقق معادلة شرودنجر:

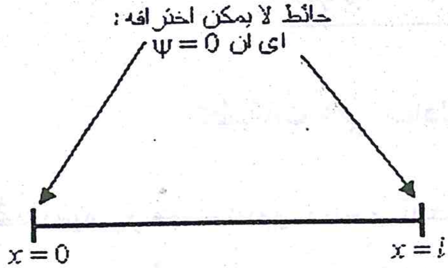
$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad (١-٢-٢٨)$$

دعنا الآن نبحث عن الحل فى الصورة:

$$\psi(x,t)=\phi(x)e^{-iEt/h} \qquad (١-٢-٢٩)$$

بالتعويض فى معادلة شرودنجر (٢٨-٢-١) نحصل على الجزء من المعادلة المستقل عن الزمن، أى دالة فى الموضع فقط:

$$\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial t^2}+k^2\phi(x)=0 \qquad (١-٢-٣٠)$$



شكل(١)

حيث وضعنا

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (١-٢-٣١)$$

الآن دعنا نعتبر هذا الحل لجسيم داخل صندوق أحادى البعد لا يمكن اختراق حوائطه، طول ضلع الصندوق l، شكل (٣). الجسيم يتذبذب داخل الصندوق، مما يستلزم بعض الشروط الحدية وهى أن الدالة الموجية عند الحوائط تتلاشى وهو ما يمكن التعبير عنه رياضياً بالشروط:

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(l) = 0 \qquad (١-٢-٣٢)$$

وحيث أن الجسم يعكس اتجاه حركته عند الحوائط، فإن الحل يجب أن يكون محتوياً على موجة تذهب فى كلا الاتجاهين، ويكون الحل العام فى الصورة:

$$\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \qquad (١-٢-٣٣)$$

حيث A و B ثوابت، و تعطى k كما ذكرنا من المعادلة (١-٢-٣١) بالقيمة:

$$k = \sqrt{3mE/\hbar^2} \qquad (١-٢-٣٤)$$

باستخدام الشرط الحدى الأول $\phi(0) = 0$ وبالتعويض فى (٣٣-٢-١) نحصل على $A = -B$ وبذلك يأخذ الحل الصورة:

$$\phi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2i\,A \sin kx$$
$$= C \sin kx \qquad (١-٢-٣٥)$$

حيث $C = 2iA$. باستخدام الشرط الحدى الثانى نحصل على:

$$\sin k\,l = 0 \qquad (١-٢-٣٦)$$

وهذا لا يتحقق إلا إذا كان

$$kl = n\pi, \quad n = 1,2,3,... \qquad (١-٢-٣٧)$$

مما يعنى أن k أصبحت قيمة كمية، وعلى هذا سوف نستبدلها بـالرمز k_n حيث

$$k_n = \frac{n\pi}{l} \qquad (١-٢-٣٨)$$

وكذلك أصبحت الطاقة أيضاً قيمة كمية طبقاً لتكميم k أى أن:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}, \quad n = 1,2,3,...... \qquad (١-٢-٣٩)$$

ونلاحظ أن تكميم الطاقة جاء نتيجة لشرط تقييد الجسيم، أى تطبيق الشروط التى تقيد حركته وهى الشروط الحدية على معادلة شرودنجر. يتبع

ذلك تكميم الدالة الموجية التى تصف حركة الجسيم عند قيم معينة من الطاقة وتصبح فى الصورة:

$$\phi_n(x) = C \sin\frac{n\pi x}{l} \qquad (١-٢-٤٠)$$

وللحصول على الثابت C نقوم بتطبيق شرط المعايرة (٢٧-٢-١):

$$\int_0^l |\phi_n(x)|^2 dx = 1$$

إذن نجد أن

$$\int_0^l |\phi_n(x)|^2 dx = |C|^2 \int_0^l \sin^2\frac{n\pi x}{l}\, dx$$

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

$$= \frac{|C|^2}{2}\left[x + \left(\sin\frac{2n\pi x}{l}\right)\frac{l}{2n\pi}\right]_0^l = \frac{l}{2}|C|^2 = 1$$

مما يستلزم أن يكون

$$|C|^2 = \frac{2}{l} \;\Rightarrow\; C = \sqrt{\frac{2}{l}} \qquad (١-٢-٤١)$$

وبذلك تصبح الدالة الموجية المتعايرة لجسيم داخل الصندوق فى الصورة:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\, \sin\frac{n\pi x}{l} \qquad (١-٢-٤٢)$$

ويكون الحل الكامل، أى الدالة الموجية، الذى يصف حالة الجسيم داخل الصندوق عند أى لحظة زمنية وعند أى موضع يعطى من:

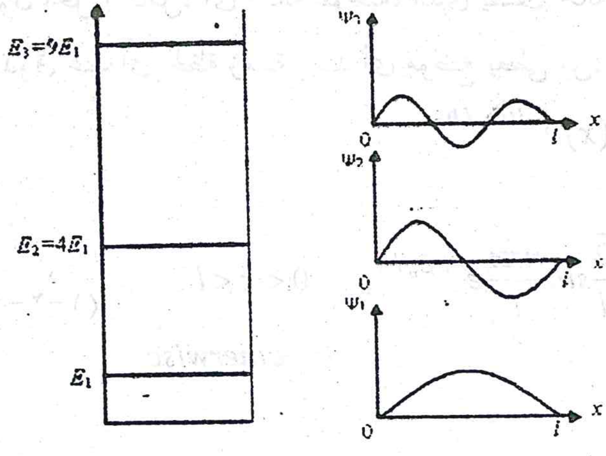
$$\psi_n(x,t) = \phi_n(x)\, e^{-itE_n/\hbar}$$

$$= \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{l}}\sin\dfrac{n\pi x}{l}\, e^{-itE_n/\hbar}, & 0 < x < l \\ 0, & otherwise \end{cases} \qquad (١-٢-٤٣)$$

من ذلك تكون كثافة الاحتمال لتواجد الجسيم فى الموضع x، عندما توصف حركته بالدالة الموجية $\psi_n(x,t)$، ليست دالة فى الزمن أى أن:

$$P_n(x,t) = |\psi_n(x,t)|^2 = \frac{2}{l}\sin^2\frac{n\pi x}{l} \qquad (١-٢-٤٤)$$

يبين شكل (٤) الدوال الموجية لأقل ثلاث حالات طاقة يشغلها الجسيم، لاحظ أن الحالة الأرضية (الابتدائية) للجسيم تحتوى على أقل عدد من العقد فى الدالة الموجية، وهى المواضع التى تتلاشى عندها الدالة الموجية، أم الحالات المثارة فتتميز بعدد أكبر من العقد فى الدالة الموجية.



شكل(٢)

مثال: يتكون غاز ما من جسيمات دقيقة كتلتها $m = 10^{-23}$ g مقيد فى صندوق حجمه يساوى $1\ cm^3$. طبقاً نظرية كمية التحرك للغازات تعطى السرعة المتوسطة لجزيئات الغاز تعطى من:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}kT$$

حيث $k = 1.38 \times 10^{-16}$ ثابت بولتزمان. قدر درجة الحرارة التى عندها يمكن توقع مشاهدة انحراف عن السلوك المتوقع طبقاً لنظرية كمية التحرك.

