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 $T = 300\ \mathrm{K}$: $kT = [38.682]^{-1}\ \mathrm{eV}$

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

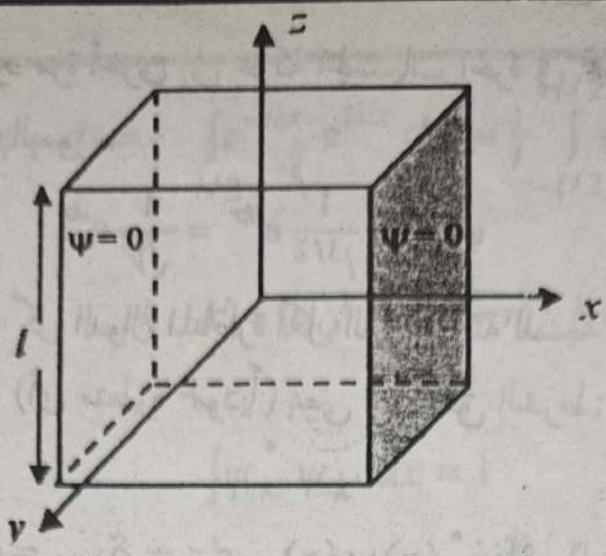
الباب الأول

حركة الجسيمات الحرة فى الفراغ:

درسنا فى العام السابق معادلة شرودنجر فى بعد واحد وعلمنا كيف تعمل المعادلة بدراسة مثال على ذلك مثلا فى جسيم مقيد فى صندوق احادى البعد والذى له التكامل $\int|\psi|^2 d\tau$ يؤول غلى كمية محدودة. 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 عاى 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 رياضيا كالآتى:

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

نأتى الآن لدراسة الدالة، حيث يكون الحيز المحدود هو مكعب طول ضلعه l يقع مركزه عند نقطة أصل الاحداثيات، شكل (١). بتطبيق شرط المعايرة على الدالة $\psi(x) = Ae^{ikx}$ داخل المكعب نجد أن:



شكل(١)

$$\int_{-l/2}^{+l/2} \psi^*(x)\psi(x)\,dx = |A|^2 \int_{-l/2}^{+l/2} dx$$
$$= |A|^2 l = 1 \qquad (٢)$$

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

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{l}}\, e^{ikx} \qquad (٣)$$

وبتطبيق شرط الدورية (١) على الدالة (٣) نجد أن:

$$\psi(x) = \psi(x+l) \qquad (٤)$$

أى أن:

$$e^{ikx} = e^{ik(x+l)} \Rightarrow e^{ikl} = 1 \qquad (٥)$$

وهذا يؤدى إلى أن:

$$kl = 2n\pi \Rightarrow k_n = \frac{2n\pi}{l} \qquad (٦)$$

حيث n أعداد صحيحة موجبة وسالبة. ويكون التغير فى k هو Δk حيث Δk مقدار الفرق 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 $\overline{k}$ أخذ سلسلة من القيم المتفرقة المحددة

بالعلاقة (٦) وعند الانتقال إلى اللانهاية ($l \to \infty$) فإن الفرق Δk بين كل قيمتين متتاليتين للمتجه $\overline{k}$ يؤول إلى الصفر وتعود مرة أخرى إلى حركة الجسيمات الحرة فى حجم غير محدود من الفراغ. فى حالة الأبعاد الثلاث تأخذ ψ الصورة:

$$\psi(r) = \frac{1}{l^{3/2}} e^{ikr} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \qquad (٧)$$

حيث V هو حجم المكعب. كل الدوال المناظرة لكل القيم الممكنة للمتجه $\overline{k}$ (معادلة ٦) تكون فيما بينها مجموعة من الدوال المتغامدة (أى متعايرة عمودياً) بمعنى أنها تحقق الشرط:

$$\int_V \psi^*_k(r)\psi(r)_{k'}\, d\tau = \delta_{k\,k'} = \delta_{n\,n'} \qquad (٨)$$

وهو ما يعرف بشرط المعايرة العمودى، حيث:

$$d\tau = dx\,dy\,dx, \quad \delta_{kk'} = \delta_{k_1k'_1}\ \delta_{k_2k'_2}\ \delta_{k_3k'_3} \qquad (٩)$$

$$\delta_{k\,k'} = \begin{cases} 1, & k = k' \\ 0, & k \neq k' \end{cases} \qquad (١٠)$$

أو بدلالة قيم العدد الكمى n المرتبط بالعدد الموجى k بالعلاقة (٦) تأخذ (١٠) الصورة:

$$\delta_{n\,n'} = \begin{cases} 1, & n = n' \\ 0, & n \neq n' \end{cases} \qquad (١١)$$

حيث $\delta_{k\,k'}$ ($\delta_{nn'}$) هى دالة (كونيكر ـ 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 (١٠) أو (١١) نجد أنه من الدالة الموجية (٧):

$$\int \psi_k^* \psi_{k'} dx = \frac{1}{l}\int_{-l/2}^{+l/2} e^{-ikx}\, e^{ik'x}\, dx = \frac{1}{l}\int_{-l/2}^{+l/2} e^{i(k'-k)x}\, dx \qquad (١٢)$$

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

$$\int \psi_k^* \psi_{k'} dx = 1 \qquad (١٣)$$

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

$$\int \psi_k^* \psi_{k'} dx = \frac{1}{l}\frac{2i \sin \frac{l}{2}(k'-k)}{i(k'-k)} = \frac{\sin \frac{l}{2}(k'-k)}{\frac{l}{2}(k'-k)} \qquad (١٤)$$

والمعادلة الأخيرة (٤١) حالة عامة، فإنه بالتعويض عن قيمة كل من $k = k_n = \frac{2n\pi}{l}$, $k' = k_{n'} = \frac{2n'\pi}{l}$ نجد أن:

$$\int \psi_k^* \psi_{k'} dx = \frac{\sin \pi(n'-n)}{\pi(n'-n)} = 0 \qquad (١٥)$$

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 هذه الحالة تكون قيمة $x = 0$، وبذلك يكون:

$$\lim_{x \to 0} \frac{\sin x}{x} = 1 \qquad (١٦)$$

وإذا أخذنا فى الاعتبار نتيجتى التكامل فى الحالتين $k \neq k'$ $(n \neq n')$ و $k = k'$ $(n = n')$ الممثلتين بالمعادلتين (١٥) و(١٦) على الترتيب وصورة دالة (كرونيكر- دلتا) الممثلة بالعلاقتين (١٠) و (١١) نجد أنهما نفس القيمة لنفس الدالة، أى يمكن وضع التكامل $\int \psi_k^* \psi_{k'} dx$ فى الصورة الممثلة بالمعادلة (١٢) وهو ما يثبت العلاقة.

الحزمة الموجية:

هنا نتعلم كيف نصف الجسيم وصفا دقيقيا فى سياق الميكانيكا الكمية. حيث أن الأجسام الكمية لها الخاصية المزدوجة الجسيمية والموجية، نتطلع إلى صيغة رياضية لدمج الخاصيتين معا. فى الميكانيكا الكلاسيكية، يكون الجسيم محددا فى الفراغ، أى يمكن حساب موضعه وسرعته معا بأى دقة. أما فى الميكانيكا الكمية، فإنها تصف الجسيم المادى بدالة موجية تناظر الموجة الجسيمية المصاحبة له (موجة دى بروجليه). وكما نعلم أن الدوال الموجية تعتمد على كل الفراغ، بالتالى لا يمكن تحديد موضعها وسرعتها معا. ولكن إذا كان بطريقة ما للدالة الموجية أن تتلاشى فى كل مكان فيما عدا فى الجوار للجسيم، يمكن فى هذه الحالة تستخدم لوصف حركة الجسيم. أى أن الجسيم المحدود داخل منطقة معينة من الفراغ يمكن وصفه بموجة جسيمية والتى لها السعة كبيرة فى تلك المنطقة وتساوى الصفر خارجها. أى أن الموجات الجسيمية لابد لها أن تكون محدودة حول منطقة معينة من الفراغ والتى بداخلها يكون الجسيم مقيدا.

الدالة الموجية فى تلك الصورة (المحددة) تدعى الحزمة الموجية. وبالتالى فإن الحزمة الموجية تتكون من مجموعة من الموجات المختلفة قليلا عن بعضها البعض فى الطول الموجى، ولها اطوار وسعات تختار بدقة بحيث تتداخل تداخلا بناءا فى منطقة صغيرة من الفراغ وتتداخل تداخلا هداما فى أى مكان آخر.

رياضيا، يمكن إنجاز ذلك بتحويل فورير. للسهولة سوف نعتبر حزمة موجية لها بعد واحد ويمكن اتباع نفس الإجراء للتعميم لثلاثة ابعاد. هذه الحزمة سوف تصف جسيما كلاسيكيا مقيدا فى منطقة احادية البعد، على سبيل المثال، جسيما يتحرك خلال المحور x. يمكننا تكوين الحزمة $\psi(x,t)$ بتركيب مجموعة من الموجات المستوية تنتشر خلال المحور x لها ترددات مختلفة أو أطوال موجية مختلفة.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk; \qquad (17)$$

حيث تمثل $\phi(k)$ سعة الحزمة الموجية.

نتطلع فيما يأتى إلى صيغة الحزمة الموجية عند لحظة زمنية معطاه، حيث هناك صيغة من الحزمة الموجية التى تعتمد على الزمن والتى سوف نتعامل معها لاحقا. لنختار هذه اللحظة الزمنية لتكون $t = 0$ ولنعبر عن $\psi(x,0)$ بالصيغة $\psi_0(x)$ مستقبلا وذلك للتسهيل.

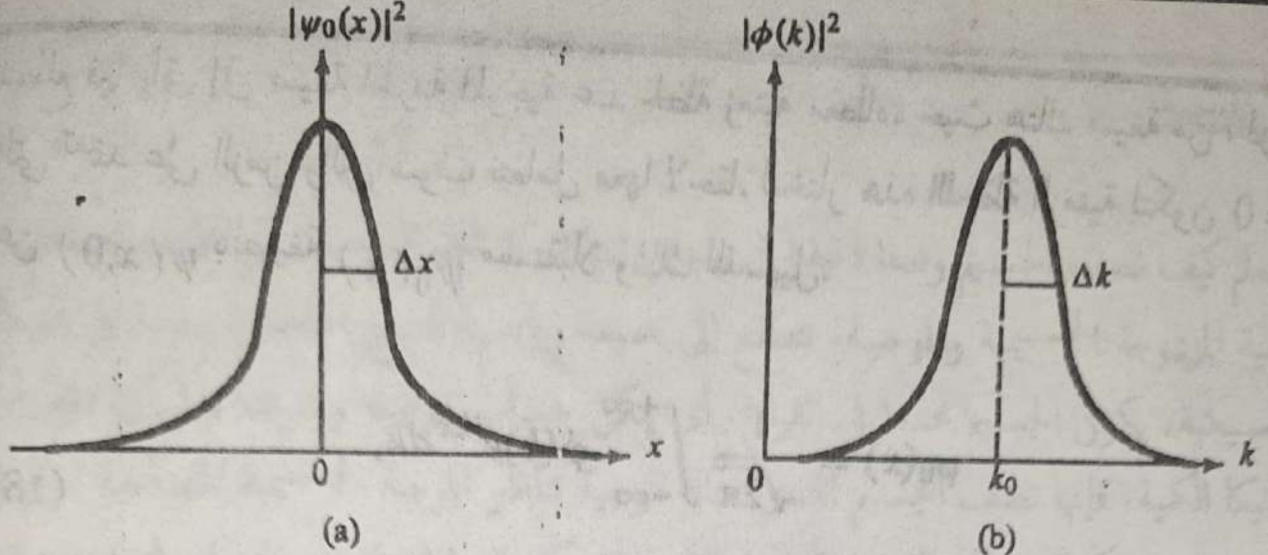
$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk, \tag{18}$$

حيث تمثل $\phi(k)$ تحويل فورير للدالة $\psi_0(x)$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ikx} dx \tag{19}$$

العلاقات (١٨) و (١٩) أنه يمكن تعيين $\psi_0(x)$ من $\phi(k)$ والعكس بالعكس.

الحزمة الموجية (١٨)، لها خاصية الموجة المحدودة حيث: $|\psi_0(x)|$ لها قمة عند $x = 0$ وتتلاشى بعيدا عن $x = 0$. من ناحية اخرى عندما $x \to 0$ نجد أن $e^{ikx} \to 1$، بالتالى الموجات التى لها ترددات مختلفة تتداخل تداخلا بناءا (اى أن التكامل على قيم k المختلفة فى المعادلة (١٨) ينتج تكاملا بناءا. بمعنى آخر تلك القيم هى فقط التى تساهم فى التكامل)، من ناحية أخرى بعيدا عن $x = 0$ (أى أن للقيم $|x| >> 0$) الطور e^{ikx} يعمل عدة دورات تؤدى إلى تذبذبات متعارضة وبذلك ينتج تداخلا هداما (أى أن التكامل على قيم k المختلفة يؤول إلى الصفر). وبالتالى فى لغة التفسير الاحتمالى يكون للجسيم احتمالا كبيرا لتواجده قرب $x = 0$ أما فرصة تواجدة بعيدا عن $x = 0$ تكون معدومة. هذا التحليل ينطبق تماما على الدالة $\phi(k)$ حيث لها قمة عند $k = 0$ وتتلاشى بعيدا عن $k = 0$، شكل (٢) يوضح الحزمة الموجية والتى لها خواص المحدودية التى قمنا بوصفا فيما سبق.



شكل (٢) الحزم الموجية المحدودة

$\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$ و $\psi_0(x) = (2/\pi a^2)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}$

والتى لها القمة عند $x = 0$ و $k = 0$ على الترتيب وتتلاشى بعيدا عن تلك القيم

كما نعلم سابقا من التفسير الاحتمالى للدالة الموجية فإن التفسير الاحتمالى للحزمة الموجية لا يختلف حيث أن $\psi_0(x)$ تمثل الدالة الموجية أو السعة الاحتمالية لوجود الجسيم عند الموضع x، بالتالى $|\psi_0(x)|^2 dx$ تعطى الاحتمال لوجود الجسيم بين x و $x+dx$. ماذا عن التفسير الاحتمالى للدالة $\phi(k)$؟ من المعادلتين (١٨) و (١٩) نجد أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk; \qquad (20)$$

إذا كانت الدالة $\psi_0(x)$ دالة معايرة تكون الدالة $\phi(k)$ والعكس بالعكس. بالتالى فإن الدالة يمكن تفسيرها بشكل طبيعى مثل الدالة $\psi_0(x)$ بأنها السعة الاحتمالية لقياس المتجه الموجى $\bar{k}$ للجسيم فى المنزلة $\phi(k)$. علاوة على ذلك، بينما تمثل $|\phi(k)|^2$ الكثافة الاحتمالية لقياس المتجه الموجى $\bar{k}$، المقدار $P(k)\,dk = |\phi(k)|^2 dk$ يعطى احتمال تواجد المتجه الموجى بين القيم k و $k+dk$.

يمكننا الآن استخلاص المعلومات عن سرعة الجسيم بشكل أوضح وذلك بصياغة الموجة الجسيمية بدلالة طاقة الجسيم E وكمية حركته p. باستخدام $k = p/\hbar$، $dk = dp/\hbar$ و $E = \hbar\omega$ ونعيد تسمية $\tilde{\phi}(p) = \phi(k/\hbar)$ يمكننا صياغة المعادلات (١٧-١٩) فى الصورة

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\phi}(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp, \tag{21}$$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\phi}(p)e^{ipx/\hbar}dp, \tag{22}$$

$$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0(x)e^{-ipx/\hbar}dx, \tag{23}$$

حيث $E(p)$ تمثل طاقة الجسيم الكلية والموصوف بالحزمة الموجية $\psi(x,t)$ وتمثل $\tilde{\phi}(p)$ سعة كمية التحرك للحزمة الموجية.

لنتمكن من فهم الحزمة الموجية فهما جيدا سوف نعتبر المثال التالى.

مثال: إحسب $\psi(x,0)$ للحزمة الموجية الجاووسية $\phi(k) = A\exp[-a^2(k-k_0)^2/4]$ ، حيث A ثابت المعايرة. احسب ثابت المعايرة وكذلك احتمال تواجد الجسيم فى المنطقة $-a/2 \le x \le a/2$ ، أوجد ايضا الدالة $\phi(k)$ للحزمة الموجية التربيعية

$$\psi_0(x) = \begin{cases} Ae^{ik_0x} & |x| \le a \\ 0 & |x| > a. \end{cases}$$

أوجد لها ثابت المعايرة لكى تصبح الدالة معايرة.

الحل: يمكن حساب ثابت المعايرة بسهولة كالآتى:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty}|\phi(k)|^2dk = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right]dk,$$

يمكن استخدام $z = k - k_0$ وبمساعدة التكامل

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2z^2/2}dz = \sqrt{2\pi}/a$$

يؤدى إلى $A = \sqrt{a/\sqrt{2\pi}} = [a^2/(2\pi)]^{1/4}$ ، بالتالى تصبح الحزمة الموجية المتعايرة التى تناظر الحزمة الموجية المتعايرة

$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2\right], \tag{24}$$

فى الصورة

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4+ikx} dk.$$

لكى نجرى التكامل على تلك الحزمة نقوم فقط بإعادة ترتيب الجزء الأسى كالآتى

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx = -\left[\frac{a}{2}(k-k_0) - \frac{ix}{a}\right]^2 - \frac{x^2}{a^2} + ik_0x$$

يمكننا وضع $y = a(k-k_0)/2 - ix/a$ مما يؤدى إلى $dk = 2dy/a$؛ بالتالى تصبح الدالة الموجية فى الصورة

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0x} e^{-y^2} \left(\frac{2}{a} dy\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy \end{aligned}$$

وحيث أن $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}$ نحصل على الدالة الموجية فى الصورة

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0x} \tag{25}$$

حيث e^{ik_0x} تمثل طور الدالة $\psi_0(x)$. من هنا نرى أن $\psi_0(x)$ تمثل موجة تذبذبية لها العدد الموجى k_0 والذى تم تعديله بواسطة دالة جاووسية متمركزة عند نقطة الأصل. لاحظ أن $\psi_0(x)$ مثلها مثل $\phi(k)$ دالة متعايرة. أيضا الدوال الموجية السابقة تبين أن تحويل فورير للحزمة الموجية الجاووسية هو أيضا حزمة موجية جاووسية.

اما احتمال تواجد الجسيم فى المنطقة $-a/2 \le x \le a/2$ فيعطى من

$$P = \int_{-a/2}^{+a/2} |\psi_0(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-a/2}^{+a/2} e^{-2x^2/a^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{+1} e^{-z^2/2} dz = \frac{2}{3}$$

حيث استخدمنا التعويض $z = 2x/a$. اما بالنسبة للدالة التربيعية فمعايرة الدالة كما سبق

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^{a} e^{-ik_0x} e^{ik_0x} dx = |A|^2 \int_{-a}^{a} dx = 2a|A|^2$$

مما يعنى أن $A = 1/\sqrt{2a}$، ويصبح تحويل فورير للدالة $\psi_0(x)$ فى الصورة

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \int_{-a}^{a} e^{ik_0x} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin[(k-k_0)a]}{k-k_0}$$

<u>تمرين (١)</u>: أوجد تحويل فورير للدالة

$$\phi(k) = \begin{cases} A(a-|k|) & |k| \le a \\ 0 & |k| > a \end{cases}$$

حيث تمثل a بارامتر موجب و تمثل A ثابت المعايرة والمطلوب إيجاده

<u>تمرين (٢)</u>: اعتبر الدوال الموجية الثلاثة الآتية

$$\psi_1 = A_1 e^{-y^2}, \psi_2 = A_2 e^{-y^2/2} \quad \text{و} \quad \psi_3 = A_3(e^{-y^2} + y e^{-y^2/2})$$

حيث A_1, A_2, A_3 تمثل ثوابت المعايرة.

(١) احسب ثوابت المعايرة A_1, A_2, A_3

(٢) احسب احتمال تواجد كل حالة فى الفترتين $0 < y < 1$ ، $-1 < y < 1$

تمرين (٣): أوجد تحويل فورير للدوال الآتية مع حساب ثابت المعايرة إن وجد

$$\psi(x) = \begin{cases} 1-|x| & |x| < 1 \\ 0 & |x| \geq 1 \end{cases}$$ ،

$\psi(x) = A/(1+x^2)$ ، $\phi(k) = Ae^{-a|k|-ibk}$ ،

$$\phi(p) = \begin{cases} 0 & p < -p_0 \\ A & -p_0 < p < p_0 \\ 0 & p_0 < p, \end{cases}$$

علاقة عدم التأكيد(التحديد) والحزمة الموجية:

نود هنا أن نثبت أن اتساع الحزمة الموجية $\psi_0(x)$ واتساع سعتها $\phi(k)$ ليسا مستقلتين، بل مرتبطتين بعلاقة وثيقة. هذه العلاقة الوثيقة بين الاتساع فى فراغات x و k لها علاقة مباشرة بعلاقة هيزينبرج لعدم التأكيد.

للسهولة، دعنا نشرح الأفكار الأساسية للحزمة الموجية الجاووسية والتى تم معالجتها فى المثال السابق (٢٤) و (٢٥).

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}, \tag{26}$$

$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4} \tag{27}$$

كما هو موضح فى شكل (٢) $|\psi_0(x)|^2$ و $|\phi(k)|^2$ مركزتان عند $x=0$ و $k=k_0$، على الترتيب.

من المناسب ان نعرف نصف الاتساع Δx و Δk بالتناظر لنصف الاتساع فى القيمة العظمى لكل

من $|\psi_0(x)|^2$ و $|\phi(k)|^2$ على الترتيب. بالتالى، عندما تتغير x من 0 إلى $\pm\Delta x$ و تتغير k من k_0 إلى $k_0 \pm \Delta k$، تسقط القيمة العظمى للدالتين $|\psi_0(x)|^2$ و $|\phi(k)|^2$ إلى القيمة $e^{-1/2}$:

$$\frac{|\psi(\pm\Delta x,\ 0)|^2}{|\psi(0,\ 0)|^2} = e^{-1/2}$$

$$\frac{|\phi(k_0 \pm \Delta k)|^2}{|\phi(k_0)|^2} = e^{-1/2}$$

باستخدام تلك المعادلات مع المعادلات (٢٦) و (٢٧) تؤدى إلى

$$e^{-2\Delta x^2/a^2} = e^{-1/2}$$

$$e^{-a^2\Delta k^2/2} = e^{-1/2}$$

أو إلى النتيجة

$$\Delta x = \frac{a}{2}, \qquad \Delta k = \frac{1}{a},$$

وبالتالى

$$\Delta x\, \Delta k = \frac{1}{2}.$$

وحيث أن $\Delta k = \Delta p/\hbar$ نحصل على

$$\Delta x\, \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \tag{28}$$

هذه العلاقة توضح أنه إذا كان اتساع الحزمة ضيقا فى فراغ الإحداثيات كان اتساعها عريضا جدا فى فراغ كمية التحرك والعكس بالعكس.

فى الحقيقة المعادلة الأخيرة (٢٨) هى الحد الأدنى لعلاقة هيزينبيرج. وكنتيجة لهذا، تسمى الحزمة الموجية الجاووسية الحزمة التى لها أقل درجة عدم تأكيد (minimum uncertainty wave packet). كل

الحزم الأخرى تنتج قيم عليا من حاصل ضرب عدم تأكيد.الإحداثيات وكمية التحرك $\Delta x \Delta p > \hbar/2$.

يمكننا الآن أن نستنتج أن قيمة عدم التأكيد لحاصل الضرب $\Delta x \Delta p$ يتغير تبعا لاختيار الدالة الموجية ψ، مع الوضع فى الاعتبار أن الحد الأدنى هو $\hbar/2$، والذى نحصل عليه فقط عند اختيار الدالة الموجية لتكون هى الدالة الموجية الجاووسية.

__تمرين(٤):__ فى تمرين (١) احسب قسم عدم التأكيد $\Delta x, \Delta p$ ثم اختبر عما إذا كانت تحقق مبدأ عدم التأكيد.

__تمرين(٥):__ احسب سرعة الطور وسرعة المجموعة للحزمة الموجية المناظرة لجسيم نسبى.

__تمرين(٦):__ للدالة فى تمرين (٣) استخدم العلاقات

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ (x^2 - x)\ |\psi(x)|^2$$

$$(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ (p^2 - p)\ |\phi(p)|^2$$

لحساب عدم التأكيد Δx و Δp واثبت أن $\Delta x \Delta p$ تحقق علاقة هايزنبيرج لعدم التحديد.

__انتشار الحزمة الموجية بدون تشوه:__

لنعتبر حزمة موجية مركزها عند نقطة الأصل المعتمدة على الزمن:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ik(x - v_0 t)}\, dk \qquad (29)$$

عندما تتناسب ω مع العدد الموجى k، أى أن $\omega = v_0 k$، تتحرك الحزمة ناحية اليمين بسرعة ثابتة v_0 بدون تشوه.

على أى حال، حيث أننا نهتم بالحزمة الموجية التى تصف الجسيم، نحتاج غلى اعتبار حالة أكثر عمومية كوسط غير مشتِت والذى ينقل الموجات التوافقية التى لها ترددات مختلفة عند سرعات مختلفة. هذا يعنى أن التردد الزاوى ω يجب أن يكون دالة فى العدد الموجى k، أى أن $\omega = \omega(k)$. فى هذه الحالة فإن الصيغة $\omega = \omega(k)$ تُحدد بمطلوب بأن تكون الحزمة الموجية $\psi(x,t)$ تصف الجسيم محل الدراسة. لنفرض أن السعة $\phi(k)$ لها قمة عند $k = k_0$، فى هذه الحالة نجد أن $\phi(k) = g(k - k_0)$ تختلف بشكل معتبر عن الصفر فقط فى معدل ضيق $\Delta k = k - k_0$، ويمكننا فى هذه الحالة أن نستخدم مفكوك تيلور حول k_0

$$\omega = \omega(k_0) + (k - k_0)\left(\frac{d\omega(k)}{dk}\right)_{k=k_0} + \frac{1}{2!}(k - k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} + \ldots.$$

$$= \omega(k_0) + (k - k_0)v_g + \alpha(k - k_0)^2 \qquad (٣٠)$$

حيث $\left(\frac{d\omega(k)}{dk}\right)_{k=k_0} = v_g$، $\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} = \alpha$.

الآن، لتحديد الدالة $\psi(x,t)$ نحتاج ببساطة لنعوض عن المعادلة (٣٠) مع $\phi(k) = g(k - k_0)$ فى المعادلة (١٧) لنحصل على

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0(x - v_{ph}t)} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k - k_0) e^{i(k-k_0)(x - v_g t)} e^{-i(k-k_0)^2 \alpha t + \cdots} dk$$

(٣١)

حيث

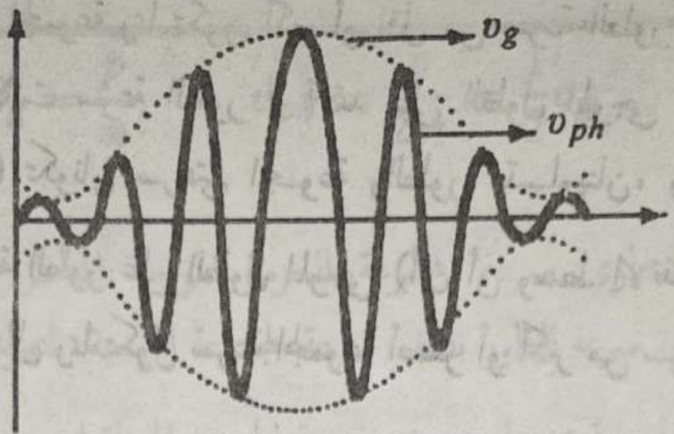
$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}, \qquad v_{ph} = \frac{\omega(k)}{k}$$

(3٢)

المتغيرات v_{ph} و v_g تمثل على الترتيب سرعتى الطور والمجموعة الموجية. سرعة الطور تعرف سرعة انتشار الطور لموجة توافقية واحدة، $e^{ik_0(x-v_{ph}t)}$، أما سرعة المجموعة فتمثل سرعة حركة المجموعة الموجية والتى تكون الحزمة الموجية. من المهم ان نعلم أن نتعامل بحرص مع سرعتى الطور والمجموعة الموجية حيث انهما فى الحالة العامة مختلفتين، فقط عندما تتناسب ω مع k فغنهما تصبحان متساويتيان كما نرى فى الصيغتين (٣٢).

سرعتى الطور والمجموعة الموجية:

دعنا الآن نأخذ جولة قصيرة لنشرح ماذا تعنى سرعة الطور وسرعة المجموعة الموجية. شكل (٣) يعطى شرحا مناسبا، سرعة المجموعة الموجية تمثل السرعة التى تنتشر بها الحزمة الموجية ككل، اما سرعة الطور فتعطى السرعة لكل موجة على حدة أى بشكل فردى والتى تتمركز داخل غلاف الحزمة الموجية. أى أن فى الوقت الذى تتحرك فيه أغشية الموجات الفردية داخل الغلاف بسرعة تساوى سرعة الطور، يتحرك غلاف الحزمة الموجية ككل بسَرعة تساوى سرعة المجموعة الموجية. ولنتخيل الموضوع بوضوح فإن السلسلة المتذبذبة تمدنا بشرح واف ومناسب عن الاختلاف بين سرعتى الطور المجموعة الموجية. فى هذه الحالة سرعة الموجة المتحركة عبر السلسلة يجب أن تميز بكب تأكيد من سرعة النقطة على السلسلة ذاتها. بفرض أن السلسلة تمددت افقيا عبر محور x (سرعة الطور v_{ph} عبر السلسلة)، يجب أن تمثل سرعة المجموعة v_g السرعة التى عندها يتذبذب جسيم أو عنصر مادى من سلك السلسلة أعلى وأسفل حول موضع اتزان فى اتجاه عمودى على السلسلة. اى أن سرعة المجموعة تتجه عبر الاتجاه العمودى على السلسلة، بينما يكون اتجاه سرعة الطور عبر السلسلة نفسها.



شكل (٣) الحزمة الموجية هى دالة معدلة بالسعة $g(k-k_0)$ ، وهى تُمثل بالغلاف الخارجى (الخط المتقطع). يتحرك الغلاف بسرعة المجموعة v_g وتتحرك الأغشية كل على حده (الخط المتصل) بسرعة الطور v_{ph}.

الفرق بين سرعة المجموعة وسرعة الطور يمكن فهمه تماما باشتقاق العلاقة بينهما. عند تفاضل $\omega = kv_{ph}$ بالنسبة للمتغير k نحصل على $d\omega / dk = v_{ph} + k(dv_{ph} / dk)$ وحيث أن $k = 2\pi / \lambda$ نحصل على $dv_{ph} / dk = (dv_{ph} / d\lambda)(d\lambda / dk) = -(2\pi / k^2)(dv_{ph} / d\lambda)$

أو.

$$k(dv_{ph} / dk) = -\lambda(dv_{ph} / d\lambda)$$

بربط تلك العلاقات نحصل على:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_{ph} + k\frac{dv_{ph}}{dk} = v_{ph} - \lambda\frac{dv_{ph}}{d\lambda} \tag{33}$$

والتى يمكننا كتابتها فى الصورة

$$v_g = v_{ph} + p\frac{dv_{ph}}{dp} \tag{34}$$

وبما أن $k(dv_{ph} / dk) = (p / \hbar)(dv_{ph} / dp)(dp / dk)$ لأن $k = p / \hbar$. المعادلات (٣٣) و

(٣٤) تبين أن سرعة المجموعة ربما تكون أكبر أو اقل من سرعة الطور، ايضا ربما تساويها اعتمادا على وسط الانتشار. إذا كانت سرعة الطور لا تعتمد على الطول الموجى (وهذا يحدث إذا كان وسط الانتشار غير مُشتِت) تكونان سرعتى المجموعة والطور متساويتان، وذلك لأن $dv_{ph}/d\lambda = 0$ ولكن إذا اعتمدت سرعة الطور على الطول الموجى (أى أن وسط الانتشار كا مشتِتا) عندئذ تكون $dv_{ph}/d\lambda \neq 0$، وبالتالى ربما تكون سرعة المجموعة أصغر أو أكبر من سرعة الطور.

نعتبر الآن حالة جسيما يتحرك عبر جهد ثابت V له الطاقة الكلية $E(p) = p^2/(2m) + V$. بما أن طاقة الجسيم وكمية تحركه ترتبطان بصفاته الموجية (تردد الموجة والعدد الموجى) بالعلاقتان $E = \hbar\omega$ و $p = \hbar k$ يمكننا كتابة العلاقة (٣٢) فى الصورة

$$\upsilon_g = \frac{dE(p)}{dp}, \qquad \upsilon_{ph} = \frac{E(p)}{p}$$

والتى يمكن ربطها بالعلاقة $E(p) = p^2/(2m) + V$ لنحصل على

$$\upsilon_g = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) = \frac{p}{m} = \upsilon_{particle} \tag{35}$$

$$\upsilon_{ph} = \frac{1}{p}\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) = \frac{p}{2m} + \frac{V}{p} \tag{36}$$

من هنا نستنتج أن سرعة المجموعة الموجية تساوى السرعة الكلاسيكية للجسيم $v_g = v_{particle}$. هذا يعنى أننا يجب أن نرى مركز الحزمة الموجية يتحرك كلاجسيم الكلاسيكى والذى يتبع قوانين الميكانيكا الكلاسيكية، أى أن مركز الحزمة يجب أن يتبع المسار الكلاسيكى للجسيم. فيما يلى سوف نرى كيف أن فكرة الجزمة الموجية تمدنا بارتباط واضح بين الوصف الكلاسيكى للجسيم واللوصف الكمى. فى حالة الجسيم الحر، أى أن $V = 0$، العلاقتان (٣٥) و (٣٦) تنتجان

$$v_g = \frac{p}{m}; \qquad v_{ph} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2} v_g$$

هذا يوضح أنه بينما تساوى سرعة المجموعة للحزمة الموجية المناظرة للجسيم الحر سرعة الجسيم $v_g = p/m$ ، تساوى سرعة الطور نصف سرعة المجموعة الموجية. التعبير $v_{ph} = \frac{1}{2} v_g$ ليس له معنى، والذى يبين ان الدالة الموجية تتحرك بنصف سرعة الجسيم الممثلة له، وهذا يعارض الفيزياء العملية. من هنا نجد أن سرعة الطور عموما ليس لها أهمية فيزيائية فعلية.

التطور الزمنى للحزمة الموجية:

بعد أن تجولنا جولة قصيرة لوصف سرعتى الطور والمجموعة، دعنا الآن نعود لهدفنا الأساسى وهو حساب الدالة الموجية $\psi(x,t)$ معادلة (٣١). لكى ننجز ذلك، نحتاج لأن نقرر أين يمكننا أن نقطع المفكوك (٣٠) أو الأس فى الحد تحت التكامل (٣١). الآن ننوى اعتبار حالتين منفصلتين تناظران قطع المفكوك فى (٣٠) عند الحد الخطى $(k-k_0)v_g t$، أو قطع المفكوك عند الحد المربع $(k-k_0)^2 \alpha t$. الحالتين تدعيان على الترتيب التقريب الخطى والتقريب التربيعى.