الحــل

التناقض مع نظرية طاقة الحركة للغازات يمكن توقعه بطريقة مؤكدة إذا قرب متوسط طاقة الحركة $\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}kT$ أقل طاقة لجسيم فى صــندوق والــتى تعطى كما سبق من:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8a^2 m} \qquad (١)$$

وحيث أن $a = \frac{1}{2}$ لصندوق مكعب نضع:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} = \frac{3}{2} kT \qquad (٢)$$

أو

$$T = \frac{\pi^2 \hbar^2}{3mk} = \frac{\pi^2 (6.626)^2 \cdot 10^{-54}}{2} = 2.65 \cdot 10^{-15} \quad ^\circ K \qquad (٣)$$

قيمة درجة الحرارة المطلقة، المعادلة (٣)، منخفضة جداً لدرجة أن التأثيرات الكمية يمكن إهمالها تماماً حتى عند أقل درجات حرارة التى يمكن وصولها هذه الأيام ($\approx 10^{-3}\ ^\circ K$). هذا لا يعنى أن التأثيرات الكمية لا يمكن ملاحظتها عند درجات الحرارة المنخفضة للغازات أو السوائل. فى هذا المثال تم فرض أن تجمع من الجسيمات حيث أن كل جسيم يشغل الحجم الكلى للصندوق المتاح. إن جزيئات الغاز الحقيقية، تشغل حجماً لدرجة أنه فقط حجم صغير بين الجزيئات يظل عند درجات الحرارة المنخفضة جداً. فى هذه الحالة يمكن بسهولة ملاحظة التأثيرات الكمية فى سائل من الهيليوم عند درجة حرارة من الدرجة $1\ ^\circ K$.

تمرين: إذا كانت u_n, u_m الدوال الموجية المناظرتان لمنزلتى طاقة لجسيم مقيد فى صنوق احادى البعد فاثبت أن

✓ حركة الجسيمات الحرة فى الفراغ:

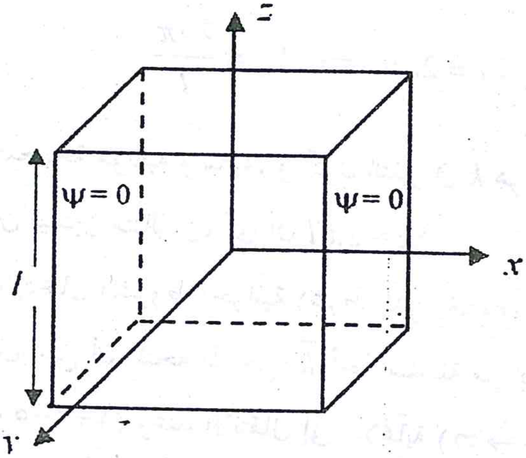
فى بعض الأحيان يتباعد تكامل المقدار $|\psi|^2$ بالنسبة لكل الاحداثيات الممكنة، أى أن $\int|\psi|^2 d\tau = \infty$ فمثلاً إذا اعتبرنا الدالة $\psi(x) = Ae^{ikx}$ متحركة فى حيز غير محدود فإن المقدار $\int\psi^*(x)\psi(x)\,dx = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty$، أى كمية غير محددة، فى هذا الموقف ندرس الحالة فى حيز محدود ثم يتم إرجاعها إلى وضعها الأصلى، وقد جرت العادة على أن يكون الحيز المحدود عبارة عن مكعب طول ضلعه l وفى هذه الحالة لابد وأن يكون هناك شروط معينة وهى الشروط الحوافية على هذا الحيز المحدود وأهم هذه الشروط هو شرط دورية الدالة الموجية (وهو يكافىء تلاشى الدالة الموجية للجسيم عند حوائط المكعب)، وشرط دورية الدالة الموجية Ψ يعنى أن لها نفس القيم عند كل وجهين متقابلين وهو ما يمكن أن نعبر عنه رياضياً كالآتى:

$$\psi(x,y,z) = \psi(x+l,y,z)$$

$$= \psi(x,y+l,z) = \psi(x,y,z+l) \qquad (٥-٢-١)$$

نأتى الآن لدراسة الدالة، حيث يكون الحيز المحدود هو مكعب طول ضلعه l يقع مركزة عند نقطة أصل الاحداثيات، شكل (٥).

بتطبيق شرط المعايرة (٢٧-٢-١) على الدالــة $\psi(x) = Ae^{ikx}$ داخــل المكعب نجد أن:



شكل(٣)

$$\int_{-l/2}^{+l/2} \psi^*(x)\psi(x)\,dx = |A|^2 \int_{-l/2}^{+l/2} dx$$

$$= |A|^2 l = 1 \qquad (١-٢-٤٦)$$

ومنها يكون $A = \frac{1}{\sqrt{l}}$ وتصبح الدالة الموجية فى الصورة:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{l}}\, e^{ikx} \qquad (١-٢-٤٧)$$

وبتطبيق شرط الدورية (١-٢-٤٥) على الدالة (١-٢-٤٧) نجد أن:

$$\psi(x) = \psi(x + l) \qquad (١-٢-٤٨)$$

أى أن:

$$e^{ikx} = e^{ik(x+l)} \Rightarrow e^{ikl} = 1 \qquad (١-٢-٤٩)$$

وهذا يؤدى إلى أن:

$$kl = 2n\pi \Rightarrow k_n = \frac{2n\pi}{l} \qquad (١-٢-٥٠)$$

حيث n أعداد صحيحة موجبة وسالبة. ويكون التغير فى k هو Δk حيث Δk هومقدارالفرق بين قيمتين متتاليتين، أى أن $\Delta k = 2\pi/l$

ونلاحظ أيضاً أن إدخال الشروط الحوافية (شرط الدورية، وهو يكافىء شرط تقييد الجسيم) أدى على أن المتجه الموجى $\bar{k}$ أخذ سلسلة من القيم المتفرقـة المحددة بالعلاقة (١-٢-٥٠) وعند الانتقال إلى اللانهاية ($l \to \infty$) فإن الفرق Δk بين كل قيمتين متتاليتين للمتجه $\bar{k}$ يؤول إلى الصفر وتعود مرة أخـرى إلى حركة الجسيمات الحرة فى حجم غير محدود من الفراغ.

فى حالة الأبعاد الثلاث تأخذ ψ الصورة:

$$\psi(r) = \frac{1}{l^{3/2}} e^{ikr} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \qquad (١-٢-٥١)$$

حيث V هو حجم المكعب.

كل الدوال المناظرة لكل القيم الممكنة للمتجه $\bar{k}$ (١-٢-٥٠) تكون فيما بينها مجموعة من الدوال المتعامدة (أى متعايرة عمودياً) بمعنى أنها تحقق الشرط:

$$\int_V \psi_k^*(r)\psi(r)_{k'}\, d\tau = \delta_{kk'} = \delta_{nn'} \qquad (١-٢-٥٢)$$

وهو ما يعرف بشرط المعايرة العمودى، حيث:

$$d\tau = dx\, dy\, dx, \quad \delta_{kk'} = \delta_{k_1k_1'}\ \delta_{k_2k_2'}\ \delta_{k_3k_3'} \qquad (١-٢-٥٣)$$

$$\delta_{kk'} = \begin{cases} 1, & k = k' \\ 0, & k \neq k' \end{cases} \qquad (١-٢-٥٤)$$

أو بدلالة قيم العدد الكمى n المرتبط بالعدد الموجى k بالعلاقة (١-٢-٥٠) تأخذ (١-٢-٥٤) الصورة:

$$\delta_{nn'} = \begin{cases} 1, & n = n' \\ 0, & n \neq n' \end{cases} \qquad (١-٢-٥٥)$$

حيث $\delta_{kk'}$ ($\delta_{nn'}$) هى دالة (كونيكر ــ دلتا).

والحالة $k \neq k'$ ($n \neq n'$) تعنى احتمال وجود الجسيم فى منزلتين مختلفتين وهذ يعنى عدم وجود جسيم له قيم مختلفة للأعداد k (n) على أن يكونا فى منزلة واحدة.

ولإثبات العلاقة (١-٢-٥٤) أو (١-٢-٥٥) نجد أنه من الدالة الموجية (١-٢-٥١):

$$\int \psi_k^* \psi_{k'}\, dx = \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{+l/2} e^{-ikx}\, e^{ik'x}\, dx$$

$$= \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{+l/2} e^{i(k'-k)x}\, dx \qquad (١-٢-٥٦)$$

فى الحالة التى يكون فيها $k = k'$ ($n = n'$) نجد أن $k - k' = 0$ وبالتالى فإن:

$$\int \psi_k^* \psi_{k'}\, dx = 1 \qquad (١-٢-٥٧)$$

أما إذا كانت $k \neq k'$ ($n \neq n'$) فإن:

$$\int \psi_k^* \psi_{k'}\, dx = \frac{1}{l} \frac{2i \sin \frac{l}{2}(k'-k)}{i(k'-k)}$$

$$= \frac{\sin \frac{l}{2}(k'-k)}{\frac{l}{2}(k'-k)} \qquad (١-٢-٥٨)$$

والمعادلة الأخيرة (١-٢-٥٧) حالة عامة، فإنه بالتعويض عن قيمة كل من $k' = k_{n'} = \frac{2n'\pi}{l}$ ، $k = k_n = \frac{2n\pi}{l}$ نجد أن:

$$\int \psi_k^* \psi_{k'}\, dx = \frac{\sin \pi(n'-n)}{\pi(n'-n)} = 0 \qquad (١-٢-٥٩)$$

فى الحالة التى يكون فيها $n \neq n'$ أما إذا كان $n = n'$ فإننا نضع المقدار فى الصورة $\frac{\sin x}{x}$ حيث $x = \frac{l}{2}(k'-k) = \pi(n'-n)$، فى هـذه الحالـة تكون قيمة $x = 0$، وبذلك يكون:

$$\lim_{x\to 0} \frac{\sin x}{x} = 1 \qquad (١-٢-٦٠)$$

وإذا أخذنا فى الاعتبار نتيجتى التكامل فى الحالتين $k \neq k'$ ($n \neq n'$) و $k = k'$ ($n = n'$) الممثلتين بالمعادلتين (٥٩-٢-١) و(٦٠-٢-١) علـى الترتيب وصورة دالة (كرونيكر– دلتا) الممثلـة بـالعلاقتين (٥٤-٢-١) و (٥٥-٢-١) نجد أنهما نفس القيمة لنفس الدالة، أى يمكن وضـع التكامـل $\int \psi_k^* \psi_{k'} dx$ فى الصورة الممثلة بالمعادلة (٥٢-٢-١) وهو ما يثبت العلاقة.

معادلة شرودنجر فى الصورة العامة وتطبيقاتها

لقد تناولنا فى الباب السابق معادلة شرودنجر فى بعد واحد وكيفية تطبيقها على الأجسام الحرة، وهذا كافى لإلمامنا بكيفية تناول الميكانيكا الكمية للمسائل والمشكلات، أما فى حالة المسائل ذات الطبيعة الفيزيائية والتى تنشأ من تأثير المجالات على الأجسام، يجب فى هذه الحالة أن تكون معادلة شرودنجر أكثر عمومية، فكيف يتم هذا التعميم؟؟؟. يسّهل تعميم معادلة شرودنجر عندما نفسر معادلة شرودنجر للجسيم الحر بفكرة المؤثرات الرياضية. ما هو المؤثر وكيف يعمل؟. المؤثرات تغير الدوال عند تأثيرها عليها. فى الميكانيكا الكمية، الكميات الطبيعية مثل الوضع x وكمية التحرك p تمثل بمؤثرات لأنهما يغيران الدالة الموجية التى يؤثران عليها.

فيما يلى سوف نوجد صورة كل من مؤثر كمية التحرك فى فراغ الإحداثيات ومؤثر الموضع فى فراغ كمية التحرك.

✓ **مؤثرا الموضع وكمية التحرك:**

لإيجاد صورة مؤثر كمية التحرك فى فراغ الإحداثيات دعنا نبدأ من المعادلة الكلاسيكية:

$$p = mv = m\frac{dx}{dt} \qquad (١-٣-١)$$

وتكون القيمة الذاتية لكمية p فى فراغ الإحداثيات تعطى بالصورة:

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

$$= m\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^*(x,t)\,x\,\psi(x,t)$$

$$= m\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left(\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}x\,\psi(x,t)+\psi^*(x,t)\,x\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\right)$$

لاحظ أن كل التغير فى x يتحدد بالتغير فى ψ، حيث أنه لا يوجد $\frac{\partial x}{\partial t}$ فى الحد السابق. وهذا يبين كيف تعمل الميكانيكا الكمية. والآن باستخدام معادلة شرودنجر

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

ومرافقها المركب لنعوض عن $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ و $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$. نحصل على:

$$\langle p\rangle = \frac{-i\hbar}{2}\int_{-x}^{+x} dx\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}x\,\psi+\psi^*\,x\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)$$

وحيث أننا نتعامل مع دوال مكاملة تربيعياً، فإن تكامل كل المشتقات يتلاشى، ولذلك لإنجاز التكامل السابق نحاول وضعه على قدر استطاعتنا فى صورة مشتقات، كالآتى:

$$\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right]-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right]-\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi)+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi^*x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

وعلى ذلك فإن التكامل السابق يعطى كالآتى:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\,\psi-\psi^*x\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\psi\right]+2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

وكما ذكرنا سابقاً أن تكامل المشتقات يتلاشى، يتبقى لدينا الحد:

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) \qquad (١-٣-٢)$$

والى يعطى صورة مؤثر كمية التحرك فى فراغ الإحداثيات، حيث أنه من مقارنة المعادلة الأخيرة بالمعادلة (٩٦-٢-١)

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

نجد أن مؤثر كمية التحرك يمثل بمؤثر التفاضل:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad (١-٣-٢)$$

حيث القبعة فوق p وضعت لتميز المؤثر عن الصورة الرياضية لكمية التحرك. وبنفس الإجراء يمكن الحصول على صورة مؤثر الإحداثيات فى فراغ كمية التحرك الذى يأخذ نفس الصورة التفاضلية بالصيغة:

$$\hat{x} = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \qquad (١-٣-٣)$$

مما سبق، نجد أنه عامة فإن المؤثر يؤثر على أى دالة ويغيرها إلى دالة أخرى إذا لم تكن هذه الدالة تمثل بمتغيرات فى فراغه الذاتى. فى الميكانيكا الكمية الخواص المصاحبة لجسيم ما والتى يتم قياسها تدعى *obsevables* والتى تمثل بالمؤثرات. وهناك بعض الخواص للمؤثرات نجملها فيما يلى:

أولاً: المؤثرات فى الميكانيكا الكمية بدون استثناء خطية، أى أنه إذا كان لدينا مؤثراً $\hat{L}$ فإن:

$$\hat{L}(\psi_1(x) + \psi_2(x)) = \hat{L}\psi_1(x) + \hat{L}\psi_2(x) \qquad (١-٣-٤)$$

أيضاً

$$\hat{L}c\psi(x) = c\hat{L}\psi(x) \qquad (١-٣-٥)$$

حيث c عدد مركب اختيارى. ومن السهل إثبات أن المؤثران $\hat{x}$ و $\hat{p}$ يحققان هاتين الخاصيتين للخطية.