فى التقريب الخطى، والذى يُضبط عندما تكون $g(k-k_0)$ ضيقة بشكل كلافى لكى نهمل الحد المربع ($k^2 - term$) أى عندما $(k-k_0)^2 \alpha t << 1$، تصبح الحزمة الموجية (٣١) فى الصورة

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0(x - v_{ph}t)} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k-k_0) e^{i(k-k_0)(x-v_g t)} dk$$

والتى يمكن صياغتها فى الصورة

$$\psi(x,t) = e^{ik_0(x - v_{ph}t)} \psi_0(x - v_g t) \qquad (37)$$

حيث ψ_0 تمثل الدالة الموجية فى الحالة الابتدائية

$$\psi_0(x - v_g t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(q) e^{i(x - v_g t)q} dq$$

المتغير q يعطى من $q = k - k_0$، المعادلة (٣٧) تؤدى إلى

$$|\psi(x,t)|^2 = |\psi_0(x - v_g t)|^2 \tag{38}$$

كما هو مشاهد من شكل (٣)، الموجة المعدلة، المعادلة (٣٧) تمثل حزمة موجية ذات سعة معدلة. $\psi_0(x - v_0 t)$، تنتشر ناحية اليمين بسرعة مجموعة v_g، فى حين أن الموجة المعدلة $e^{ik_0(x - v_{ph}t)}$ تمثل موجة توافقية مجردة لها عدد موجى ثابت k_0 والتى تتحرك أيضا ناحية اليمين بسرعة الطور v_{ph}. من هنا، نجد أن الصيغتين (٣٧) و(٣٨) تمثلان حزمة موجية تتحرك قمتها ككل بالسرعة v_g بينما الموجات الفردية تنتشر داخل الغلاف بالسرعة v_{ph}. إن سرعة المجموعة التى تعطى سرعة القمة، تمثل بوضوح سرعة الجسيم، لأن فرصة وجود الجسيم حول قمة الحزمة أكبر من فرصة وجوده فى أى منطقة اخرى من الفراغ، الحزمة الموجة بشكل كبير متمركزة حول جوار موضع الجسيم وتتلاشى فى أى مكان آخر. لذلك فإن سرعة المجموعة، وليست سرعة الطورن تساولى سرعة الجسيم الممثل بالحزمة الموجية. هذا يبين بوضوح اقتراح ان حركة مادة الجسيم يمكن وصفها بشكل جيد بالحزمة الموجية.

الآن، ماذا عن حجم الحزمة الموجية فى التقريب الخطى؟ هل تتأثر بانتشار الجسيم؟ الإجابة لا بوضوح. حيث يمكن أن نتبين هذا حالا من الصيغة (٣٧): حيث أن $\psi_0(x - v_0 t)$ تمثلن من الناحية الرياضية، منحنى يتحرك ناحية اليمين بسرعة v_g بدون إعادة صياغة. هذا يعنى أن إذا كانت الحزمة الموجية فى البداية جاووسية، سوف تظل جاووسية كما تنتشر فى الفراغ بدون أى تغير فى حجمها. ولنلخص هنا فى الآتى: لقد أثبتنا أنه فى التقريب الخطى، تنتشر الحزمة الموجية بدون تشوه وتستمر متحركة بحركة منتظمة. لاحقا سوف ندرس الشروط الواجبة لكى تواجه الحزمة الموجية تغيرا أثناء الانتقال.

تشوه الحزمة الموجية أثناء الانتشار:

دعنا الان ندرس الحزمة الموجية آخذين فى الاعتبار الحد المربع k^2-term ($(k-k_0)^2\alpha t$)، فى الحد تحت التكامل فى (٣١). هذا يؤدى إلى

$$\psi(x,t)=e^{-ik_0(x-v_{ph}t)}f(x,t)$$

(39)

حيث تمثل $f(x,t)$ غلاف الحزمة الموجية وتعطى من

$$f(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}g(q)e^{iq(x-v_g t)}e^{iq^2\alpha t}dq$$

حيث $q=k-k_0$.

لكى نثبت كيف تتأثر الحزمة الموجية بالبارامتر α، دعنا نعتبر الحزمة الجاووسية

$$\phi(k)=\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2\right]$$

والتى لها الاتساع الابتدائى $\Delta x_0=a/2$ و $\Delta k=\hbar/2$. بالتعويض عن $\phi(k)$ فى (٣٩) نحصل على

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4}e^{ik_0(x-v_{ph}t)}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[iq(x-v_g t)-\left(\frac{a^2}{4}+i\alpha t\right)q^2\right]dq$$

وبحساب التكامل يمكننا أن نبين أن كثافة التوزيع الاحتمالى للحزمة يعطى من

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta x(t)}\exp\left\{-\frac{(x-v_g t)^2}{[\Delta x(t)]^2}\right\}$$

حيث $\Delta x(t)$ اتساع الحزمة عند اللحظة الزمنية t

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1+\frac{16\alpha^2}{a^4}t^2} = \Delta x_0\sqrt{1+\frac{\alpha^2 t^2}{(\Delta x_0)^4}} \tag{40}$$

نرى أن اتساع الحزمة، والذى كان فى الحالة الابتدائية $\Delta x_0 = a/2$، قد كبر بالمعامل

$\sqrt{1+\alpha^2 t^2/(\Delta x_0)^4}$بعد مرو زمن قدره t. هذا يبين أن الحزمة قد انتشرت، هذا الانتشار بسبب ادخال الحد التربيعى q^2 أى الحد $iq^2\alpha t$. عند إهمال هذا الحد سوف يظل اتساع الحزمة الموجة ثابتا ويساوى Δx_0.

لكى نكون احساسا كاملا وادق عن نمو أو كبر الحزمة الموجية، كما هو مبين فى (٤٠)، نحتاج لأن نعين البارامتر α، وهذا يتطلب تعيين الدالة $\omega(k)$، لأن $\alpha = \frac{1}{2}\frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0}$.

<u>مثال:</u> بين كيف تنتشر الحزمة الموجية المناظرة للجسيم الحر الذى له حزمة موجية جاووسية ابتدائية.

الحل: المطلوب هنا اكتشاف كيف تنتشر الحزمة الموجية المناظرة للجسيم الحر

زمنيا. بداية نود إيجاد شكل الحزمة الموجية. بالتعويض عن $\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$ فى تحويل فورير نحصل على

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + i(kx-\omega t)\right]dk \tag{41}$$

وحيث أن $\omega(k) = \hbar k^2/(2m)$وهى علاقة التشتت للجسيم الحر وبوضع $q = k - k_0$ يمكننا كتابة الاس فى المعادلة السابقة فى الصورة

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2+i\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)=-\left(\frac{a^2}{4}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)q^2+i\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)q$$

$$+ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{2m}\right)$$

$$=-\alpha q^2+i\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)q+ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{2m}\right)$$

$$=-\alpha\left[q-\frac{i}{2\alpha}\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right]^2-\frac{1}{4\alpha}\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2$$

$$+ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{2m}\right) \quad (42)$$

حيث استخدمنا العلاقة $-\alpha q^2+iyq=-\alpha\left[q-iy/(2\alpha)\right]^2-y^2/(4\alpha)$ والعلاقة

$y=x-\hbar k_0 t/m$ حيث

$$\alpha=\frac{a^2}{4}+i\frac{\hbar t}{2m} \quad (43)$$

من العلاقة (٤٢) فى (٤٣) نحصل على

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4}\exp\left[ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right]\exp\left[-\frac{1}{4\alpha}\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2\right]$$

$$\times\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left\{-\alpha\left[q-\frac{i}{2\alpha}\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right]^2\right\}dq \quad (٤٤)$$

باستخدام التكامل $\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\alpha\left(q-iy/(2\alpha)\right)^2\right]dq=\sqrt{\pi/\alpha}$ نحصل على

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\left(\frac{a^2}{8\pi}\right)^{1/4}\exp\left[ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right]\exp\left[-\frac{1}{4\alpha}\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2\right] \quad (٤٥)$$

وحيث أن α مركبة يمكن كتابتها فى الصورة القطبية

$$\alpha=\frac{a^2}{4}\left(1+i\frac{2\hbar t}{ma^2}\right)=\frac{a^2}{4}\left(1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2a^4}\right)^{1/2}e^{i\theta} \quad (46)$$

حيث $\theta=\tan^{-1}\left[2\hbar t/(ma^2)\right]$ وبالتالى

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha}}=\frac{2}{a}\left(1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2a^4}\right)^{-1/4}e^{-i\theta/2} \quad (47)$$

من (٤٣) و(٤٧) فى (٤٥) نحصل على

$$\psi(x,t)=\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4}\left(1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2a^4}\right)^{-1/4}e^{-i\theta/2}e^{ik_0(x-\hbar k_0 t/2m)}\exp\left[-\frac{(x-\hbar k_0 t/m)^2}{a^2+2i\hbar t/m}\right] \quad (٤٨)$$

وحيث أن $\left|e^{-y^2/(a^2+2i\hbar t/m)}\right|^2=e^{-y^2/(a^2-2i\hbar t/m)}e^{-y^2/(a^2+2i\hbar t/m)}$, حيث $y=x-\hbar k_0 t/m$

وحيث أن $y^2/(a^2-2i\hbar t/m)+y^2/(a^2+2i\hbar t/m)=2a^2y^2/(a^4+4\hbar^2t^2/m^2)$

نجد أن

$$\left|\exp\left(-\frac{y^2}{a^2+2i\hbar t/m}\right)\right|^2=\exp\left(-\frac{2a^2y^2}{a^4+4\hbar^2t^2/m^2}\right) \quad (49)$$

أى أن

$$|\psi(x,t)|^2=\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\left(1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2a^4}\right)^{-1/2}\left|\exp\left[-\frac{(x-\hbar k_0 t/m)^2}{a^2+2i\hbar t/m}\right]\right|^2$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\gamma(t)} \exp\left\{-\frac{2}{[a\gamma(t)]^2}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2\right\} \quad (٥٠)$$

حيث $\gamma(t) = \sqrt{1 + 4\hbar^2 t^2/(m^2 a^4)}$.

رأينا أن الحزمة الموجية (٤٨) والكثافة الاحتمالية (٥٠) ظلا جاووسيتين اثناء التطور الزمنى.

وحيث أن سرعة المجموعة للجسيم $v_g = d\omega/dk = \frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)\Big|_{k_0} = \hbar k_0/m$ يمكننا كتابة المعادلة (٤٨) فى الصورة

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\Delta x(t)}} e^{-i\theta/2} e^{ik_0(x - v_g t/2)} \exp\left[-\frac{(x - v_g t)^2}{a^2 + 2i\hbar t/m}\right] \quad (٥١)$$

والكثافة الاحتمالية

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta x(t)} \exp\left\{-\frac{(x - v_g t)^2}{[2\Delta x(t)]^2}\right\} \quad (52)$$

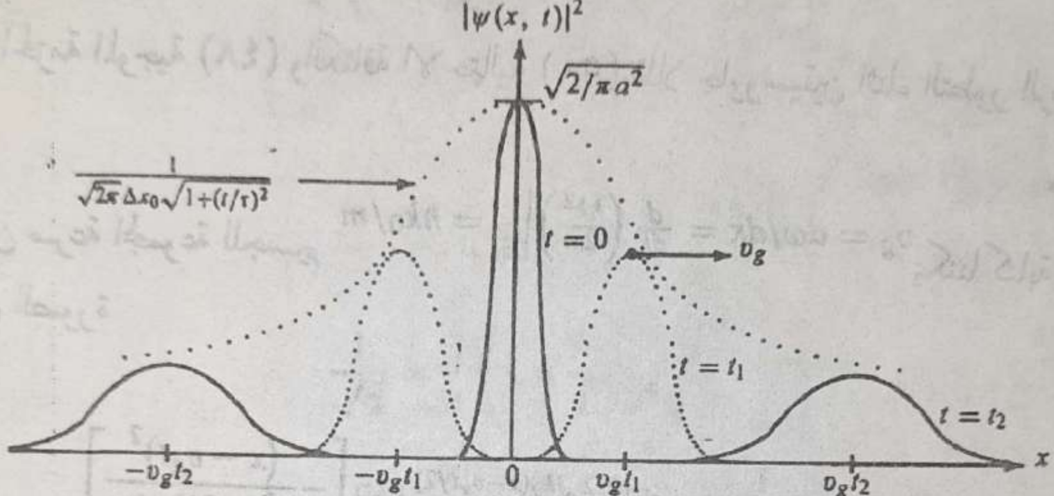
حيث

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\gamma(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \quad (٥٣)$$

يمثل اتساع الحزمة الموجية عند الزمن t.

المعادلتان (٥١) و (٥٢) تمثلان حزمة موجية جاووسية مركزها عند $x = v_g t$ حيث تتحرك قمتها بسرعة المجموعة $v_g = \hbar k_0/m$ ويزداد اتساعها Δx خطيا مع الزمن. أى أنه أثناء التطور الزمنى للحزمة الموجية يتغير موضع مركزها من $x = 0$ إلى $x = a/2$ ويتمدد اتساعها من $\Delta x_0 = a/2$ إلى $\Delta x(t) = \Delta x_0 \sqrt{1 + 4\hbar^2 t^2/(m^2 a^4)}$. أى أن الحزمة الموجية تنتشر انتشارا مشوها بالرغم من أنها تظل جاووسية: يزداد اتساعها خطيا مع الزمن بحيث ارتفاعها $1/(\sqrt{2\pi}\,\Delta x(t))$ يقل مع مرو الزمن كما هو

موضح بشكل (٤)، والذى يوضح أن الحزمة الموجية اتساع كبير جدا وسعة صغيرة جدا عند الزمن $-\infty \to t$ اصبح اتساعها أضيق وأضيق وسعتها أكبر وأكبر كلما مر الزمن اتجاه $t = 0$؛ حيث عند $t = 0$؛ تكون الحزمة المجية محددة الموضع بشكل بشكل تام تقريبا، حيث يعطى اتسعها وسعتها من $\Delta x_0 = a/2$ و $\sqrt{2/\pi a^2}$ على الترتيب.



شكل (٤)

لنعد لعلاقة عدم التحديد $\Delta x(t)\Delta p(t)$ وكيف تتأسر بالتطور الزمنى للحزمة الموجية.

أولا يجب ان نعلم أن متوسط كمية التحرك للحزمة $\hbar k_0$ وكذلك عدم التأكيد لها $\hbar \Delta k$ لا يتغيران مع الزمن. هذا يمكن فهمة بسهولة كالآتى:

بكتابة المعادلة (٤١) فى الصورة:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k,0) e^{i(kx-\omega t)} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k,t) e^{ikx} dk \qquad (٥٤)$$

نحصل على

$$\phi(k,t) = e^{-i\omega(k)t} \phi(k,0) \qquad (٥٥)$$

حيث $\phi(k,0) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$ وبالتالى

$$|\phi(k,t)|^2 = |\phi(k,0)|^2 \qquad (56)$$

وهذا يعنى أن اتساع كل من $\phi(k,t)$ و $\phi(k,0)$ متساويان، وبالتالى فإن الاتساع Δk يظل ثابتا وبالتالى التساع فى كمية التحرك Δp. وحيث أن التساع فى $\phi(k,0)$ يساوى $\Delta k = 1/a$ نجد أن

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \frac{\hbar}{a} \qquad (57)$$

بضرب تلك العلاقة فى المعادلة (٥٣) نحصل على

$$\Delta x(t)\Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2}{m^2 a^4} t^2} \qquad (58)$$

والذى يعنى أن $\Delta x(t)\Delta p \geq \hbar/2$ تتحقق عند أى لحظة زمنية. عند $t = 0$ نجد أن $\Delta x_0 \Delta p = \hbar/2$ وهى علاقة عدم التحديد المستنتجة سابقا. أما بزيادة الزمن نحصل على اللامتساوية $\Delta x(t)\Delta p > \hbar/2$. من هنا نجد أنه فى فراغ كمية التحرك أن الاتساع فى الحزمة الموجية لا يتشتت. الآن نثبت تشتت اتساع الحزمة الموجية فى فراغ الموضع. حيث أن $\Delta x_0 = a/2$ يمكننا كتابة المعادلة (٥٣) فى الصورة

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} = \Delta x_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\delta x_{cl}(t)}{\Delta x_0}\right)^2} \qquad (59)$$

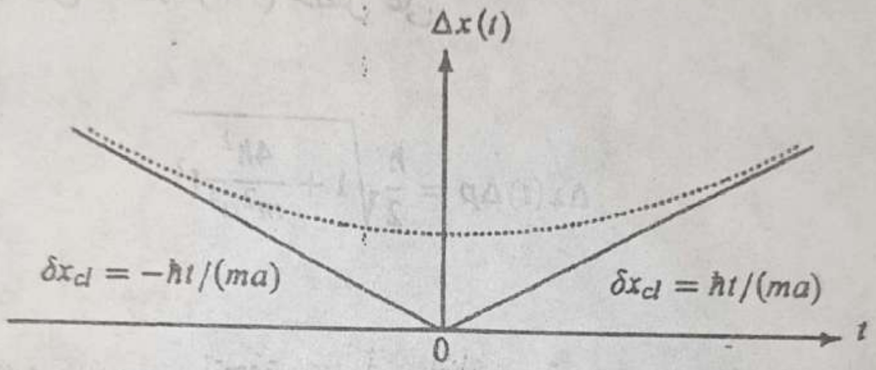
حيث يعطى معامل التشتت $\delta x_{cl}(t)/\Delta x_0$ من

$$\frac{\delta x_{cl}(t)}{\Delta x_0} = \pm \frac{2\hbar}{ma^2} t = \pm \frac{\hbar}{2m\,\Delta x_0^2} t \qquad (60)$$

كما هو مبين من شكل (٥) عندما يكون الزمن t أى أن $t \to \infty$ نجد أن $\Delta x(t) \to \delta x_{cl}(t)$ حيث

$$\delta x_{cl}(t) = \pm\frac{\hbar t}{ma} = \pm\frac{\Delta p}{m}t = \pm\Delta v t \qquad (61)$$

حيث $\Delta v = \hbar/m$ تمثل التشتت فى السرعة. هذا يعنى أنه إذا بدأ الجسيم من موضع $x = 0$ عند الزمن $t = 0$ بتشتت فى السرعة مساويا Δv فإن Δv تظل ثابتة بينما التشتت فة موضع الجسيم يزداد خطيا مع الزمن $\delta x_{cl}(t) = \hbar|t|/ma$، انظر شكل (٥).