ثانياً: المؤثرات ليس بالضرورة أن تكون تبادلية مع بعضها البعض وذلك عكس الأعداد المركبة التي تخضع للخواص الجبرية التبادلية. وبشكل خاص فإن المؤثران $\hat{x}$ و $\hat{p}$ غير تبادليان. فإذا عرفنا العلاقة التبادلية بينهما $\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}$ بالقوس التبادلي $[\hat{x},\hat{p}]$ نجد أنه بالتأثير على أى دالة اختيارية $\psi(x.t)$ نحصل على:

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi(x,t) = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\psi(x,t)$$

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

وحيث أن $\psi(x,t)$ دالة اختيارية فإننا نحصل على:

$$[x,p] = i\hbar \qquad (٦-٣-١)$$

أى أن $\bar{x}$ و $\bar{p}$ ليسا تبادليان، حيث أنهما يحققان العلاقة (٦-٣-١)، وهذا يعنى أنه يجب أن نكون حذرين عند التعامل معهما بخصوص ترتيب المؤثرات عند إجراء عملية الضرب فى الميكانيكا الكمية.

إذا عممنا القوس التبادلى (٦-٣-١) لأى مؤثرين غير تبادليين نحصل العلاقات الآتية، لأى ثلاث مؤثرات A و B غير تبادلية:

$$[A,B] = -[B,A] \qquad (٦أ-٣-١)$$

$$[A,BC] = [B,A]C + B[A,C] \qquad (٦ب-٣-١)$$

$$[AB,C]=[A,C]B+A[B,C]$$ (٦ج-٣-١)

$$[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]\equiv 0$$ (٦د-٣-١)

$$[\hat{A},\ \hat{B}^n]=\sum_{j=0}^{n-1}\hat{B}^j[\hat{A},\ \hat{B}]\hat{A}^{n-j-1}$$

$$[\hat{A}^n,\ \hat{B}]=\sum_{j=0}^{n-1}\hat{A}^{n-j-1}[\hat{A},\ \hat{B}]\hat{B}^j$$

$$[A,B]=D$$ (٦هـ-٣-١)

والعلاقة الأخيرة تعنى أن القوس التبادلى لأى مؤثرين غير تبادليين هو مؤثر آخر.

ثالثاً: القيم المتوقعة للمؤثرات الممثلة لكميات فيزيائية يجب أن تكون حقيقية، فمثلاً مؤثر كمية الحركة يحتوى على i فى حين أن قيمته المتوقعة حقيقية: باستخدام تعريف القيمة المتوقعة لمؤثر كمية التحرك:

$$\langle \bar{p}\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi^*}{dx}$$

المرافق المركب للمعادلة السابقة

$$\langle \bar{p}\rangle^*=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\psi(x)(-\frac{\hbar}{i})\frac{d\psi}{dx}$$

وبالطرح للمعادلتين السابقتين

$$\langle \bar{p} \rangle - \langle \bar{p} \rangle^* = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \quad \frac{d}{dx}(\psi^* \psi)$$

وحيث أن تكامل الدوال المكاملة تربيعياً يكون صفراً نجد من المعادلة الأخيرة أن $\langle \bar{p} \rangle - \langle \bar{p} \rangle^* = 0$ ومنها $\langle \bar{p} \rangle = \langle \bar{p} \rangle^*$ أى أن $\langle \bar{p} \rangle$ قيمة حقيقية. أيضاً يمكننا إثبات ذلك أيضا للدوال التى ليس لها صفة التكامل التربيعى، فى هذة الحالة نتقيد بالدوال التى تحقق شروط حدية دورية فى منطقة ولتكن $0 \le x \le L$ أى أن

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

وبهذه المعالجة نجد أن

$$\langle \bar{p} \rangle - \langle \bar{p} \rangle^* = \frac{\hbar}{i} \int_{0}^{L} dx \quad \frac{d}{dx}(\psi^* \psi),$$

$$= \frac{\hbar}{i}(|\psi(L)|^2 - |\psi(0)|^2) = 0$$

والتى تعطى نفس النتيجة السابقة.

مثال:

احسب علاقات التبديل الممثلة بالأقواس التباديلية الآتية:

(a) $[x,\ d/dx]$ (b) $[x^2,\ d/dx]$

الحـــــل

كما نعلم أنه فى فراغ الموضع تتمثل الدالة الموجية بالصورة:

$$\psi(x) = C\, e^{ikx} = C\, e^{ipx/\hbar} \qquad (١)$$

حيث x هو المتغير فى هذه الحالة.

وبالتالى، بالتأثير بالأقواس السابقة على الدالة الموجية فى فراغ الموضع، نجـــد أن:

$$[x,\ d/dx]\psi(x) = x\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d}{dx}[x\psi(x)]$$

$$= x\frac{d\psi(x)}{dx} - x\frac{d}{dx}\psi(x) - \psi(x) = -\psi(x)$$

أى أن:

$$[x,\ d/dx]\psi(x) = -\psi(x) \qquad (٤)$$

وبما أن $\psi(x)$ دالة اختيارية، نجد أن:

$$[x,\ d/dx] = -1 \qquad (٥)$$

بالمثل بالنسبة للقوس التبادلى $[x^2,\ d/dx]$ يمكن اتباع نفس الإجراء السابق.

تمرين (١):

أختبر خطية المؤثرات الآتية:

(a) $\hat{L}_1 \psi(x) = x^2 \psi(x)$ (b) $\hat{L}_2 \psi(x) = e^{\psi(x)}$

(c) $\hat{L}_3 \psi(x) = \psi^*(x)$ (d) $\hat{L}_4 \psi(x) = x^2 \dfrac{d\psi(x)}{dx}$

(e) $\hat{L}_5 \psi(x) = \psi(x) + x$ (f) $\hat{L}_6 \psi(x) = \dfrac{d\psi(x)}{dx} + 2\psi(x)$

تمرين (٢):

اثبت أنه عند تمثيل الدالة الموجية كدالة فى كمية التحرك وأنه عند تمثيل المؤثر $\hat{x}$ بالمؤثر التفاضلى $i\hbar\,\partial/\partial p$، فإن علاقة التبديل $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ تتحقق.

تمرين (٣):

إذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ مؤثرين خطيين، هل حاصل ضربهما $\hat{A}\hat{B}$ خطياً.

تمرين (٤):

اثبت أن القوس التبادلى $[\hat{x}^2, \hat{p}] = 2i\hbar x$ والقوس التبادلى $[\hat{x}^n, \hat{p}] = ni\hbar x^{n-1}$.

تمرين (٥):

احسب القوس التبادلى $[xp^2, px^2]$ مستخدما القوس التبادلى الأساسى $[x, p] = i\hbar$.

تمرين (٦):

احسب القوس التبادلى $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]\hat{D}]$

✓ **الصورة العامة لمعادلة شرودنجر- مؤثر هاملتون:**

إذا عدنا لمعادلة شرودنجر للجسيم الحر

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

وحيث أننا نعلم أن

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

يمكننا كتابة معادلة شرودنجر السابقة فى الصورة

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x,t)$$

وحيث أن المؤثر الذى يؤثر على الدالة ψ فى الطرف الأيمن يلاحظ أنه مؤثر كمية التحرك للجسيم الحر الذى يمثل كل الطاقة التى يملكها هذا الجسيم. من المألوف إطلاق اسم الهاملتون أو مؤثر هاملتون $\hat{H}$

على المؤثر الذى يمثل الطاقة الكلية لأى نظام. بالتالى يمكن كتابة معادلة شرودنجر للجسيم الحر فى الصورة:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t) \qquad (١-٣-٧)$$

حيث فى هذه الحالة

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad (١-٣-٨)$$

هذه الصورة من معادلة شرودنجر (٧-٣-١) تنقلنا إلى الصورة العامة لمعادلة شرودنجر عندما لا يكون الجسيم حراً أى عندما يتحرك تحت تأثير دالة جهد $V(x)$. مؤثر هاملتون أومؤثر الطاقة الكلية، فى هذه الحالة يمكن توقعه من الميكانيكا الكلاسيكية فى الصورة:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \qquad (١-٣-٩)$$

وبذلك تكون صورة معادلة شرودنجر لجسيم يتحرك فى جهد $V(x)$ فى بعد واحد تعطى من:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= \hat{H}\psi(x,t) \\ &= \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x,t) \\ &= -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \qquad (١-٣-١٠) \end{aligned}$$

يجب أن نعلم لأن مؤثر هاملتون هو المؤثر الأهم فى الميكانيكا الكمية. لكـــى نطبق الميكانيكا الكمية على نظام ما، أى لكى نكتب معادلة شرودنجر، نحتاج لمعرفة مؤثر هاملتون لهذا النظام أى مؤثر طاقته الكلية.

✓ القيم الذاتية والدوال الذاتية للمؤثرات:

المعادلة (١٠-٣-١)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x,t)$$

يطلق عليها معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن أى معادلة شـــرودنجر غـــير المستقرة. الآن بفصل متغيرات الزمن عن متغيرات الموضع بالإجراء الرياضـــى المعروف بوضع

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

وبالتعويض فى معادلة شرودنجر السابقة نحصل على:

$$i\hbar u(x) \frac{dT(t)}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) \right] T(t)$$

وبالقسمة على $u(x)T(t)$ نحصل على:

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{u(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x)$$

وحيث أن الاعتماد على المتغيرات تم فصله، المعادلة السابقة تتحقق فقط عندما يساوى كل من طرفيها مقداراً ثابتاً. لنطلق على هذا الثابت E. وبذلك نحصل على:

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = E\,T(t)$$

ومنها بالتكامل:

$$T(t) = C\,e^{-iEt/\hbar} \qquad (١١-٣-١)$$

حيث يمثل C ثابت التكامل. مقارنة بما سبق نرى بوضوح أن E تمثل الطاقة الكلية للنظام. المعادلة الخاصة بالدالة $u(x)$ تعطى من:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x) \qquad (١٢-٣-١)$$

والتى يطلق عليها معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن أو معادلة شرودنجر المستقرة.

نعلم أن المقدار داخل الأقواس يمثل مؤثر هاملتون $\hat{H}$. بالتالى المعادلة (١٢-٣-١) يمكن كتابتها فى الصورة:

$$\hat{H}\,u(x) = E\,u(x) \qquad (١٣-٣-١)$$

لنعلم أنه إذا اثر مؤثر على دالة ما وأنتج نفس الدالة مضروبة فى مقداراً ثابتاً، سميت الدالة دالة ذاتية للمؤثر وسمى المقدار الثابت قيمة ذاتية له. من هنا نجد أن المعادلة (١٣-٣-١) تمثل معادلة (قيمة ذاتية-دالة ذاتية) للمؤثر $\hat{H}$،

حيث أن المؤثر $\bar{H}$ أثر على $u(x)$ وأنتج نفس الدالة مضروبة فى مقدار ثابت E الذى يمثل القيمة الذاتية للمؤثر فى حين أن $u(x)$ دالته الذاتية. من ذلك نخلص إلى أن معادلة شرودنجر غير المستقرة تصف تطور النظام مع الزمن، اما معادلة شرودنجر المستقرة تمثل معادلة قيمة ذاتية لمؤثر هاملتون $\bar{H}$ الخاص بالنظام، أى يعطى القيم الذاتية وهى القيم المسموح بها للطاقة الكلية لهذا للنظام المدروس.

تعتمد حلول المعادلة (١٢-٣-١) بشكل خاص على شكل $V(x)$، فى الحالة الخاصة —الجسيم الحر- تكون قيمة دالة الجهد $V(x) = 0$ ويعطى حل (١٢-٣-١) من:

$$u(x) = e^{ikx} \qquad (١٤-٣-١)$$

حيث تعطى k من $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. وبذلك تكون الدالة الموجية للجسيم الحر تأخذ الشكل:

$$\psi(x,t) = u(x)T(t) = e^{i(kx-\omega t)} \qquad (١٥-٣-١)$$

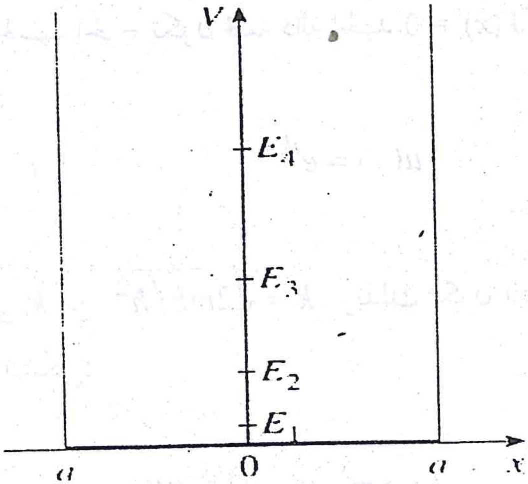
حيث $\omega = E/\hbar$. نلاحظ أن المعادلة (١٥-٣-١) هى نفس الصورة الأصلية التى حصلنا عليها من قبل للجسيم الحر الممثلة بالمعادلة (١٤-٢-١).

(١) البئر الجهدى اللانهائى:

نعتبر جسيم يتحرك فى جهد $V(x)$ موضحاً فى شكل (٨) والمعطى قيمه بالصورة:

$$V = \begin{cases} 0 & -a \le x \le a \\ \infty & |x| > a \end{cases} \qquad (١-٣-١٦)$$

والذى يعرف بالبئر الجهدى والممثل بشكل (٩).



شكل (٤)

فى المنطقة الأولى، حيث $V = 0$، تصبح معادلة معادلة شرودنجر غير المستقرة فى الصورة:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + Eu(x) = 0 \qquad (١-٣-١٧)$$

يكون الحل العام لهذه المعادلة نحصل عليه باستخدام العامل المكامل وهى من الطرق المشهورة فى مثل هذه المعادلات بحيث يصبح الحل فى الصورة:

$$u = A\cos kx + B\sin kx \qquad (١-٣-١٨)$$

حيث A و B ثوابت بينما تعطى k من $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ كما سبق.

فى المنطقة خارج البئر حيث الجهد لانهائى، تتحقق معادلة شرودنجر فقط إذا كانت الدالة الموجية لها قيمة صفرية، أى لا يوجد هناك أى دالـــة موجيـــة. سوف نطبق أولاً الشرط الحدى الذى يتطلب أن تكون الدالة الموجية متصلة عند $x = \pm a$ وكذلك تكون فى نفس الوقت صفرية عند تلك النقاط، أى أن:

$$\left.\begin{aligned} A\cos ka + B\sin ka = 0 \\ A\cos ka - B\sin ka = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (١-٣-١٩)$$

لذلك، إما

$B = 0$ مما يستلزم أن $cos\ ka = 0$ ومنها

$$k = n\pi / 2a \qquad n = 1,3,5,........ \qquad (١-٣-٢٠)$$

أو $A=0$ مما يستلزم أن $sin\ ka = 0$ ومنها

$$k = n\pi / 2a \qquad n = 2,4,6,........ \qquad (١-٣-٢١)$$

هذه الشروط، بالاشتراك مع تعريف k السابق حيث $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$، يعنى أن الحلول التى تتناسق مع الشروط الحدية توجد فقط إذا تحقق أن

$$E = E_n = \hbar^2\pi^2 n^2 / 8ma^2 \qquad (١-٣-٢٢)$$

أى أن الطاقة قد تم تكميمها، أى تحولت إلى كمات أو قيم منفصلة.