شكل (٥) التطور الزمنى لاتساع الحزمة الموجية $\Delta x(t) = \Delta x_0\sqrt{1 + (\delta x_{cl}(t)/\Delta x_0)^2}$ (المنحنى المنقط)، للقيم الكبيرة للزمن نجد أن $\Delta x(t)$ تقترب من $\delta x_{cl}(t)$ وعندما $t = 0$ نجد أن

$$\Delta x(0) = \Delta x_0 = a/2$$

تمرين (٧): يعطى التردد الزاوى لموجات سطح سائل بدلالة العدد الموجى k من $\omega = \sqrt{gk + Tk^3/\rho}$، حيث g عجلة الجاذبية الأرضية، ρ كثافة السائل، T قوة الإجهاد المؤثرة على عنصر السطح من السائل. احسب سرعة الطور وسرعة المجموعة للحالات المحدودة الآتية عندما تكون موجة السطح لها: (١) طول موجى كبير جدا (٢) طول موجى صغير جدا.

تمرين (٨): احسب الحجم الدقيق لحزمة موجية الممثلة لجسيم حر بعد الحركة لمسافة ١٠٠ متر للحالات الآتية عندما يكون الجسيم:

(١) إلكترون طاقته ٢٥ إلكترون فولت له حزمة موجية اتساعها 10^{-6} متر

(٢) إلكترون طاقته ٢٥ إلكترون فولت له حزمة مواجية اتساعها 10^{-8} متر

(٣) إلكترون طاقته ١٠٠ إلكترون فولت له حزمة موجية اتساعها ١ ملليمتر
(٤) جسيم وزنه ١٠٠ جرام حجمه ١ سم يتحرك بسرعة ٥٠ متر/ثانية
(٥) قدر الزمن المطلوب للحزمة الموجية للإلكترون فى (١) وللجسيم فى (٤) لكة تتسع من ١٠ ملليمتر و ١٠ سم على الترتيب. اشرح ما حصلت عليه من نتائج

تمرين (٩): لنيوترون مقيد فى حجم 10^{-14} متر. احسب الزمن المطلوب لحزمته الموجية كى تنتشر
(١) اربعة اضعاف حجمها الأصلى
(٢) بحجم مساويا لقطر الأرض
(٣) بحجم مساويا للمسافة بين الأرض والقمر

تمرين(١٠): استخدم مبدأ عدم التحديد لتقدير
(أ): نصف قطر الحالة الأرضية لذرة الهيدروجين
(ب): طاقة الحالة الأرضية لذرة الهيدروجين

تمرين (١١): إذا كان لدينا كوكبين لهما الكتلة m يتحركان داخل الجهد $V(r) = kr$ حيث k مقدار ثابت
(أ): باستخدام نموذج بوهر، أوجد السرعة و نصف القطر و طاقة النظام فى حالة المدارات الدائرية. عين أيضا التردد الزاوى للإشعاع الناتج من انتقال النظام من حالة الطاقة n للحالة m.
(ب): احسب القيم العددية للسرعة و نصف القطر والطاقة للحالة الأرضية $n = 1$، حيث تساوى كتلة الكوكب فى هذه الحالة $mc^2 = 2 \quad GeV$ والثابت $k = 0.5 \quad GeV \ fm^{-1}$.

تمرين (١٢): احسب اتساع الحزمة الموجية لجسيم كتلته ٨٠ جرام إذا تحرك لمدة ٢٠ ثانية إذا كان حجمه مساويا ٢ سم.

تمرين (١٣): فى تمرين(٣) احسب عدم التأكيد فى كل من x و k ثم احسب حاصل ضرب عدم التأكيد $\Delta x \Delta p$.

تمرين (١٤): لسلسلة عديمة المرونة لها كثافة خطية μ (الكتلة لكل وحدة طول). إذا أثر على السلسلة قوة إجهاد T، وُطى التردد الزاوى لموجات السلسلة بدلالة العدد الموجى k بالعلاقة $\omega = k\sqrt{T/\mu}$. احسب سرعتى المجموعة والطور لموجات السلسلة.

تمرين (١٥): يعطى التردد الزاوى لموجة تنتشر داخل موجه موجمة بدلالة العدد الموجى k و الاتساع b للموجة الموجمة بالعلاقة $\omega = kc/\sqrt{1-\pi^2/(b^2k^2)}$. احسب سرعتى المجموعة والطور للموجة المنتشرة.

تمرين (١٦): اثبت أنه للموجات التى لها التردد الزاوى ω والعدد الموجى k يحققان علاقة التشتت $k^2c^2 = \omega^2 + const.$، حاصل ضرب سرعتى المجموعة والطور يساوى c^2، $v_g v_{ph} = c^2$ حيث c سرعة الضوء.

الباب الثانى

المتذبذب التوافقى الخطى:

سوف ننهى هذا الفصل بمناقشة مستويات الطاقة والدوال الموجية لجسيم يتحرك فى جهد متذبذب توافقى. الجهد المتذبذب التوافقى يعتبر مثالاً هاماً لأن كثير من الظواهر الطبيعية مثل الاهتزازات الداخلية للجزيئات وحركة الذرات داخل المواد الصلبة يمكن وصفها باستخدامه. أيضا يقدم تطبيق الطريقة سلسلة من الحلول للمعدلات التفاضلية والتى تستخدم كتنكنك سوف يستخدم مرة أخرى فى الفصول التالية عندما نستخدم النظام فى ثلاثة أبعاد.

من المعروف جيداً من الميكانيكا الكلاسيكية أن القوة المخزنة والتى تتناسب مع المسافة من موضع الاتزان، $F=-Cx$، تؤدى إلى حركة توافقية بسيطة. مثل هذه القوة يمكن اشتقاقها من الجهد:

$$V=\frac{C\,x^2}{2} \qquad (٦٢)$$

وذلك من العلاقة بين الجهد والقوة

$$\frac{dV}{dx}=-F \qquad (٦٣)$$

وتكون معادلة الحركة فى البعد الواحد للمتذبذب التوافقى الكلاسيكى فى الصورة:

$$E=\frac{M\,\mathrm{v}^2}{2}+\frac{C\,x^2}{2}\,. \qquad (٦٤)$$

لنلاحظ هذا النظام نتخيل كتلة M مثبتة بين سلسلتين تحقق قانون هوك . يمكننا البحث عن حل لهذه المعادلة فى الصورة:

$$x=A\sin(\omega t) \qquad (٦٥)$$

الآن سوف نعين الثوابت كلآتى:

$$E = \frac{M A^2}{2}\omega^2 \cos^2(\omega t) + \frac{C A^2}{2}\sin^2(\omega t) \tag{٦٦}$$

أو

$$\frac{2E}{C A^2} = \frac{M \omega^2}{C \text{v}}\cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t) \tag{٦٧}$$

المتساوية تتحقق فقط عندما:

$$\omega^2 = \frac{C}{M} \quad and \quad A^2 = \frac{2E}{C} \tag{٦٨}$$

ومنها نحصل على الحل فى الصورة:

$$x(t) = \sqrt{\frac{2E}{C}}\sin(\sqrt{\frac{C}{M}}\,t) \tag{٧٩}$$

أو بمعنى آخر فإن المتذبذب التوفقى الكلاسيكى فى بعد واحد يمكن ان يكون له أى سعة، وبناءاً عليه أى طاقة كلية ولكن بتردد واحد:

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{M}} \tag{٧٠}$$

الآن كيف تعمل الميكانيكا الكمية، لنكتب معادلة شرودنجر فى بعد واحد لهذا المتذبذب ثم نتابع ما يحدث. معادلة شرودنجر للمتذبذب التوافقى الخطى الذى له الطاقة الكلية من المعادلة (٦٤) هى:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2 u}{d x^2} + \frac{\omega^2 M x^2}{2} u = E u \tag{٧١}$$

حيث استخدمنا هنا العلاقة $\omega^2 = C/M$، ولتبسيط المعادلة (٧١) يمكننا إعادة كتابتها فى الصورة:

$$-\frac{\hbar}{M\omega}\frac{d^2 u}{d x^2}+\frac{\omega M x^2}{\hbar}u=\frac{2Eu}{\hbar\omega}=\lambda u \qquad (٧٢)$$

حيث $\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$ ، المعادلة الأخيرة سوف تكون أبسط إذا استخدمنا التعويض $x=y\sqrt{\hbar/M\omega}$ ، إذن يكون لدينا:

$$-\frac{d^2 u}{d y^2}+y^2 u=\lambda u \qquad (٧٣)$$

أو

$$\frac{d^2 u}{d y^2}+(\lambda-y^2)u=0 \qquad (٧٤)$$

مما يبدو أن المعادلة (٧٤) ليس من السهولة بمكان حلها. ولكن يمكن ملاحظة أن لقيم x الكبيرة جداً يكون $\lambda u << y^2 u$ ، لذلك تصبح معادلة شرودنجر فى الصورة:

$$\frac{d^2 u_\infty}{d y^2}=y^2 u_\infty \qquad (٧٥)$$

وذلك بإهمال المقدار λu ولكى نحصل على الحل لقيم x الكبيرة نتبع الآتى:
ضرب المعادلة (٧٥) فى المقدار $2\frac{du_\infty}{dy}$ لنحصل على:

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{du_\infty}{dy}\right)^2-y^2\frac{d}{dy}u_\infty^2=0 \qquad (٧٦)$$

$$\frac{d}{dy}\left(\left(\frac{du_\infty}{dy}\right)^2-y^2u_\infty^2\right)=-2y\,u_\infty^2 \qquad (٧٧)$$

المعادلة (٧٧) يمكن تبسيطها بصورة أكبر إذا جعلنا المقدار $y u_\infty^2$ صغيراً بحيث يمكن إهماله، لنحصل عليها فى الصورة:

$$\frac{d}{dy}\left((\frac{du_\infty}{dy})^2 - y^2 u_\infty^2 \right) = -2y u_\infty^2 \cong 0 \qquad (٧٨)$$

بإجراء التكامل على المعادلة الأخيرة نحصل على نتيجة التكامل فى الصورة:

$$\frac{du_\infty}{dy} = \sqrt{G + y^2 u_\infty^2} \qquad (٧٩)$$

حيث G ثابت التكامل. وحيث أنه مما سبق أن u_∞ و $\frac{du_\infty}{dy}$ تئولان إلى الصفر عندما تئول y إلى مالانهاية، نجد أن G تئول إلى الصفر، وبالتالى نحصل على (٧٩) فى صورتها النهائية:

$$\frac{du_\infty}{dy} = \pm y u_\infty \qquad (٨٠)$$

أو الصورة:

$$\frac{1}{u_\infty}\frac{du_\infty}{dy} = \pm y \qquad (٨١)$$

وبالتكامل البسيط نجد أن:

$$u_\infty = e^{-y^2/2} \qquad (٨٢)$$

هذا الحل يسمى الحل التقريبى لمعادلة شرودنجر (٧١)، حيث أهملنا الأس الموجب $e^{+y^2/2}$، كحل غير مقبول لأنه يتباعد عندما $y \to \infty$.

الآن لنكن راضين أن التقريب الذى تم للمعادلة (٨٧) قد تم ضبطه، حيث أن الحد $2y u_\infty^2$ بالفعل أصغر من الحدود التى تم الإبقاء عليها.

باشتقاق معامل المقدار $e^{-y^2/2}$ من الدوال الذاتية $u(y)$ وبالتعويض عن

$$u(y) = e^{-y^2/2} f(y) \qquad (٨٣)$$

فى المعادلة (٧١) آملين أن يبسط ذلك المشكلة، نجد أن:

$$\frac{d^2u}{dy^2} = e^{-y^2/2}[-f(y) - 2y f'(y) + f''(y) + y^2 f(y)] \qquad (84)$$

بالتعويض عن المعادلتين (٨٣) و(٨٤) فى (٧١) نحصل على:

$$\lambda f(y) = f(y) + 2y f'(y) - f''(y) - y^2 f(y) + y^2 f(y) \qquad (85)$$

أو

$$f''(y) - 2y f'(y) + f(y)(\lambda - 1) = 0 \qquad (٨٦)$$

$$\lambda = 2n + 1, \qquad n = 0, 1, 2, ... \qquad (٨٧)$$

باستخدام المعادلة (٨٧) وقيمة λ المعرفة بالمقدار $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ نجد أن قيم الطاقة التى يسمح بها المتذبذب التوافقى الكمى قد تم تكميمها، من ذلك يمكن الحصول على قيم الطاقة كالآتى:

$$E = E_n = \frac{1}{2}\hbar\,\omega\,\lambda = \hbar\,\omega(n + \tfrac{1}{2}), \qquad n = 0, 1, 2, ... \qquad (88)$$

مما سبق نجد أن كثيرة الحدود التى تم اشتقاق معاملاتها تدعى **الدوال الهرميتية**، والمعرفة بالدالة $f(y) = H_n(y)$ ، والتى تناظر القيم الذاتية للطاقة E_n المعرفة بالمعادلة (٨٨)، وبذلك نحصل على الدالة الذاتية غير المتعايرة فى الصورة:

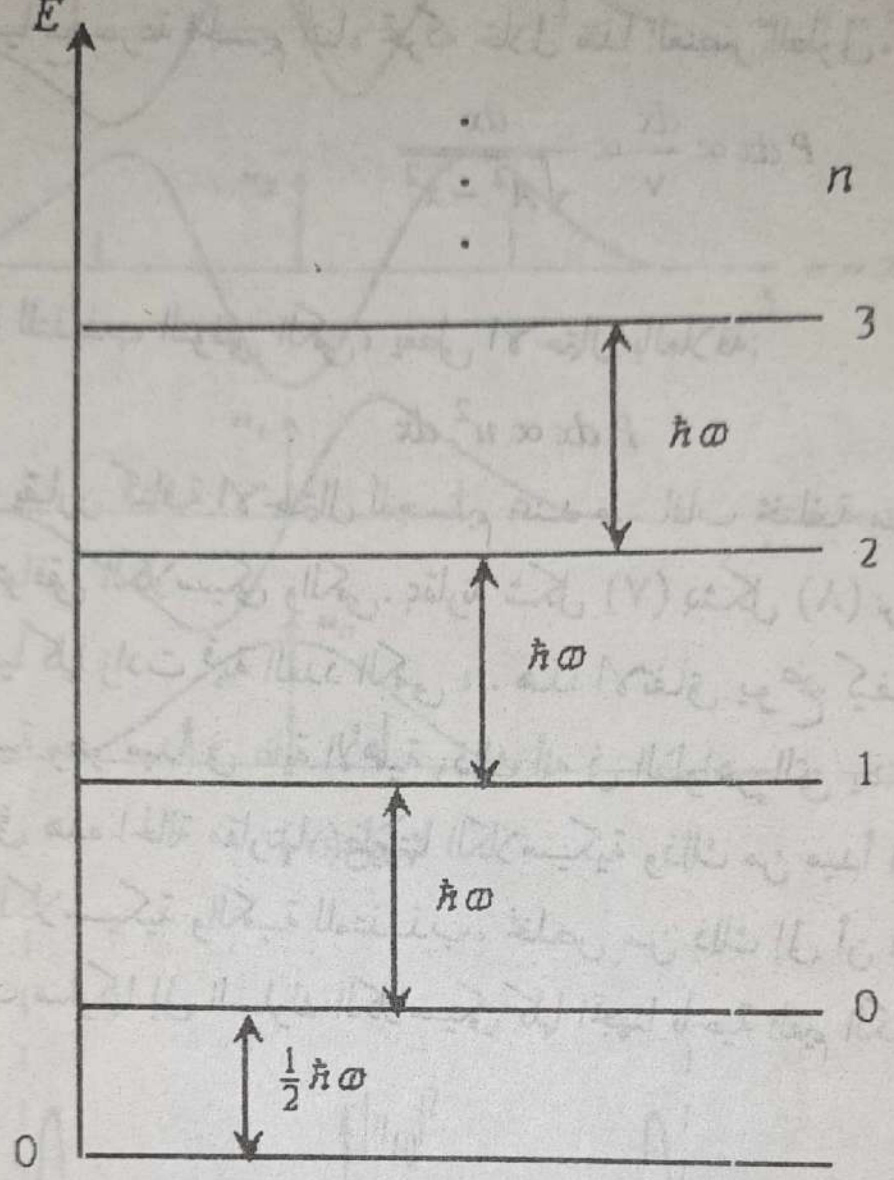
$$u_n(y) = H_n(y)\, e^{-y^2/2} \qquad (٨٩)$$

فى الأجزاء الآتية سوف نتعرف أكثر على **الدوال الهرميتية**، ولكن دعنا أولاً نتعرف على بعض الملاحظات على القيم الذاتية للمتذبذب التوافقى الكمى:

١) تفصل بين مستويات الطاقة (شكل ٦) مسافات متساوية. وهذه الخاصية مما يميز الأطياف المعملية لبعض جزيئات وأنوية المواد، وبذلك نجد أن المتذبذب التوافقى الكمى يمثل نموذجا جيداً لوصف هذه الأطياف إلى حد أن الأطياف يشار إليها كأطياف تذبذبية. أيضاً يوجد أشكال من الإثارة فى المواد الصلبة تدعى فونونات (*phonons*) والتى تقع تحت نفس التصنيف.