وبذلك تصبح أجزاء الدوال الموجية غير المعتمدة على الزمن التى تصف حالة الجسيم تبعاً لقيمة n الفردية (معادلة ٢٠-٣-١) أو الزوجية (معادلة ٢١-٣-١) تأخذ الصور الآتية على الترتيب:

$$u_n = A\cos(n\pi x/2a), \quad n \quad \text{is odd} \qquad (١-٣-٢٣)$$

$$u_n = B\sin(n\pi x/2a), \quad n \quad \text{is even} \qquad (١-٣-٢٣)$$

وذلك داخل البئر حيث $-a \le x \le a$، أما خارج البئر حيث $|x| > a$ فإن $u_n = 0$. وبتطبيق شرط المعايرة (٢٧-٢-١) والذى يمكن كتابته كالآتى:

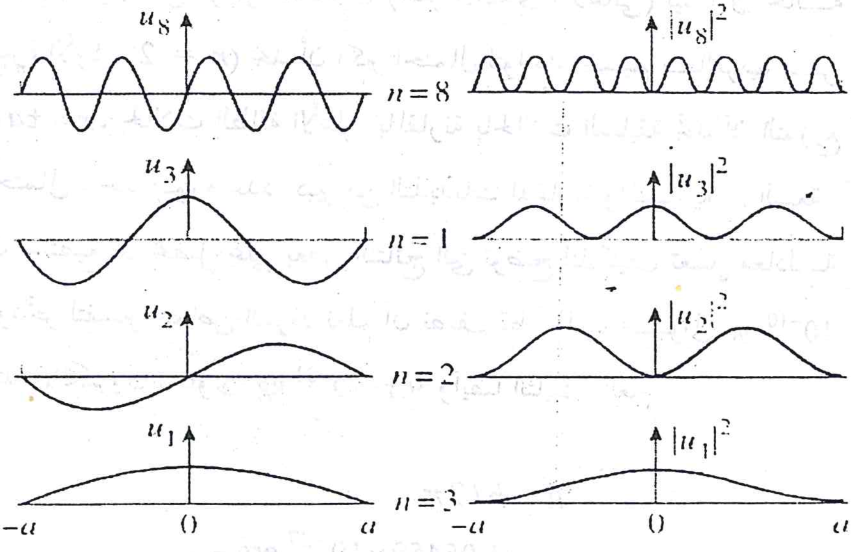
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u|^2\, dx = 1 \qquad (١-٣-٢٤)$$

والذى تتحول حدوده إلى $\pm a$ نجد أن

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos(n\pi x/2a), \quad n \quad \text{is odd} \qquad (١-٣-٢٥)$$

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin(n\pi x/2a), \quad n \quad \text{is even} \qquad (١-٣-٢٦)$$

ويتضح أن لكل قيمة من قيم n الفردية أو الزوجية (أى لكل قيمة من قيم الطاقة، تبعاً لتعريف الطاقة المكممة فى المعادلة (٢٢-٣-١)) دالة موجية u_n تمثلها وبرسم تلك الدوال الموجية أو قيمتها المطلقة (والذى يمثل التوزيع الاحتمالى لموضع الجسيم) كدالة فى الموضع يمكن الحصول على شكل (١٠) والذى يوضح تغير هذه الدوال الموجية داخل البئر الجهدى تبعا لتغير موضع الجسيم الذى تتم دراسته.



شكل (٥)

ونلاحظ من شكل (١٠) أن الدالة الموجية إما متماثلة ($u_n(x) = u_n(-x)$) أو غير متماثلة ($u_n(x) = -u_n(-x)$) حول نقطة الأصل تبعاً لقيمة n الزوجية أو الفردية على الترتيب وتعرف هذه الخاصية بخاصية تماثل أو تعادل

تماثـــل parity الدالة الموجية حيث أن الدالة الموجية المتماثلة يقال أن لهـا تماثـــل زوجى even parity أما الدالة الموجية غير المتماثلة فيقال أن لها خاصـــية التماثل الفردى odd parity. نخلص من الأشكال السابقة الخاصة بـالتوزيع الاحتمالى لموضع الجسيم (شكل ٥) أنه فى الحالة التى يكون فيها الجسيم لــه أقل قيمة من الطاقة ($n = 1$) وبالتالى له الدالة الموجية $u_1(x)$ ويكون له التوزيع الاحتمالى لموضعه مساوى للمقدار $|u_1(x)|^2$ نجد أن أقوى احتمال لتواجـد الجسيم بالقرب من مركز الصندوق (البئر الجهدى اللانهائى) بينما فى حالــة الإثارة الأولى ($n = 2$) نجد أن اكبر احتمال لتواجد الجسيم بـالقرب مـن $x = \pm a/2$. لحالات الطاقة الأعلى بالمقارنة بالحالات السابقة نجد أن التوزيع الاحتمالى يأخذ صورة عدد كبير من التذبذبات المتقاربة والمتساوية فى السعة.

الآن نستطيع أن نحصل على بعض النتائج التى توضح لنا كيف تعمل معادلــة شرودنجر لتفسير خواص الذرة. نعلم أن نصف قطر الذرة حـوالى 10^{-10} m وكتلة الالكترون تساوى 9.1×10^{-31} kg وأيضا الثابت العام

$$\begin{aligned}\hbar &= h/2\pi\\ &= 1.05459\times10^{-27}\ \text{erg}-\text{s}\\ &= 1.05459\times10^{-34}\ \ \text{J}-\text{s}\end{aligned}$$

فإذا قمنا بالتعويض عن القيم السابقة فى المعادلة (٢٢-٣-١) حيـث تمثـل الذرة البئر الجهدى ويمثل نصف قطرها قيمة a فإننا نحصل على قيم الطاقــة لمنازل الذرة تبعاً لقيمة n كالآتى:

$$E_n \approx 1.5\times10^{-18} n^2 \quad J$$

وهذا يعنى أن طاقة المستوى الأول، حيث $n = 1$ تساوى:

$$E_1 \approx 1.5\times10^{-18} \quad J$$

بينما طاقة المستوى الثانى حيث $n = 2$ تساوى

$$E_2 \approx 6\times10^{-18} \quad J$$

وبطرح القيمة السابقة من القيمة الأخيرة نحصل على فرق الطاقة بين للمستويين الأول والثانى الممثل لطاقة الفوتون المنبعث نتيجة انتقال الإلكترون من المستوى الثانى إلى المستوى الأول والتى تساوى

$$E_{photon} \approx 4.5\times10^{-18} \ J = 28 \ eV$$

والذى يمكن حساب طوله الموجى من العلاقة $E = h\nu$ والذى هو مقلوب التردد ν لنحصل على الطول الموجى للفوتون المنبعث

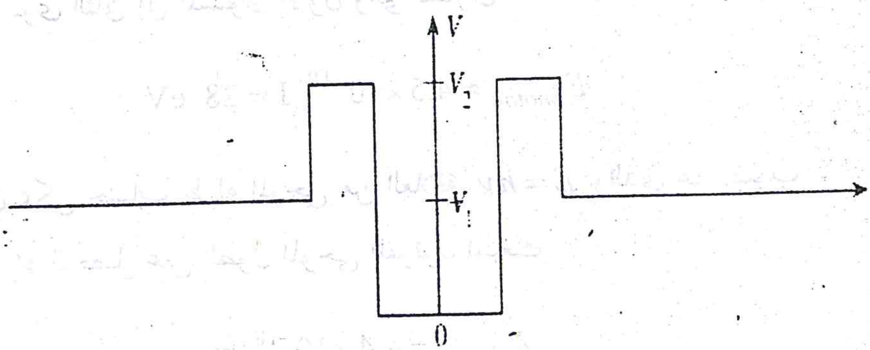
$$\lambda_{photon} = 4.4\times10^{-18} \ m$$