٢) لكل قيمة ذاتية، يوجد فقط دالة ذاتية واحدة، وهذه الخاصية من المميزات الشائعة للحالات المحدودة الدالة الجهد أحدية البعد والتى تظل محدودة للقيم المحدودة للمتغير x.

٣) لكل $n = 0$، المسماه بالحالة الأرضية، طاقة المتذبذب تكون $\frac{1}{2}\hbar\omega$، والتى تمثل الطاقة الصفرية للمتذبذب. وذلك كحالة الجسيم المقيد بصندوق أحادى البعد (والذى تعرضنا له فى الباب الثانى سكشن ٢.٢) والذى ظهرت طاقته الصفرية كنتيجة لمبدأ عدم التحديد.



شكل (٦)

٤) لأن الدوال الهرميتية التى تناظر القيمة الذاتية المناظرة للعدد الكمى n هى دوال من الدرجة النونية، يتبع ذلك أن دوال المتذبذب الذاتية لها عددْ n من العقد. ويجب أن نلاحظ كيف أن عدد العقد يزيد كلما زادت الطاقة شكل (٧). وهذا يمكن فهمه بسهولة، وذلك لأن طاقة التحرك تتناسب انحناء أو تقوس الدالة الموجية (d^2u/dx^2). وهذا يعنى أنه، كلما زاد الانحناء (أى أن، كلما زاد انثناء الدالة الموجية خلفاً أو أماماً، لكى تصل للصفر)، كلما زادت طاقة التحرك.

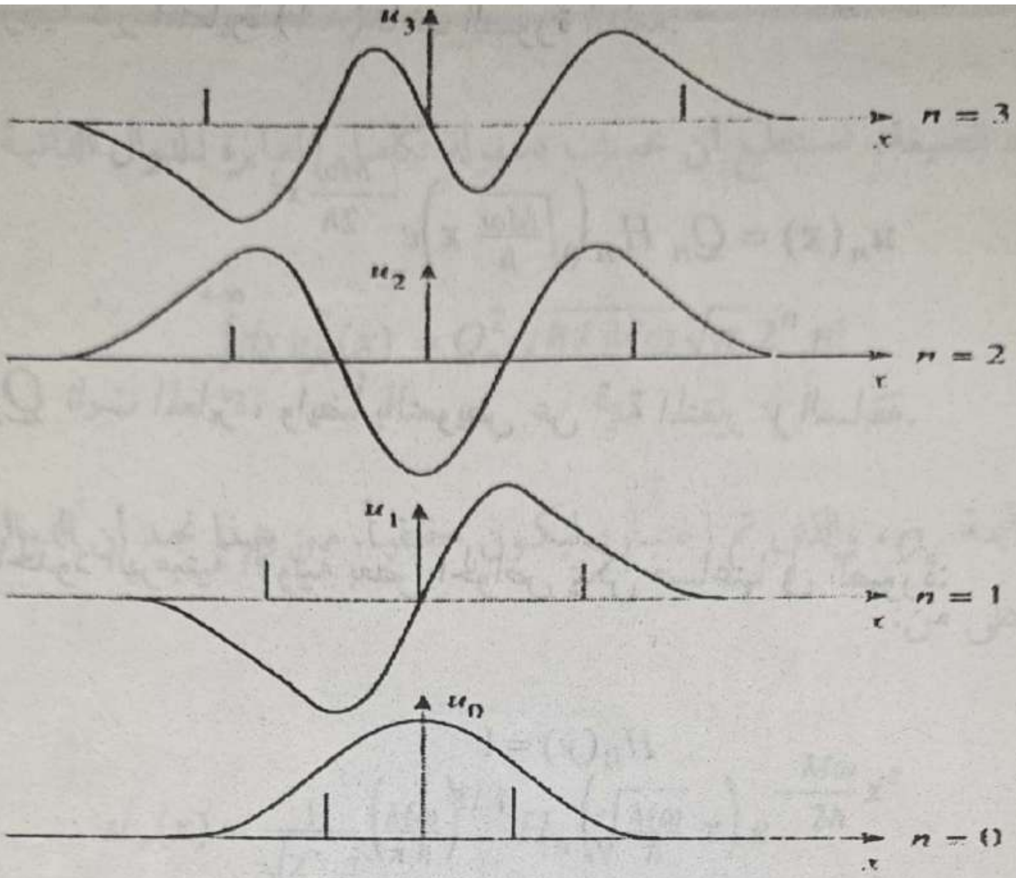
٥) في حالة المتذبذب التوافقى الكلاسيكى، يتناسب احتمال تواجد الجسيم فى عنصر الطول dx عكسياً مع سرعة الجسيم أثناء تحركه خلال هذا العنصر الطولى، أى:

$$P\,dx \propto \frac{dx}{v} \propto \frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}} \qquad (٩٠)$$

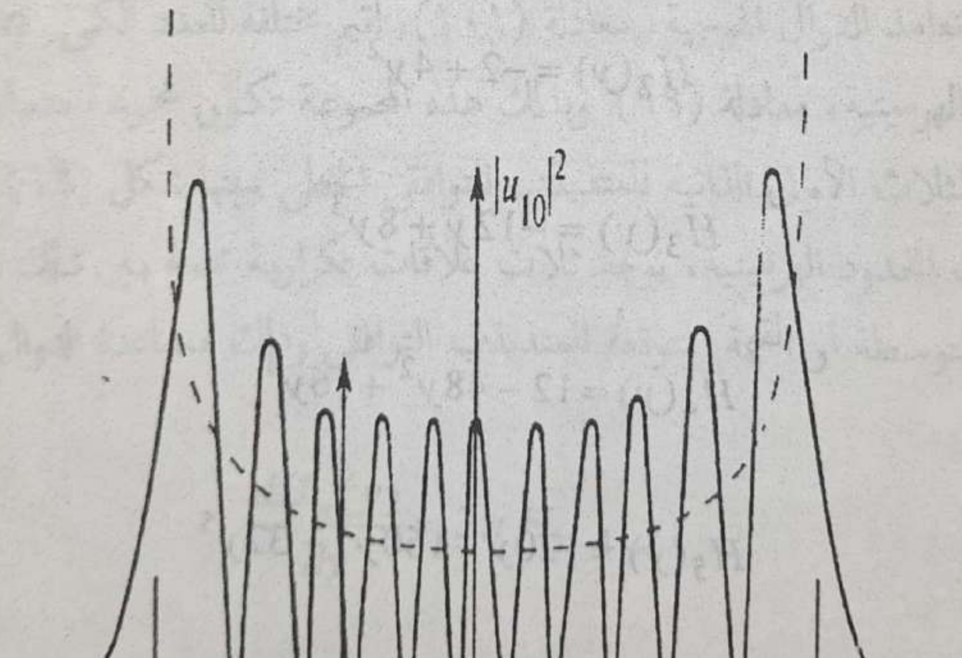
أما بالنسبة للتذبذب التوفقى الكمى، يعطى الاحتمال بالعلاقة:

$$P\,dx \propto u^2\,dx \qquad (٩١)$$

شكل (٨) يقارن كثافة الاحتمال للجسيم عند مسافات مختلفة من نقطة الأصل فى حالتى المتذبذب التوافقى الكلاسيكى والكمى. بمقارنة شكل (٧) بشكل (٨) نرى أن الاتفاق بين الحالتين يتطور تدريجيا كلما زادت قيمة العدد الكمى n. هذا الاتفاق يوضح كيف يعمل **مبدأ التناظر** فى الميكانيكا الكمية وهو مبدأ فى غاية الأهمية وذلك أنه فى الظواهر التى يصعب تفسيرها من الناحية الكمية يمكن فى هذه الحالة مقارنتها بنظيرتها الكلاسيكية وذلك من **مبدأ التناظر**. عودة إلى المقارنة بين الحالتين الكلاسيكية والكمية للمتذبذب، نخلص من ذلك إلى أن الأنظمة الكمية، فى الحالة العامة، يتقارب سلوكها إلى السلوك الكلاسيكى كلما اتجهنا ناحية القيم الكبيرة للعدد الكمى n.



شكل(٧)



شكل(٨)

دعنا الآن نقوم باختبار الدالة ا.وجية من منظور أقرب قليلاً.

الدالة الموجية غير المتعايرة (٨٩) تأخذ الصورة العامة:

$$u_n(x) = Q_n \, H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2} \qquad (٩٢)$$

حيث Q_n ثابت المعايرة، وايضاً بالتعويض عن قيمة المتغير y السابقة.

لكثيرات الحدود الهرميتية الأولية بعض الخواص يمكن صياغتها فى الصورة:

$$H_0(y) = 1 \qquad (٩٣)$$

$$H_1(y) = 2y \qquad (٩٤)$$

$$H_2(y) = -2 + 4y^2 \qquad (٩٥)$$

$$H_3(y) = -12y + 8y^3 \qquad (٩٦)$$

$$H_4(y) = 12 - 48y^2 + 16y^4 \qquad (٩٧)$$

$$H_5(y) = 120y - 160y^3 + 32y^5 \qquad (٩٨)$$

كثيرات الحدود الهرميتية تحقق الصيغة التكاملية الآتية:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, H_n(y)\, H_m(y)\, e^{-y^2} = \sqrt{\pi}\, 2^n\, n!\,\delta_{nm} \qquad (٩٩)$$

وبمساعدة هذه الصيغة، نستطيع أن نحسب بسهولة تكامل المعايرة للدوال الذاتية المعطاة بالمعادلة (٩٢):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, u_n^2(x) = Q_n^2 \sqrt{\hbar / M\omega}\, \sqrt{\pi}\, 2^n\, n! \qquad (١٠٠)$$

والذى يحدد قيمة Q_n، والذى تم اختياره ليكون حقيقياً. من هذا نجد أن الدوال الذاتية المتعايرة للمتذبذب تعطى من:

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} x^2} \qquad (١٠١)$$

من هنا نجد أن تعامد الدوال الموجية، معادلة (١٠١)، لقيم مختلفة للعدد الكمى n ينتج من تعامد كثيرات الحدود الهرميتية، معادلة (٩٩). وبذلك هذه المجموعة تكون مجموعة متعايرة ومتعامدة من الدوال. الدوال الثلاث الأولى الذاتية للمتذبذب التوافقى الخطى يبينها شكل (١٦).
بالنسبة لكثيرات الحدود الهرميتية، يوجد ثلاث علاقات تكرارية مهمة بين تلك الدوال وهى مهمة لحساب القيمة المتوسطة أو القيمة المتوقعة للمتذبذب التوافقى وذلك بمساعدة الدوال الذاتية له، وفيما يلى نوضحها:

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2n\, H_{n-1}(y) \qquad (١٠٢)$$

$$2y\, H_n(y) = H_{n+1}(y) + 2n\, H_{n-1}(y) \qquad (١٠٣)$$

$$y\, H_n(y) = nH_{n-1}(y) + \tfrac{1}{2}\, H_{n+1}(y) \qquad (١٠٤)$$

من خواص الدالة الهرميتية (٩٣-٩٨) وعلاقتها بالدالة الموجية (١٠١) نجد أن:

$$u_n(x) = \frac{\gamma}{\sqrt{2^n n!}} H_n \qquad (١٠٥)$$

حيث

$$\gamma = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2} = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\mu^2} \qquad (١٠٦)$$

حيث $\mu = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\, x$ ، ومنها نجد أن:

$$\begin{aligned} u_{n-1}(x) &= \frac{\gamma}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)!}} H_{n-1} \\ &= \sqrt{2n}\, \frac{\gamma}{\sqrt{2^n n!}} H_{n-1} \end{aligned} \qquad (١٠٧)$$

$$\begin{aligned} u_{n+1}(x) &= \frac{\gamma}{\sqrt{2^{n+1}(n+1)!}} H_{n+1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} \frac{\gamma}{\sqrt{2^n n!}} H_{n+1} \end{aligned} \qquad (١٠٨)$$

أى أن:

$$\gamma H_n = \sqrt{2^n n!}\; u_n \qquad (١٠٩)$$

$$\gamma H_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{2n}} \sqrt{2^n n!}\; u_{n-1} \qquad (١١٠)$$

$$\gamma H_{n+1} = \sqrt{2(n+1)}\sqrt{2^n n!}\; u_{n+1} \qquad (١١١)$$

بالتعويض من المعادلات (١١٠-١١١) فى المعادلة (١٠٣) مع استبدال المتغير y بالمتغير μ نحصل على:

$$\mu u_n = \frac{n}{\sqrt{2n}} u_{n-1} + \frac{1}{2}\sqrt{2(n+1)}\, u_{n+1} \tag{١١٢}$$

أى أن:

$$\mu u_n = \sqrt{n/2}\; u_{n-1} + \sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\, u_{n+1} \tag{١١٣}$$

بالمثل العلاقة (١٠١) يمكن وضعها فى الصورة:

$$u_n = R\, e^{-\frac{1}{2}\mu^2} H_n \tag{١١٤}$$

حيث

$$R = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}}\left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \tag{١١٥}$$

بتفاضل المعادلة (١١٤) بالنسبة للمتغير μ نجد أن:

$$u_n' = \frac{\partial u_n}{\partial \mu} = R\, e^{-\frac{1}{2}\mu^2}\,(H_n' - \mu\, H_n) \tag{١١٦}$$

وباستخدام العلاقة (١٠٢أ) نحصل على:

$$u_n' = R\, e^{-\frac{1}{2}\mu^2}\,(2n\, H_{n-1} - \mu\, H_n) \tag{١١٧}$$

وباستخدام العلاقة (١٠٤) نحصل على:

$$u_n' = R\, e^{-\frac{1}{2}\mu^2}\,(2n\, H_{n-1} - n\, H_{n-1} - \tfrac{1}{2} H_{n+1})$$

$$= R\, e^{-\frac{1}{2}\mu^2} (n H_{n-1} - \tfrac{1}{2} H_{n+1})$$

$$= \frac{\gamma\, n}{\sqrt{2^n\, n!}} H_{n-1} - \frac{\gamma}{2\sqrt{2^n\, n!}} H_{n+1}) \qquad (١١٨)$$

وباستخدام العلاقات (١١٠) و (١١١) نحصل على:

$$u'_n = \sqrt{n/2}\, u_{n-1} - \sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\, u_{n+1}) \qquad (١١٩)$$

من العلاقتين (١١٣) و (١١٩) بالجمع ثم بالطرح نحصل على:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\mu + \frac{\partial}{\partial \mu}) u_n = \sqrt{n}\, u_{n-1} \qquad (١٢٠)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\mu - \frac{\partial}{\partial \mu}) u_n = \sqrt{(n+1)}\, u_{n+1} \qquad (١٢١)$$

وبإدخال المؤثر $\hat{p}_\mu = -i \frac{\partial}{\partial \mu}$ ، والذى يرتبط بمؤثر كمية التحرك $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ بالعلاقة $\hat{p}_x = \sqrt{\hbar M \omega}\;\hat{p}_\mu$ تصبح العلاقات (١٢٠) و (١٢١) فى الصورة:

$$\hat{a}\, u_n = \sqrt{n}\, u_{n-1} \qquad (١٢٢)$$

$$\hat{a}^+ u_n = \sqrt{(n+1)}\, u_{n+1} \qquad (١٢٣)$$

حيث يعطى المؤثرين $\hat{a}, \hat{a}^+$ من:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu + \frac{\partial}{\partial\mu}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu + i\,\hat{p}_\mu) \qquad (١٢٤)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu - \frac{\partial}{\partial\mu}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu - i\,\hat{p}_\mu) \qquad (١٢٥)$$

وباستخدام العلاقتين (١٢٢) و (١٢٣) يمكن بالتأثير المتتالى بالمؤثر $\hat{a}^+$ على الدالة u_0 لأدنى منزلة الحصول على الدالة الموجية u_n فى الصورة:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n\; u_0 \qquad (١٢٦)$$

ملاحظة: العلاقة السابقة بين مؤثر كمية التحرك $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ والمؤثر $\hat{p}_\mu = -i\frac{\partial}{\partial\mu}$ يمكن الحصول عليها كالآتى:

حيث أن $\mu = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\,x$ نجد أن:

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\mu}\frac{d\mu}{dx} = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\mu} \qquad (١٢٧)$$

بضرب طرفى المعادلة السابقة فى $-i\hbar$ نحصل على المطلوب.