والذى هو من نفس الدرجة للطول الموجى الملاحظ معملياً للانتقال الذرى. كذلك إذا قمنا بتطبيق نفس الحسابات السابقة على بروتون ذو كتلة تساوى $1.7\times10^{-27}\ kg$ ويمثل نصف قطر النواه والذى يساوى $2\times10^{-15}\ m$ يمثل قيمة a نجد أن فرق الطاقة بين المستويين الأول والثانى يساوى $5\times10^{-12}\ J = 34\ MeV$ والذى أيضا من يتفق مع نفس درجة القيمة

الملاحظة معملياً لقياسات طاقات ربط النواة. مع الملاحظة أن لا النـــواة ولا الذرة أحاديا البعد ولكن يمكن الحصول على موافقة تقريبية حتى هذه المرحلة.

(٢) التأثير النفقى :

سوف نتحول الآن الى وصف التأثيرات الناتجة من نفاذ أو اختـــراق الدالـــة الموجية للمناطق الممنوعة من الناحية الكلاسيكية. لنعتبر أولاً بئـــراً جهـــدياً محدوداً بحاجز جهدى محدود الارتفاع والاتساع كما فى شكل (٦).

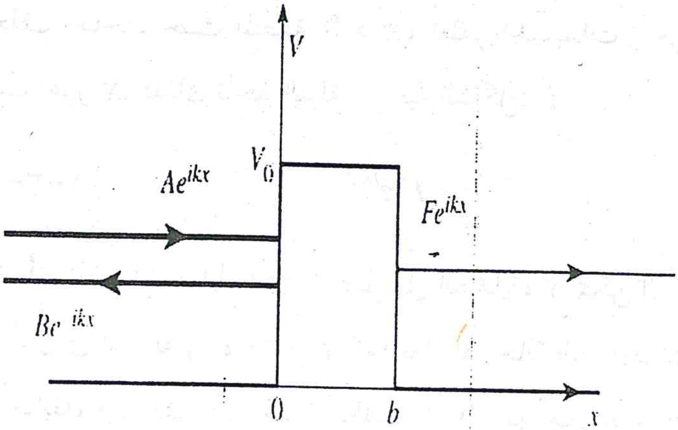


شكل (٦)

كما رأينا فى المثال السابق فى حالة البئر الجهدى المحـــدود، الدالـــة الموجيـــة تطمحل أسياً فى المناطق الممنوعة كلاسيكياً وتظل لها قيمة غير صفرية عنـــد النقاط $|x| = a$. فى المناطق حيث $|x| > a$، الطاقة الكلية تعود مـــرة أخـــرى لتكون أكبر من طاقة الجهد ثم تعود مرة أخرى الدالة الموجية لتتذبذب. مـــن هذا ينتج أن هناك احتمال لوجود الجسيم فى كل من داخل وخـــارج البئـــر

الجهدى وأيضاً عند كل النقاط داخل الحاجز الجهدى. هذا يعنى أن الميكانيكا الكمية تؤدى إلى أن الجسيم يستطيع المرور من خلال الحاجز الجهدى، الذى من الناحية الكلاسيكية لا يمكن اختراقه. هذه الظاهرة تدعى التأثير النفقى.

لدراسة التأثير النفقى بتفصيل أكثر نعتبر حالة شعاع من الجسيمات له كمية تحرك $\hbar k$ وطاقة كلية $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ يدنو من حاجز جهدى ارتفاعه V_0 (حيث $V_0 > E$) وعرضه b (شكل ٧). سوف نجد أن



شكل (٧)

جزءاً من الجسيمات سوف ينعكس عند الحاجز بطاقة تحرك $-\hbar k$، فى حين أن الجزء الآخر من الجسيمات سوف ينفذ من خلال الحاجز ليظهر بطاقة تحرك $\hbar k$ فى الجانب الآخر من الحاجز. فى هذه الحالة لدينا الآن جسيمات ساقطة، جسيمات نافذة وجسيمات منعكسة. هذه الأنواع الثلاثة من

الجسيمات تمثل بموجات مستوية، لذلك الدالة الموجية على جانب السقوط، والذى يكون فى المنطقة $x < 0$ ، تأخذ الشكل الآتى:

$$u = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad (١-٣-٤٧)$$

أما الدالة الموجية داخل الحاجز فتأخذ نفس الشكل للدالة الموجية (٢٨-٣-١) أى:

$$u = Ce^{\eta x} + De^{-\eta x} \qquad (١-٣-٤٨)$$

أما خلف الحاجز، حيث المنطقة $x > 0$ ، تظهر الجسيمات تتحرك فى التجاه الموجب لمحور x، لذلك تأخذ الدالة الموجية الشكل:

$$u = Fe^{ikx} \qquad (١-٣-٤٩)$$

نلاحظ أنه لأن الحاجز الجهدى لا يصل إلى اللانهاية، لا يمكن الاستغناء عن الحد الأول فى المعادلة (٤٨-٣-١) كما فعلنا فى حالة البئر الجهدى. وكما ذكرنا سابقاً، فإن الشروط الحدية تتطلب اتصال كل من u و du/dx عند النقطة $x = 0$ و $x = b$ والتى يمكن صياغتها فى الصورة الرياضية الآتية كما فعلنا سابقاً تماماً كالآتى:

$$A + B = C + D \qquad (١-٣-٤٩)$$

$$A - B = \frac{\eta}{ik}(C - D) \qquad (١-٣-٥٠)$$

$$Ce^{\eta b} + De^{-\eta b} = Fe^{ikb} \qquad (١-٣-٥١)$$

$$Ce^{\eta b} - De^{-\eta b} = \frac{ik}{\eta} Fe^{ikb} \qquad (١-٣-٥٢)$$

بجمع المعادلتين (٤٩-٣-١) و (٥٠-٣-١) طرح المعـادلتين (٥١-٣-١) (٥٢-٣-١) نحصل على:

$$2A = (1+\frac{\eta}{ik})C + (1-\frac{\eta}{ik})D \qquad (١-٣-٥٣)$$

$$2Ce^{\eta b} = (1+\frac{ik}{\eta})Fe^{ikb} \qquad (١-٣-٥٤)$$

$$2De^{-\eta b} = (1-\frac{ik}{\eta})Fe^{ikb} \qquad (١-٣-٥٥)$$

يمكننا دمج هذه المعادلات لنحصل على F بدلالة A :

$$\frac{F}{A} = \frac{4i\eta k}{(2i\eta k + \eta^2 - k^2)e^{-\eta b} + (2i\eta k - \eta^2 + k^2)e^{\eta b}} e^{ikb}$$

(١-٣-٥٦)

لنعلم أن الجزء من الجسيمات النافذة إنما هى فقط نسـبة مـن احتمـالات شعاعات الجسيمات التى نفذت والتى سقطت، والتى فقـط تمثـل بالقيمـة $|F|^2/|A|^2$ والذى يمكن حسابه من المعادلة (٥٦-٣-١). مـن المعلـوم أن احتمال النفاذ تقريباً صغير تماماً، لذلك يمكن إهمال المقـدار $e^{\eta b}$ فى مقـام المعادلة (٥٦-٣-١)، لنحصل على احتمال النفذ فى الصورة الآتية:

$$\frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{16\eta^2 k^2}{(\eta^2+k^2)^2} e^{-2kb} = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-2kb}$$

(١-٣-٥٧)

يمكننا أن نرى أن احتمال النفاذ يعتمد بصورة كبيرة على الاضمحلال الأسى للدالة الموجية داخل الحاجز الجهدى، أى أن: كلما انخفض وضاق الحاجز كلما كان احتمال النفاذ كبيراً.