يلاحظ أنه يمكن الحصول على الدالة الموجية u_0 من الشرط $\hat{a}u_0 = 0$، أى بحل المعادلة:

$$(\mu + \frac{\partial}{\partial\mu})u_0 = 0 \qquad (١٢٨)$$

فى الصورة:

$$u_0 = R_0\ e^{-\frac{1}{2}\mu^2} \qquad (١٢٩)$$

حيث R_0 يتحدد من شرط المعايرة فى الصورة:

$$R_0 = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \qquad (١٣٠)$$

وباستخدام الصيغتين (١٢٢) و (١٢٣) فإنه بالتأثير المتتالى نحصل على:

$$\hat{a}\,\hat{a}^+\,u_n = (n+1)\,u_n \qquad (١٣١)$$

$$\hat{a}^+\hat{a}\ u_n = n\,u_n \qquad (١٣٢)$$

وبذلك تأخذ علاقة التبديل بينهما الصورة:

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

$$= (n+1)\,u_n - n\,u_n = (1)\,u_n = u_n \qquad (١٣٣)$$

أى أن:

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}]=1 \qquad (١٣٤)$$

ومن العلاقات (١٢٤) و (١٢٥) التى تحدد المؤثرات $\hat{a},\hat{a}^{+}$ نجد أن:

$$\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a}=\mu^{2}+\hat{p}_{\mu}^{2}=2n+1 \qquad (١٣٥)$$

وعندئذ فإن مؤثر هاملتون يأخذ الصورة:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_{x}^{2}}{2M}+\frac{M\omega^{2}}{2}x^{2}=\frac{\hbar\omega}{2}(\mu^{2}+\hat{p}_{\mu}^{2})$$
$$=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a}) \qquad (١٣٦)$$

واضح أن من (١٣١) و (١٣٢) أن القيم الخاصة لحاصل ضرب المؤثرين $\hat{a}\hat{a}^{+},\hat{a}^{+}\hat{a}$ تساوى على الترتيب $n+1,\ n$، وبذلك فإنه يمكن حساب القيم الخاصة لمؤثر هاملتون للمتذبذب التوافقى فى الصورة:

$$\hat{H}=\hat{E}_{n}=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a})$$

$$=\frac{\hbar\omega}{2}(2\hat{n}+1)=\hbar\omega(\hat{n}+1/2) \qquad (١٣٧)$$

تمرين(١٧): تشير القيم الذاتية لجزئ ما إلى ان الجزيء عبارة عن متذبذب توافقى أحادى البعد. عند التحول من حالة الإثارة الأولى إلى الحالة الأرضية، يشع الجزيء فوتون طاقته تساوى $h\nu=0.1\text{eV}$. بفرض أن الجزء المتذبذب من الجزيء

عبارة عن بروتون، احسب احتمال أن الجزىء يبعد مسافة من نقطة الأصل رُبما يكون ممنوعاً بالمعالجة الكلاسيكية.

تمرين(١٨): لمتذبذب توافقى بسيط احادى البعد كجسيم يتحرك تحت تاثير القوة $f(x) = -m\omega^2 x$. من الناحية الكلاسيكية، أقل قيمة لطاقة المتذبذب (طاقة الحالة الأرضية) تساوى الصفر، وذلك لأننا يمكن أن نضعه بدقة عند الموضع $x = 0$ ؛ وهى نقطة اتزان الموضع، وهى تعطى القيمة الصفرية لسرعته الابتدائية. من الناحية الكمية، فإن مبدأ عدم التحيح لايسمح لنا بتعيين موضع المتذبذب بدقة وفى نفس الوقت ليكون فى حالة السكون. باستخدام مبدأ عدم التحديد قدر طاقة الحالة الأرضية الكمية (أقل قيمة طاقة للمتذبذب الكمى) .

الباب الثالث

معادلة شرودنجر فى ثلاثة أبعاد وتطبيقاتها

فى الباب السابق رأينا أن معادلة شرودنجر للجسيم فى جهد وحيد البعد، لها حلول فيزيائية مقبولة فقط لقيم منفصلة من الطاقة الكلية. علاوة على ذلك، فى حالة الإلكترون فى بئر جهدى له أبعاد ذرية، تكون المسافات البينية بين مستويات الطاقة، تتفق نوعياً مع المسافات البينية بين تلك المستويات التى تم ملاحظتها عملياً. أيضاً تم تفسير مربع القيمة المطلقة للدالة الموجية على أنها توزيع احتمالى لموضع الجسيم، والذى أدى بنا، على سبيل المثال، إلى ظاهرة التأثير النفقى التى لوحظت عملياً. هذا من الناحية النظرية، أما بالنسبة للعالم الحقيقى، فهو يتمثل فى الأبعاد الثلاثة، بالرغم من أن الأمثلة فى بعد واحد غالباً تعطى وجهات نظر هامة ومشابهات للعالم الحقيقى، إلا إننا يجب أن نعمل على لأن تمتد النظرية إلى الأبعاد الثلاثة لكى يمكن أن نصيغ توقعات كمية لغالبية النتائج المعملية. فى هذا الفصل، سوف نصيغ معادلة شرودنجر فى الصورة الثلاثية الأبعاد ثم نحصل على الحل لهذه المعادلة لعدد من الحالات، ثم نتوج هذه المعالجة بمناقشة ذرة الهيدروجين والتى من خلالها سوف نتبين الاتفاق بين النظرية والنتائج المعملية بدرجة ملحوظة من الدقة.

معادلات الدوال الموجية :

كما نعلم، فى الميكانيكا الكلاسيكية تأخذ الطاقة الكلية للجسيم الحر الذى له الكتلة m وله كمية التحرك p الصورة الآتية:

$$E = p^2/2m = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m \qquad (١٣٨)$$

حيث p_x ، p_y و p_z تمثل مركبات كمية التحرك فى الاتجاهات الديكارتية (الكارتيزية) x، y، z على الترتيب.

بالتالى تعطى علاقة دى بروجليه فى حالة الأبعاد الثلاثة من:

$$\left.\begin{aligned} & E = \hbar\omega \\ & \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad where \quad p_x = \hbar k_x, p_y = \hbar k_y, p_z = \hbar k_z \end{aligned}\right\} \qquad (١٣٩)$$

وعلى هذا، فإن المعادلة الموجية التى تحتوى حلولها على المعادلات السابقة يمكن وضعها تماماً بنفس الإجراء المستخدم فى حالة البعد الواحد، لنحصل على:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) \qquad (١٤٠)$$

حيث الدالة الموجية $\psi = \psi(r,t) = \psi(x,y,z,t)$ هى دالة فى إحداثيات الموضع الثلاث بالإضافة إلى الزمن.

وحينما يخضع الجسيم للجهد $V(r,t)$، فإن المعادلة (١٤٠) يمكن تعميمها بنفس الطريقة المستخدمة فى حالة البعد الواحد أيضاً لنحصل على معادلة شرودنجر غير المستقرة (المعتمدة على الزمن):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi \qquad (١٤١)$$

حيث استخدمنا المؤثر الاتجاهى ∇^2 والذى يُعطى فى الصورة الديكارتية من:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \qquad (١٤٢)$$

أيضا تعميم التفسير الاحتمالى للدالة الموجية بنفس الطريقة، أى أنه إذا كان $P(r,t)d\tau$ يمثل احتمال تواجد الجسيم فى عنصر الحجم $d\tau(\equiv dx\,dy\,dz)$ بالقرب من من النقطة r عند الزمن t، عندئذ يكون:

$$P(r,t)=|\psi(r,t)|^2 \tag{١٤٣}$$

وبطريقة مباشرة ينتج شرط المعايرة فى الصورة:

$$\int|\psi(r,t)|^2 d\tau=1 \tag{١٤٤}$$

حيث يُجرى التكامل الحجمى على كل الفراغ المحيط.

فى حالة أن تكون دالة الجهد V لا تعتمد على الزمن، يمكننا كتابة الدالة الموجية فى الصورة:

$$\psi(r,t)=\psi(r)T(t) \tag{١٤٥}$$

ثم نفصل المتغيرات لنحصل على معادلة شرودنجر المستقرة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+V\psi(r)=E\psi(r) \tag{١٤٦}$$

سوية مع الدالة:

$$T(t)=\exp(-iEt/\hbar) \tag{١٤٧}$$

بينما يصبح شرط المعايرة فى هذه الحالة فى الصورة:

$$\int|\psi(r)|^2 d\tau=1 \tag{١٤٨}$$

بالمثل فإن الشروط الحدية على الدالة الموجية والتى تمثل الحل لمعادلة شرودنجر غير المستقرة تأتى بالتعميم الطبيعى لنظيراتها المذكورة فى الفصل السابق، والتى تحقق: أن تكون متصلة، دوال وحيدة

القيمة فى الموضع الزمن، مربع القيمة المطلقة لها يجب ان يكون تكاملى على كل الفراغ (أى له قيمة محدودة فى أى مكان من الفراغ) وأيضاً مشتقاتها بالنسبة لمتغير الموضع ($\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}$) يجب ان تكون متصلة فى أى مكان من الفراغ، فيما عدا مناطق التوقف اللانهائية لدالة الجهد V.

سنَمْضي الآن في الحُصول على الحلولِ لمعادلة شرودنجر المستقرة فى حالة الأبعاد الثلاث (٧٠) لعدد مِنَ الحالات الخاصةِ. على خلاف الحالة الأحادية البعد، المعادلة الآن معادلة تفاضلية جزئية والتي يُسبّبُ التعقيداتِ الرياضيةِ عُموماً. سوف نعتبر الحالات التى يمكن معها تطبيق إجراء فصل المتغيرات، ولكن على أى حال سوف نجد أننا يجب علينا إيجاد حل لثلاث معادلات تفاضلية عادية لكى نحصل على الحل الكامل. سَنَعتبرُ الأنظمة المتماثلة كروياً حيث يمكننا تنفيذ هذه العمليةِ الإحداثيات القطبية الكروية، لكنّنا سنُناقشُ أولاً بَعْض الأمثلةِ الأسهلِ حيث أن معادلة شرودنجر يُمْكِنُ أَنْ تُفْصَلَ في الاحداثيات الديكارتية.

فصل المتغيرات فى الإحداثيات الديكارتية:

سنعتبر الحالة حيث يمكن كتابة دالة الجهد $V(\boldsymbol{r})$ كمجموع لثلاث كميات، كل منها دالة فى واحد فقط من الاحداثيات الديكارتية الثلاث، أى أن:

(١٤٩)

$$V(\boldsymbol{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$$

سوف نعبر الآن عن الدالة الموجية كحاصل ضرب للدوال الثلاث السابقة الوحيدة البعد:

(١٥٠)

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

بالتعويض بالمعادلات (١٤٩) و (١٥٠) فى معادلة شرودنجر غير المستقرة (١٤١)، وبالقسمة على u ثم إعادة الترتيب قليلاً، نحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+V_x(x)\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+V_y(y)\right]$$

$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}+V_z(z)\right]=E \qquad (١٥١)$$

كل حد من الحدود داخل الأقواس المربعة يمثل دالة فى متغير واحد فقط من المتغيرات (x, y, z)، ولكن المعادلة تتحقق عند كل نقاط الفراغ. من هذا ينتج أن كل معادلة من تلك المعادلات فى الأقواس المربعة يجب أن تساوى مقداراً ثابتاً بحيث أن مجموع تلك الثوابت يساوى الطاقة الكلية E.

وبالتالى يكون:

$$\left.\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X}{dx^2}+V_xX&=E_1X\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dy^2}+V_yY&=E_2Y\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2}+V_zZ&=E_3Z
\end{aligned}\right\} \qquad (١٥٢)$$

حيث $E_x+E_y+E_z=E$.

من السهل أن نلاحظ أن كل معادلة من المعادلات الثلاث السابقة (١٥٢) لها شكل معادلة شرودنجر فى بعد واحد، لذلك فى الحالات المناسبة (المتشابهة)، يمكننا نقل النتائج مباشرة من الفصل السابق.

الجسيم الحر:

فى الحالة البسيطة للجسيم الحر، تختصر معادلة شرودنجر (١٤١) إلى ثلاث معادلات كما فى (١٥٢) والتى لها $V_x=V_y=V_z=0$. معادلة المحور x يمكن الحصول عليها فى الصورة

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2}=-k_x^2X(x) \qquad (١٥٣)$$

حيث $k_x^2 = 2mE_x/\hbar^2$ وبالتالى $E_x = \hbar^2 k_x^2/2m.$ ويكون الحل كما علمنا من قبل فى صورة الموجة المستوية

$$X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_x x}$$

(١٥٤)

ويصبح حل المعادلة ذات الأبعاد الثلاث يعطى من

$$\psi_{\vec{k}}(x, y, z) = (2\pi)^{-3/2} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (١٥٥)$$

حيث $\vec{k}, \vec{r}$ تمثلان متجهات الموضع والمتجه الموجى للجسيم على الترتيب. وتعطى الطاقة الكلية من مجموع طاقات الجسيم ف الأبعاد الثلاث

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 \quad (١٥٦)$$

والعدد الموجى من

$$|\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$$

(١٥٧)

ويعطى حل معادلة شرودنجر غير المستقرة من

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\omega t} = (2\pi)^{-3/2} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

(١٥٨)

حيث عوضنا عن(١٥٥) و (١٤٧) فى (١٤٥)، حيث $E = \hbar\omega$.

ويعطى شرط المعايرة العمودى فى تلك الحالة فى الصورة

$$\int \Psi^*_{\vec{k}'}(\vec{r},t)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\,d^3r = \int \psi^*_{\vec{k}'}(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,d^3r = (2\pi)^{-3}\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\,d^3r = \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

(١٥٩)

وتعطى صورة الحزمة الموجية الممثلة للجسيم الحر من

$$\Psi(\vec{r},t) = (2\pi)^{-3/2}\int A(\vec{k},t)\Psi_{\vec{k}}(\vec{k},t)\,d^3k = (2\pi)^{-3/2}\int A(\vec{k},t)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d^3k$$

(١٦٠)

حيث $A(\vec{k},t)$ تمثل تحويل فورير للدالة $\Psi(\vec{r},t)$

$$A(\vec{k},t) = (2\pi)^{-3/2}\int \Psi(\vec{r},t)e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d^3r$$

(١٦١)

الجسيم الحرفى صندوق ثلاثى الأبعاد:

نعتبر الآن حالة جسيم كتلته m مقيد فى صندوق ثلاثى الأبعاد أبعاده L_x, L_y, L_z فى الجهد الممثل بالصورة

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L_x,\ 0 < y < L_y,\ 0 < z < L_z \\ \infty & \text{elsewhere,} \end{cases}$$

(١٦٢)

والتى يمكن كتابتها فى الصورة $V(x,y,z) = V_x + V_y + V_z$ حيث

$$V_x(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L_x \\ \infty & \text{elsewhere;} \end{cases}$$

(١٦٣)

وبالمثل $V(y),\ V(z)$. وهذا يتعلق بحالة دالة الجهد التى تساوى صفر داخل منطقة مستطيلة أبعادها $L_x \times L_y \times L_z$ بينما تساوى دالة الجهد ∞ خارج تلك المنطقة.

كل معادلة من المعادلات المفصولة السابقة (١٦٣) تكافئ معدالة شرودنجر أحادية البعد للبئر الجهدى اللانهائى وأيضاً لها نفس الشروط الحدية ($X(x)=0\ if\ \ x=0,\ L_x$).
الدالة $\Psi(x,y,z)$ تتلاشى عند حوائط الصنوق كما نعلم، وهو أيضا شرط الدورية، باستخدام هذا الشرط كما سبق يعطى الحل لمعادلة شرودنجر (١٤١) فى الصورة

$$X(x)=\sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right),\qquad n_x=1,2,3,\ldots, \tag{١٦٤}$$

وتعطى قيمة الطاقة من

$$E_{n_x}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_x^2}n_x^2 \tag{١٦٥}$$

باستخدام نفس الإجراء يمكن الحصول على $Y(y),\ Z(z),\ E_{n_x},\ E_{n_y}$ وبالتعويض فى (١٥٠)

و (١٥٦) نحصل على الدالة الموجية فى ثلاث أبعاد وقيم الطاقة المنظرة لها

$$\psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{L_xL_yL_z}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right) \tag{١٦٦}$$

$$E_{n_xn_yn_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \tag{١٦٧}$$

أيضاً من الهام اعتبار الحالة الخاصة عندما يكون الصندوق ذا بعدين متساويين، والذى يوضح بعض الخواص الهامة التى تنتج عندما تكون دالة الجهد ثلاثية الأبعاد متماثلة. بوضع $L_x = L_y$، تصبح المعادلة (١٦٧) فى الصورة:

(١٦٨)

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2 + n_y^2}{L_x^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

فى الحالة العامة، يوجد عديد من التركيبات المختلفة للأعداد الكمية n_x, n_y *and* n_z، والتى لها نفس الطاقة، أى أن ($n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$) و ($n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1$) والتى لها الدوال الموجية:

(١٦٩)

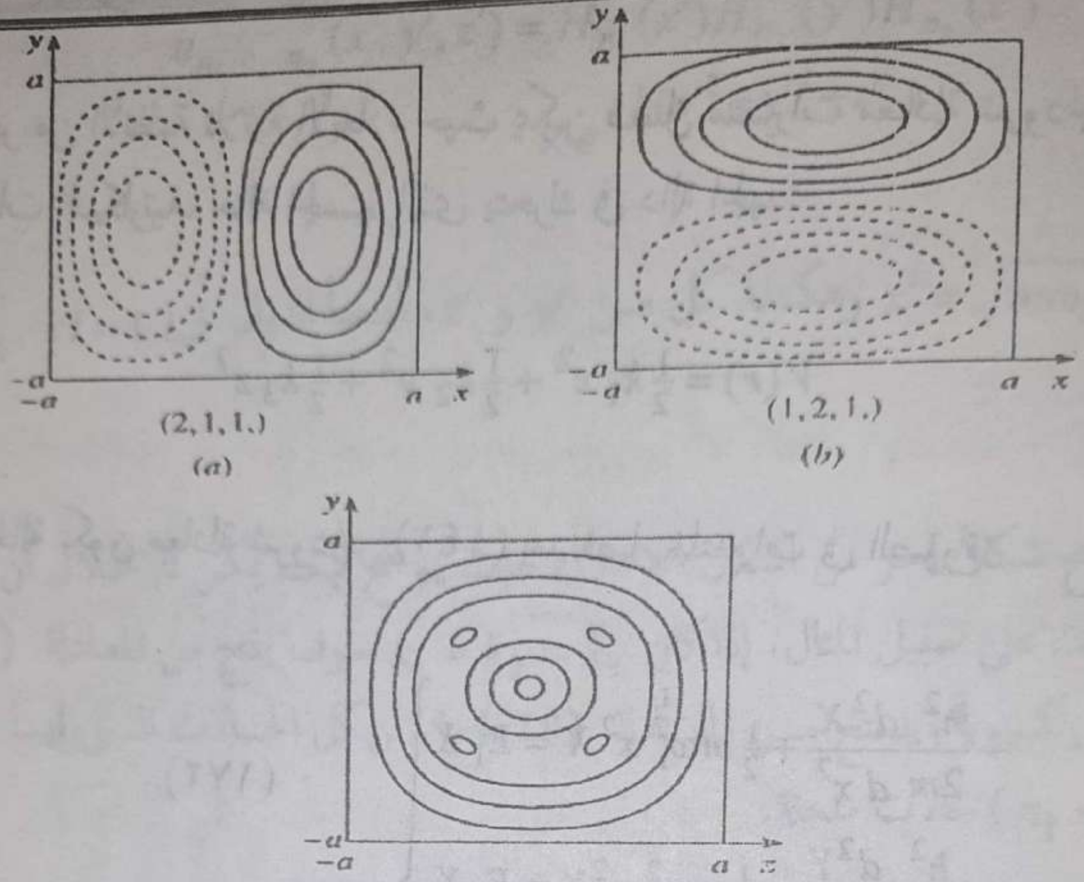
$$\psi(x,y,z)_{211} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}}\sin\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right)\cos\left(\frac{\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{\pi z}{L_x}\right)$$

(170)

$$\psi(x,y,z)_{121} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}}\sin\left(\frac{\pi x}{L_x}\right)\cos\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{\pi z}{L_x}\right)$$

التفسير الفيزيائى للمعادلتين السابقتين (169) و(170) يمكن تلخيصة فيما يلى:
عندما تتواجد حالتين أو أكثر من الحالات الكمية لَها نفس قيمةِ الطاقةِ نَقُولُ بأن تلك الحالات منحلة *degenerate*. في أغلب الأحيان الإنحلال يصاحب تماثل دالة الجهد ويُمكنُ أَنْ نوضح هذا في الحالةِ الحاليةِ باعتِبار العلاقةِ الهندسيةِ بين الدالتين الموجيتين (169) و(170). شكل (٦) يعرض تخطيطا كنتورياً لمقطع من الدالة الموجية عند $z = 0$ من خلال كل من تلك الدوال الموجية. نلاحظ بوضوح أن تلك التخطيطات تكافئ بعضها البعض، ما عَدا اتجاهاتها فى الفراغ، وبذلك فإن ψ_{121} يُمكِنُ أَنْ تتحوّلَ إلى ψ_{211} بإدَارَتِها بمقدار ٩٠ درجة حول محور z. وحيث أن دالة الجهد لها تماثل مربع فى المستوى xy، يَجِبُ أَنْ لا نتوقّعَ أن مثل هذا الدورانِ قد يُؤدّي إلى أيّ تغيير طبيعي فى النظامِ. على أية حال، فإن التوزيع الاحتمالِي للموضع $|\psi|^2$ الذى يناظر أياً من هذه الدوال، ليس له التماثل المتوقع.

فعلى سبيل المثال، إذا كان النظام في الحالةِ التى لها الدالّة الموجية ψ_{211}، يكون احتمال وجوده قُرب النقطة $(L_x,0,0)$ كبيرٌ جداً، بينما احتمال إيجاده قُرب النقطة $(L_x,0,0)$ يكون مساوياً للصفر. بالرغم من أنَّ، كلما بعدت دالة الجهد، تصبح هذه النقاط متكافئة. و لحَلّ هذا التناقض الظاهريِ يَجِبُ أن نَعتبرَ بعناية ما المعلوماتَ التى نحصل عليها من خلال قياس الطاقة حول أى نظام منحل. لَو قِيستْ الطاقة فقط، يُمْكِنُ أَنْ نَستنتجَ أنّ الدالة الموجية أحد الأشكالِ السابقة (169) أو (١٧٠)، لكن لا نَستطيعُ أن نحدد أيّ الدالتين هى. في غيابِ المعلوماتِ الأخرى، نَفترضُ أن أى حالة محتملة على حد سواء. يترتب على ذلك التعبير الملائم للتوزيعَ الاحتماليِ للموضع أنه يساوى متوسط المقدارين $|u_{211}|^2$ و $|u_{121}|^2$. هذه الكمية بشكل واضح لَها نفس التماثل كدالة الجهد، كما يتضح من شكل (١٨). هذه الحجّةِ تَعتمدُ على أنْ تَكُونَ الحالات منحلة، لأننا فيما عدا ذلك يُمْكِننا أَنْ نحددَ مِنْ قياس الطاقة أى واحدة من الحالات كان يشغلها الجسيم. هذا يوضح الإرتباط الوثيق بين الإنحلالِ والتماثل. علاوة على ذلك، الحقيقة بأنّ القيم المطلقة المربّعة لدوال الموجية المصاحبة لكل حالة بمفردها ليس لها أهميةً طبيعيةً توضح المبدأ العامَّ الذي يبين أهمية ميكانيكا الكمِ، لذلك يَجِبُ أَنْ نُركّزَ فقط على تلك النَتائِجِ التي يُمْكِنُ أَنْ تقاس ونتجنّبُ تصور الإستنتاجاتِ حول النتائجِ الظاهرية التي لا يُمْكن أنْ تُختبرَ بطريقة مباشرة.



شكل (٩)

الجدول التالى يعطى الأعداد الكمية ومستويات الطاقة للجسيم الحر مقيد فى صنوق ثلاثى الأبعاد ودرجة الانحلال لكل حالة

$E_{n_x n_y n_z}/E_1$	(n_x, n_y, n_z)	g_n
3	(111)	1
6	(211), (121), (112)	3
9	(221), (212), (122)	3
11	(311), (131), (113)	3
12	(222)	1
14	(321), (312), (231), (213), (132), (123)	6

جدول (١)

المتذبذب التوافقى ثلاثى الأبعاد:

مثال آخر من الأنظمة ثلاثية الأبعاد، حيث يمكن فصل متغيرات معادلة شرودنجر ثلاثية الأبعاد فى الاحداثيات الديكارتية، حالة الجسيم الذى يتحرك فى دالة الجهد:

$$V(r)=\frac{1}{2}k_1 x^2+\frac{1}{2}k_2 y^2+\frac{1}{2}k_3 z^2 \qquad (171)$$

فى هذه الحالة تكون معادلة شرودنجر (١٤١) بعد فصل المتغيرات فى الصورة:

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_1^2 x^2 X &= E_1 X \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{1}{2}m\omega_2^2 y^2 Y &= E_2 Y \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2}+\frac{1}{2}m\omega_3^2 z^2 Z &= E_3 Z \end{aligned}\right\} \qquad (172)$$

حيث $n=1,2,3 \quad \omega_n=\sqrt{\frac{k_n}{m}},$. أيضا كل من المعادلات السابقة لها نفس شكل معادلات المتذبذب التوافقى أحادى البعد الممثل بالمعادلة (٧١) من ذلك يمكننا استخدام نتائج هذه الحالة مباشرة ، معادلة (١٣٧)، والتى تعطى قيم الطاقة الكلية لمستويات المتذبذب فى حالة البعد الواحد، وبذلك يكون لدينا طاقة المتذبذب فى حالة الأبعاد الثلاث تعطى من:

$$E_{n_1,n_2,n_3}=\hbar\omega_1(n_1+\tfrac{1}{2})+\hbar\omega_2(n_2+\tfrac{1}{2})+\hbar\omega_3(n_3+\tfrac{1}{2}) \qquad (172)$$

حيث n_1, n_2 and n_3 أعداد صحيحة موجبة. يتبع ذلك مباشرة تعميم الدالة الموجية للمتذبذب أحادى البعد (١-٣-١١٤) لحالة الأبعاد الثلاث كالآتى:

$$u_{n_1,n_2,n_2}(x',y',z') = H_{n_1}(x')H_{n_2}(y')H_{n_3}(z') \times e^{-\frac{1}{2}(x'^2+y'^2+z'^2)} \quad (١٧٣)$$

حيث $x' = \sqrt{m\omega_1/\hbar}\,x$ وهكـذا كل مـن y' و z'، أيضاً الدوال H_{n_i}, $i=1,2,3$ كثيرات حدود هرميتية.

هذا المثال يوضح شكلاً آخر من أشكال الانحلال حيث يوضح كيف يمكن للانحلال أن يكون نتيجة لتماثل دالة الجهد. على سبيل المثال، إذا كان $k_1 = k_2 = k_3$ سوف ينتج من المعادلة (٢٣-٤-١) أن الجهـد متماثـل كـروياً وينـتج مـن المعـادلة (٢٥-٤-١) أن كل الحـالات الـتى لهـا نفـس القيمـة $(n_1+n_2+n_3)$ حالات منحلة.

فصل المتغيرات فى الإحداثيات القطبية الكرية:

بالرغم من أن هناك تطبيقات فى ميكانيكا الكم التي يُمكِنُ أَنْ يُستَخدمَ فيها الإحداثيات ديكارتيةِ بشكل مفيد، إلا أن الكثير من الأنظمةَ الفيزيائية، خصوصاً الذرّات والأنوية، أقرب بكثير إلى الشكل الكرويِ مِنها الشكل مستطيل. الأنظمة المتماثلة كروياً، حيث أنَّ دالة الجهد $V(r)$ مستقلة عن إتّجاهِ r، تعالَج عادة أفضل بإستعمال الإحداثيات القطبية الكروية (r,θ,ϕ). وكما نعلم أن هذه الإحداثيات ترتبط بالإحداثيات الديكارتية (x, y, z) بالتعبيرات الآتية:

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\} \quad (١٧٤)$$

فى هذه الحالة، يمكن كتابة معادلة شرودنجر (١٤١) فى الإحداثيات الكروية فى الصورة الآتية:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial\phi^2}\right]+V(r)u=Eu \qquad (١٧٥)$$

حيث أننا استخدمنا مباشرة التعبير القياسى للمؤثر ∇^2 المعطى بالمعادلة (١٤٢) فى صورته فى الإحداثيات الكروي وقد سبق دراسة هذا المؤثر بالتفصيل فى العام الدراسى السابق فى صوره الثلاثة فى الإحداثيات المختلفة (الكارتيزية، الإسطوانية والقطبية الكروية). وعلى سبيل التذكير، يعطى المؤثر ∇^2 فى الإحداثيات القطبية الكروية من:

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \qquad (١٧٦)$$

أيضاً تم تمثيل كتلة الجسيم بالرمز m_e وهو الرمز الشائع للتعبير عن كتلة الإلكترون مكا أننا سوف نستخدم لاحقاً الرمز m ليدل على عدداً كمياً.

الآن نتقدم لنفصل المتغيرات وسوف يتم هذا على مرحلتين: أولاً نضع:

$$u(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi) \qquad (١٧٧)$$

بالتعويض فى المعادلة (١٧٥)، وبالقسمة على u وبالضرب فى r^2 لنحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+r^2V-r^2E\right]$$

$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{Y}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)\right.$$

$$\left.-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{Y}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2}\right]=0 \qquad (١٧٨)$$

بالنظر سريعاً إلى محتويات القوس المربع الأول نجد أنها مستقلة عن θ و ϕ، أما محتويات القوس المربع الثانى فهى مستقلة عن r، لذلك فكل منهما منفرداً يساوى مقدار ثابت، ويكون مجموع المقدارين الثابتين يجب ان يساوى الصفر. سوف نسمى هذين الثابتين $\lambda-$ و λ، لنحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+r^2V-r^2E\right]=-\lambda \qquad (١٧٩)$$

ومنها بالقسمة على r^2 وبالضرب فى R وإعادة الترتيب قليلاً نحصل على:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left(V+\frac{\lambda}{r^2}\right)R=ER \qquad (١٨٠)$$

وأيضاً من محتويات القوس المربع الثانى:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{Y}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{Y}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2}=\lambda \qquad (١٨١)$$

ومنها بالضرب فى Y نحصل على:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=\lambda Y \qquad (١٨٢)$$

المعادلة (١٨٢) لا تحتوى على دالة الجهد. هذا يَعْني إذا أُمكننا حل (١٨٢) بالنسبة إلى $Y(\theta,\phi)$، الحلول سَتُمثّلُ الأجزاءَ الزاويةَ لدوال لأيّ دالة جهد متماثلة كروياً $V(r)$ ثمّ يلزمنا فقط أنْ نَحل المعادلة القطريةَ (١٨٠) للحُصُول على الدالة الموجية فى صورتها الكاملة لأى حالة خاصة. سوف نعرض الآن كيف يتم الحصول علي الحلول العامّة للمعادلة (١٨٢) ، ثم نعود للحصول على حَلّ المعادلةِ القطريةِ لحالات خاصة لدالة الجهد لاحقاً.

وبمتابعة عملية فصل المتغيرات، نضع:

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi) \qquad (١٨٣)$$

بالتعويض فى المعادلة (١٨٣)، وبالضرب فى $\sin^2\theta / Y$ نحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\lambda\sin^2\theta\right]$$

$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right]=0 \qquad (١٨٤)$$

نلاحظ بوضوح أن محتويات القوس المربع الأول مستقل عن ϕ، أم محتويات القوس المربع الثانى فهى مستقلة عن θ، لذلك فكل منهما يساوى مقدار ثابت، حيث مجموع المقداران الثابتان يجب أن يساوى الصفر. وسف نطلق على المقدارين الثابتين ν– و ν، لنحصل على:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\lambda\sin^2\theta=-\nu \qquad (١٨٥)$$

ومنها نحصل على:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\lambda\sin^2\vartheta\,\Theta+\nu\,\Theta=0$$

(١٨٦)

أيضاً من محتويات القوس المربع الثانى:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=\nu \qquad (١٨٧)$$

ومنها نحصل على حل المعادلة الأخيرة (٤٠-٤-١) فى الصورة:

$$\Phi=A\exp\left[\pm i\sqrt{2m_e\nu/\hbar^2}\,\phi\right] \qquad (١٨٨)$$

حيث A مقدار ثابت. يمكننا الآن تطبيق الشرط حيث الدالة الموجية أحادية القيمة، أو دالة دورية، حيث:

$$\Phi(\phi+2\pi)=\Phi(\phi) \qquad (١٨٩)$$

مما يعنى أن:

$$\exp\left[\pm i\sqrt{2m_e \nu/\hbar^2}\,2\pi\right]=1 \qquad (١٩٠)$$

وهذا يتحقق فى حالة:

$$\sqrt{2m_e \nu/\hbar^2}=m \qquad (١٩١)$$

حيث m عدداً صحيحاً موجباً أو سالباً أو صفر. بالرجوع للتعويض فى (١٨٨)، لنحصل على:

$$\Phi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp[im\phi] \qquad (١٩٢)$$

حيث أن المعامل $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ تم الحصول عليه من شرط المعايرة الذى يمكن صياغته فى هذه الحالة فى الصورة:

$$\int_0^{2\pi}|\Phi|^2\,d\phi=1 \qquad (١٩٣)$$

الآن، لقد حصلنا على الحل الكامل لواحدة من المعادلات التفاضلية الثلاث، وحصلنا على شرط التكميم (١٩١) سوية مع العدد الكمى m.

عودة إلى المعادلة الخاصة بالدالة Θ الممثلة بالمعادلة (١٨٦)، يمكننا التعويض من المعادلة (١٩١) ثم نعيد ترتيب الحدود لنحصل على:

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + (\lambda' \sin^2\theta - m^2)\Theta = 0 \qquad (١٩٤)$$

حيث $\lambda' = 2m_e\lambda/\hbar^2$. يمكن تسهيل الحصول على حل هذه المعادلة باستخدام التعويض $\upsilon = \cos\theta$ وبكتابة $P(\upsilon) \equiv \Theta(\theta)$، والذى يؤدى إلى :

$$\frac{d}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{d\upsilon} = -\sqrt{1-\upsilon^2}\,\frac{d}{d\upsilon} \qquad (١٩٥)$$

فى هذه الحالة تصبح المعادلة (١٩٤) فى الصورة:

$$\frac{d}{d\upsilon}\left((1-\upsilon^2)\frac{dP}{d\upsilon}\right) + \left(\lambda' - \frac{m^2}{1-\upsilon^2}\right)P = 0 \qquad (١٩٦)$$

أولاً سوف نعتبر الحالة الخاصة، حيث $m = 0$، حينئذ تأخذ المعادلة (١٩٦) الشكل التالى:

$$\frac{d}{d\upsilon}\left((1-\upsilon^2)\frac{dP}{d\upsilon}\right) + \lambda' P = 0 \qquad (١٩٧)$$

الآن نستخدم الحل المستخدم فى الباب السابق (فى حالة التذبذب التوافقى أحادى البعد) وهو فك الدالة $P(\upsilon)$ فى صورة متسلسلة فى قوى المتغير υ كالآتى:

$$P = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \upsilon^p \qquad (١٩٨)$$

من هنا نجد أن:

$$\frac{d}{d\upsilon}\left((1-\upsilon^2)\frac{dP}{d\upsilon}\right)=\frac{d}{d\upsilon}\sum_{p=0}^{\infty}\left[a_p\, p\upsilon^{p-1}-a_p\, p\upsilon^{p+1}\right]$$

$$=\sum_{p=0}^{\infty}a_p\, p(p-1)\upsilon^{p-2}-\sum_{p=0}^{\infty}a_p\, p(p+1)\upsilon^p$$

$$=\sum_{p'=0}^{\infty}a_{p'+2}\,(p'+2)(p'+1)\upsilon^{p'}-\sum_{p=0}^{\infty}a_p\, p(p+1)\upsilon^p$$

(١٩٩)

حيث $p'=p+2$ ، وحيث أن الحدود فى المجموع الأول المناظرة للقيم $p=0$ و $p=1$ تساوى الصفر، يكون المجموع على p' فى السطر الأخير يبدأ عند $p'=0$. وحيث أن p' ليست فقط إلا دليل للمجموع، يمكننا إعادة كتابة المجموع فى السطر الأخير بالدليل p وبالتعويض من المعادلة (١٩٩) فى (١٩٧) لنحصل على:

$$\sum_{p=0}^{\infty}\left[a_{p+2}\,(p+2)(p+1)-a_p\left\{p(p+1)-\lambda'\right\}\right]\upsilon^p=0$$

(٢٠٠)

وهذه المتساوية سوف تتحقق إذا كان معامل كل قوة من قوى υ مساوياً للصفر، لذلك سوف نحصل على العلاقة التكرارية الآتية:

$$\frac{a_{p+2}}{a_p}=\frac{p(p+1)-\lambda'}{(p+1)(p+2)}\rightarrow 1 \quad as \quad p\rightarrow\infty \qquad (٢٠١)$$

لقيم p الكبيرة، نجد أن المتسلسلة (١٩٩) تماثل مفكوك تيلور للدالة $(1-\upsilon)^{-1}$ والتى تقترب من اللانهاية عند النقطة $\upsilon = 1$. هذا التقارب فى الدالة الموجية لا يتفق مع الشروط الحدية الفيزيائية. لذلك يمكن تجنب هذا التقارب إلى اللانهاية إذا ما توقفت أو انتهت المتسلسلة عند قيمة محددة للمتغير p، وليكن $p = l$، وكانت قيمة $a_{\circ} = 0$ عندما تكون قيمة l فردية وكانت قيمة $a_1 = 0$ عندما تكون قيمة l زوجية.