مثال (١)

فى البئر الجهدى اللانهائى نضع $V \to \infty$ عند الحوائط، $V = 0$ داخل البئر، إفرض بدلاً من ذلك كانت دالة الجهد $V = C$ داخل البئر، حيث C مقدار ثابت. احسب مستويات الطاقة.

الحـــل

هذه مسألة حركة جسيم فى صندوق أحادى البعد مع الإختلاف فى أن الجهد داخل البئر له قيمة غير صفرية، لذلك لنبدأ بمعادلة شرودنجر فى الصورة العامة:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad (١)$$

وحيث أن الجهد ثابت داخل البئر، نجد أن معادلة شرودنجر (١) تؤول إلى:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-C)\psi = 0 \qquad (٢)$$

أى:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \tag{٣}$$

حيث:

$$k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-C)} \tag{٤}$$

ويكون حل تلك المعادلة فى الصورة:

$$\psi(x)=A\,e^{ikx}+B\,e^{-ikx} \tag{٥}$$

وهنا سوف نحتفظ بكل الحدود لتلك الدالة حيث أن الحركة هنا تكتل بالدالة الموجية الموقوفة.

ومن شرط تلاشى الدالة الموجية عند الحوائط، أو شرط اتصال الدالة الموجية ومشتقاتها، نجد أن:

$$\left.\begin{aligned}\psi(0)=0\\ \psi(a)=0\end{aligned}\right\} \tag{٦}$$

حيث a عرض البئر، ومنها نحصل على:

$$A=-B \tag{٧}$$

وبالتعويض فى (٥) نجد أن:

$$\psi(x)=2iA\sin(kx)=D\sin(kx) \tag{٨}$$

حيث $D = 2iA$، ولا ننسى أن العدد الموجى k دالة فى دالة الجهد الثابتة $V = C$، المعرف من قبل بالقيمة فى المعادلة (٤).

ويتطبيق الشرط الثانى نحصل على أن:

$$\psi(a) = D\sin(ka) = 0 \qquad (٩)$$

وهذا لا يتأتى إلا إذا كان:

$$ka = n\pi \quad \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \qquad (١٠)$$

وتصبح الدالة الموجية فى الصورة:

$$\psi_n(x) = D\sin(\frac{n\pi x}{a}) \qquad (١١)$$

وللحصول على الدالة الموجية المعايرة، أى نحصل على قيمة، نطبق كما فعلنا من قبل شرط المعايرة الذى يحدد قيمة الثابت D بالقيمة:

$$D = \sqrt{\frac{2}{a}} \qquad (١٢)$$

وهى قيمة معلومة وقد حصلنا عليها من قبل بصورة سهلة، وتأخذ الدالة الموجية الصورة النهائية:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}) \qquad (١٢)$$

عودة إلى المعادلة (٤) للحصول على مستويات الطاقة التى نحصل منها على:

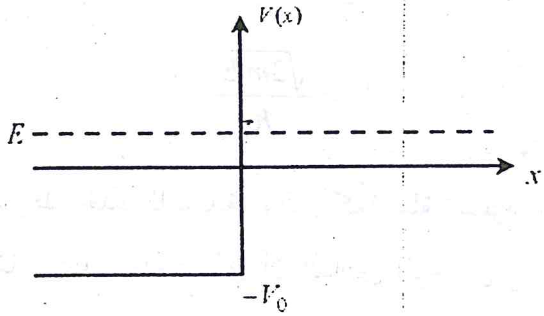
$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + C = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} + C \qquad (١٣)$$

وهى نفس مستويات طاقة المتذبذب التوافقى الحر بزيادة مقدارها C، أى أن مستويات الطاقة هنا قد حدث لها انحراف بمقدار C عن مواقعها الأصـــلية التى قد حصلنا عليها من قيل فى مسألة الجسيم الحر فى صندوق.

<u>مثال (٢)</u>

اعتبر إلكترون يتحرك فى الجهد أحادى البعد الممثل بالقيمة، شكل (٢-٣):

$$\left.\begin{array}{ll} V(x) = -V_0 & x < 0 \\ V(x) = 0 & x > 0 \end{array}\right\}$$



شكل (٨)

عين معامل الانعكاس للإلكترون ذو الطاقة $E > 0$.

الحـــــل

فى المنطقة $x < 0$ نجد أن الحل العام لمعادلة شرودنجر وبالتالى الصيغة العامـــة للدالة الموجية المنسوبة إلى القيمة الذاتية E تكون:

$$\psi_1 = b e^{ikx} + c e^{-ikx};$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \tag{١}$$

أما فى المنطقة $x > 0$ فنجد أن الدالة الموجية المتحركة خـــارج المنطقـــة إلى اللانهاية كالآتى:

$$\psi_2 = a e^{ik_0 x};$$

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{٢}$$

باستخدام الشروط الحدية للمسألة، والتى كما نعلة تستلزم اتصـــال الدالـــة الموجية ومشتقاتها عند الحدود، أى أن الدالتين الموجيتين ψ_1، ψ_2 ومشتقاتهما يجب أن يكون لهما:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \tag{٣}$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \tag{٤}$$

من المعادلة (٣) نجد أن:

$$a = b + c \tag{٥}$$

ومن المعادلة (٤) نحصل على:

$$a k_0 = (b-c)k \tag{٦}$$

وبالتالى تكون النسبة بين كثافة الجسيمات المنعكسة إلى كثافة الجسيمات الساقط يعطى معامل الانعكاس فى الصورة:

$$R_0 = \left(\frac{k - k_0}{k + k_0}\right)^2 \cdot \left(\frac{\sqrt{E+V_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E+V_0} + \sqrt{E}}\right)^2 = \frac{V_0^2}{\left(\sqrt{E+V_0} + \sqrt{E}\right)^4} = \qquad (٧)$$

وإذا كانت طاقة الجسيمات $E = 0$، نجد أن معامل الانعكاس $R_0 = 1$، وبزيادة فى طاقة الجسيمات فإن معامل الانعكاس R_0 يبدأ فى النقصان بسرعة. للحالة $E >> V_0$ نجد أن:

$$R_0 \approx \frac{V_0^2}{16 E^2} \qquad (٨)$$

فى الحالة المحدودة الأخرى $E << V_0$ يكون:

$$R_0 \approx 1 - 4\sqrt{\frac{E}{V_0}} \qquad (٩)$$

للمواد الحقيقية $V_0 \approx 10\ eV$. وبالتالى تكون قيمة معامل الانعكاس للإلكترون ذو الطاقة $E = 0.1\ eV$ تساوى:

$$R_0 = 0.67 \qquad (١٠)$$

تمرين (١):

احسب معامل النفاذ لاختراق حاجز جهدى لإلكترون طاقته 5 eV، مفترضاً أن الحاجز أحادى البعد ومستطيل الشكل باتساع 10^{-7} cm و ارتفاع 6 eV.

تمرين (٢):

شعاع من الإلكترونات طاقته 10 eV سقطت على حاجز جهدى ارتفاعه 30 eV واتساعه 0.5 انجستروم. احسب معامل النفاذ.