مما سبق، يمكننا الحصول على الشرط الكمى الثانى:

$$\lambda' = l(l+1) \qquad (٢٠٢)$$

حيث l عدد صحيح و $l \geq 0$. وبالتالى يمكن كتابة الدالة p مصاحباً لها الدليل l أى P_l، والتى تمثل كثيرة حدود من الدرجة l والتى تحتوى فقط إما قوى فردية أو فقط قوى زوجية للمتغير υ. كثيرات الحدود هذه تعرف بكثيرات حدود ليجيندر والتى يمكن معرفة خواصها من كثير من كتب الرياضيات. ويمكن الحصول على الصور الصريحة المناظرة للقيم المعينة للمتغير l، وذلك من المعادلتين (٢٠١) و (٢٠٢)، على سبيل المثال:

$$\left.\begin{aligned} P_0(\upsilon) &= 1 \\ P_1(\upsilon) &= \upsilon \\ P_2(\upsilon) &= \tfrac{1}{2}(3\upsilon^2 - 1) \\ P_3(\upsilon) &= \tfrac{1}{2}(5\upsilon^3 - 3\upsilon) \end{aligned}\right\} \qquad (٢٠٣)$$

حيث تم اختيار قيم الثوابت a_0 و a_1 طبقاً لما يناسب من الشروط السابقة.

عودة إلى المعادلة (١٩٦)، وهى الصورة فى الحالة العامة حيث تأخذ m قيمة غير صفرية. طريقة الحل لهذه المعادلة أكثر تعقيداً من الحالة الخاصة السابقة الممثلة بالمعادلة (١٩٧). ولإجراء طريقة الحل نضع المعادلة (١٩٦) فى الصورة:

$$(1-\upsilon^2)\frac{d}{d\upsilon}\left((1-\upsilon^2)\frac{dP}{d\upsilon}\right)$$

$$+l(l+1)(1-\upsilon^2)P - m^2 P = 0 \qquad (٢٠٤)$$

التى تصبح بعد إجراء التفاضلات بصورة صريحة فى الصورة:

$$(1-\upsilon^2)\left((1-\upsilon^2)\frac{d^2P}{d\upsilon^2} - 2\upsilon\frac{dP}{d\upsilon}\right)$$

$$+l(l+1)(1-\upsilon^2)P - m^2 P = 0 \qquad (٢٠٥)$$

حيث عوضنا عن قيمة $\lambda' = l(l+1)$.

باستخدام التعويض:

$$P = (\upsilon^2 - 1)^{m/2} w(\upsilon) \qquad (٢٠٦)$$

والذى يؤدى إلى:

$$\frac{dP}{d\upsilon} = m\upsilon(\upsilon^2-1)^{m/2-1} w + (\upsilon^2-1)^{m/2}\frac{dw}{d\upsilon} \qquad (٢٠٧)$$

أيضاً

$$\frac{d^2P}{d\upsilon^2} = m(m-2)\upsilon^2(\upsilon^2-1)^{m/2-2} w + m(\upsilon^2-1)^{m/2-1} w$$

$$+m(\upsilon^2-1)^{m/2-1}\frac{dw}{d\upsilon}+m(\upsilon^2-1)^{m/2-1}\frac{dw}{d\upsilon}$$

$$+(\upsilon^2-1)^{m/2}\frac{d^2w}{d\upsilon^2}$$

$$=(\upsilon^2-1)^{m/2}\left\{w\left[m(m-2)\upsilon^2(\upsilon^2-1)^{-2}\right.\right.$$

$$\left.\left.+m(\upsilon^2-1)^{-1}\right]+2m\upsilon(\upsilon^2-1)^{-1}+\frac{d^2w}{d\upsilon^2}\right\} \qquad (٢٠٨)$$

بالتعويض من المعادلات (٢٠٦)، (٢٠٧) و (٢٠٨) فى المعادلة (٢٠٥)، ثم تجميع الحدود من نفس الدرجة، نحصل على:

$$(\upsilon^2-1)\frac{d^2w}{d\upsilon^2}+(m+1)2\upsilon\frac{dw}{d\upsilon}$$

$$-[l(l+1)-m(m+1)]w=0 \qquad (٢٠٩)$$

على سبيل المثال يمكن الحصول على الحد الأخير $[l(l+1)-m(m+1)]w$ وذلك بعد التعويض عن المعادلات السابقة كالآتى:

$$w\left[m(m-2)\upsilon^2(\upsilon^2-1)^{m/2}+m(\upsilon^2-1)(\upsilon^2-1)^{m/2}\right.$$

$$+2m\upsilon^2(\upsilon^2-1)^{m/2}-l(l+1)(\upsilon^2-1)(\upsilon^2-1)^{m/2}$$

$$-m^2(\upsilon^2-1)^{m/2}\Big]$$

$$=w\Big[\upsilon^2(\upsilon^2-1)^{m/2}\{m^2-2m+2m)\}$$

$$+(\upsilon^2-1)(\upsilon^2-1)^{m/2}\{m-l(l+1)\}-m^2(\upsilon^2-1)^{m/2}\Big]$$

$$=w\Big[m^2(\upsilon^2-1)^{m/2}(\upsilon^2-1)$$

$$+(\upsilon^2-1)(\upsilon^2-1)^{m/2}\{m-l(l+1)\}\Big]$$

$$=-(\upsilon^2-1)^{m/2}(\upsilon^2-1)\big[m(m+1)-l(l+1)\big]w \qquad (٢١٠)$$

ثم بعد القسمة على المقدار $(\upsilon^2-1)^{m/2}(\upsilon^2-1)$ نحصل على الحد المطلوب.

عودة إلى المعادلة (٢٠٩) المطلوب إيجاد الحل لها.

بالنظر إلى المعادلة (١٩٨) وبعد التعويض عن قيمة λ' تتحول إلى الصورة:

$$\frac{d}{d\upsilon}\left((1-\upsilon^2)\frac{dP_l}{d\upsilon}\right)+l(l+1)P_l=0 \qquad (٢١١)$$

وبإجراء التفاضل m مرة لهذه المعادلة باستخدام قاعدة ليبنز للتفاضل:

$$u\text{v}^{(m)}=u^{(m)}\text{v}+\ldots+\frac{m(m-1)}{2!}u^{(2)}\text{v}^{(m-2)}$$

$$+ mu^{(1)}\mathrm{v}^{(m-1)} + u\mathrm{v}^{(m)} \tag{٢١٢}$$

حيث نضع $u = \left(1-\upsilon^2\right)$ ؛ $\mathrm{v} = \dfrac{dP}{d\upsilon}$ نحصل على الصورة الآتية:

$$- m(m+1)\frac{d^m P_l}{d\upsilon^m} - 2\upsilon(m+1)\frac{d^{m+1} P_l}{d\upsilon^{m+1}}$$

$$+ (1-\upsilon^2)\frac{d^{m+2} P_l}{d\upsilon^{m+2}} + l(l+1)\frac{d^m P_l}{d\upsilon^m} = 0 \tag{٢١٣}$$

و تجميع الحدود التى من نفس الدرجة، نحصل على:

$$(\upsilon^2 - 1)\frac{d^2}{d\upsilon^2}\left(\frac{d^m P_l}{d\upsilon^m}\right) + 2(m+1)\frac{d}{d\upsilon}\left(\frac{d^m P_l}{d\upsilon^m}\right)$$

$$- \left[l(l+1) - m(m+1)\right]\frac{d^m P_l}{d\upsilon^m} = 0 \tag{٢١٤}$$

وبمقارنة المعادلة (٢١٤) بالمعادلة (٢٠٩) نجد أنهما يتطابقان إذا تم وضع:

$$w = \frac{d^m P_l}{d\upsilon^m} \tag{٢١٥}$$

ونلخص هذا فى أن P_l تمثل حلول معادلة ليجيندر (١٩٨). أيضاً $d^m P_l / d^m \upsilon$ تحقق المعادلة (٢١٤)، والتى تم اشتقاقها من المعادلة (١٩٨) من خلال التفاضل m مرة، وبالتالى فإن المعادلة (٢١٤) ليس إلا المعادلة (٢٠٩) والتى تم الحصول عليها بالتعويض:

$$(\upsilon^2-1)^{m/2}\frac{d^m P_l}{d\upsilon^m} \quad (٢١٦)$$

فى معادلة ليجيندر (٢٠٥). أى أن حلول معادلة ليجيندر (٢٠٥) يجب أن تكون:

$$P_l^{|m|}(\upsilon)=(\upsilon^2-1)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}P_l}{d\upsilon^{|m|}} \quad (٢١٧)$$

الدوال (٢١٧) تعرف بدوال ليجيندر المصاحبة. ولأن الدوال P_l تمثل كثيرات حدود من الدرجة l، لا يمكننا تفاضلها أكثر من l مرة، وبالتالى يجب أن نتقيد بالشرط:

$$m \le l \quad (٢١٨)$$

وسوف نعرف بعد قليل أن هذه اللامتساوية (٢١٨) لها معناً فيزيائياً هاماً جداً.

وبالنظر إلى المعادلات (١٥٨)، (١٦٦) و (٢١٧)، يمكننا أن نعلن أن: الجزء الزاوى من معادلة شرودنجر لأى جهد مركزى تم إيجاد الحل له بواسطة التوافقيات الكروية:

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}N_{lm}\,e^{im\phi}\,P_l^{|m|}(\upsilon)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}N_{lm}\,e^{im\phi}\,P_l^{|m|}(\cos\theta) \quad (٢١٩)$$

حيث N_{lm} ثابت المعايرة والذى يمكن الحصول عليه من التكامل على كل الزوايا المجسمة، أى ان:

$$\int_{0}^{2\pi}\int_{0}^{2\pi}\left|Y_{lm}(\theta,\iota)\right|^{2}\sin\theta\,d\theta\,d\phi=1 \qquad (٢٢٠)$$

والذى يؤدى إلى الصورة النهائية للجزء التوافقى فى الصورة:

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=(-1)^{m}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\,e^{im\varphi}\,P_{l}^{|m|}(\cos\theta),$$

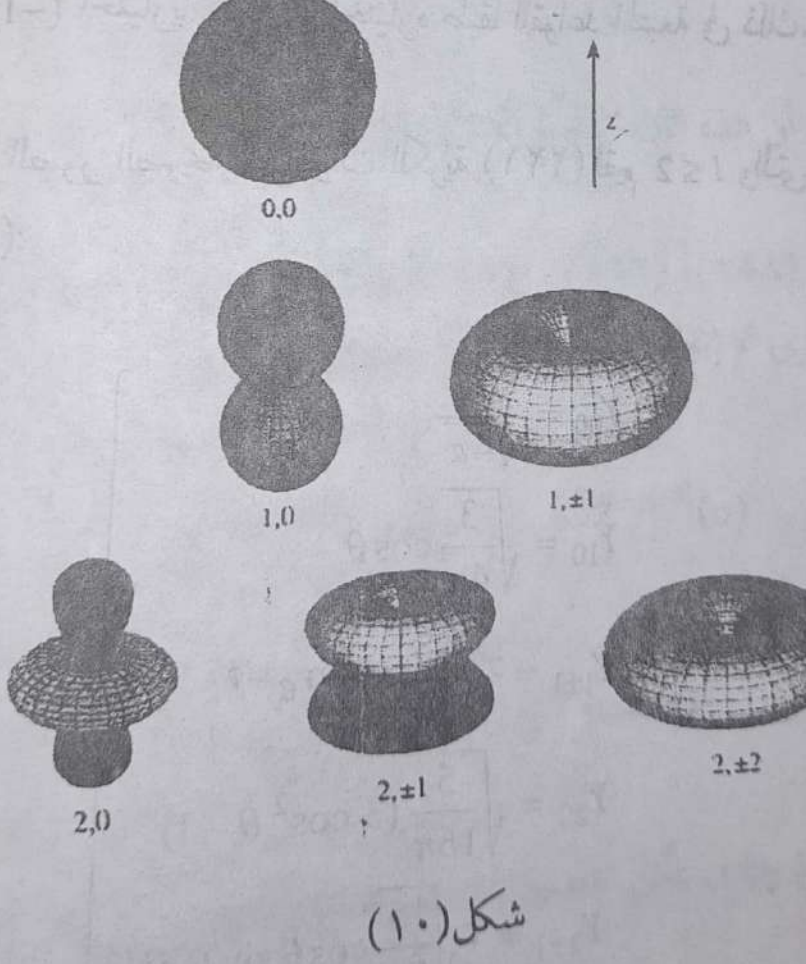
$$m\geq 0 \qquad (٢21)$$

معامل الطور $(-1)^m$ اختيارياً ولكن تم اختياره طبقاً للقواعد المتبعة فى ذلك.

نعرض الآن بعض الصور الصريحة للتوافقيات الكرية (٢٢١) لقيم $l\leq 2$ والتى توضح الأشكال المناظرة لها فى شكل (١٩):

$$\left.\begin{aligned}
Y_{00}&=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\\
Y_{10}&=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\\
Y_{1\pm1}&=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,e^{\pm i\phi}\\
Y_{20}&=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^{2}\theta-1)\\
Y_{2\pm1}&=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\,e^{\pm i\phi}\\
Y_{2\pm2}&=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^{2}\theta\,e^{\pm 2i\phi}
\end{aligned}\right\} \qquad (٢٢٢)$$

من الصفات الملحوظة من شكل (١٩) أن الدوال الموجية لها توجيه محدد فى الفراغ بالرغم من أن دالة الجهد متماثلة كروياً واتجاه محور z (والذى يعرف أحياناً بمحور التكميم) فى هذه الحالة اختيارياً. هذا التناقض الظاهرى يتم حله بنفس الطريقة مثل حالة الجسيم فى صنوق أحادى البعد والذى تم مناقشته فى الأجزاء السابقة. قبل كل شى يجب أن نلاحظ أن العدد الكمى m لم يتم استخدامه حتى الآن فى المعادلة (١٨٠) والذى يحدد مستويات الطاقة للنظام، لذلك يوجد دائماً عدد $2l+1$ حالة منحلة والتى تختلف فقط فى قيمة m المناظرة لها. إذا تم قياس الطاقة لمثل هذا النظام، لا يمكننا أن نحدد أى من هذه الدوال الموجية مناسب لوصف الحالة، لذلك نلجأ إلى حساب متوسط مربعات القيم المطلقة لهذه الدوال لحساب التوزيع الاحتمالى للموضع.



شكل(١٠)

نلاحظ أيضاً من شكل (١٩) والذى يمثل أشكال التوافقيات الكروية للأعداد الكمية l,m، حيث $l \leq 2$ بينما محور Z رأسياً، أنه فى حالة $m=0$، المناطق المظلمة والمضيئة لها إشارة مختلفة، بينما عندما $m \neq 0$، شكل الدالة يكون معقداً ويتغير طورها بمقدار $2m\pi$ خلال دورة كاملة للمحور z.

المعادلة القطرية:

سوف ندير اهتمامنا الآن إلى المعادلة القطرية (١٨٠) التى تحدد مستويات الطاقة للنظام. بالتعويض عن قيمة λ التى تم الحصول عليها من الحل الزاوى (٢٠٢)، ولا ننسى أن $\lambda' = 2m_e\lambda/\hbar^2$، لنحصل على:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}\right)R = ER$$

(٢٢٣)

المعادلة الأخيرة يمكن تبسيطها باستخدام التعويض $\chi(r) = r\,R(r)$ والذى يعطى:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}\right)\chi = E\chi \qquad (٢٢٤)$$

نلاحظ أن ما عدا الحد داخل القوس المربع، المعادلة (٢٢٤) تماثل فى الشكل معادلة شرودنجر أحادية البعد. على أى حال، سوف تطبق شروط حدية إضافية فى هذه الحالة، أى، χ يجب أن تساوى الصفر عند $r=0$ فيما عدا ذلك سوف يكون المقدار $R = r^{-1}\chi$ ربما يكون لانهائياً عند تلك النقطة. بإضافة إلى أن الدالة $\chi(r)$ مناسبة رياضياً، هذه الدالة لها المعنى الفيزيائى أن $|\chi|^2 dr$ يمثل احتمال تواجد الإلكترون عند مسافة بين r و $r+dr$ من نقطة الأصل مقاساً بالمتوسط على كل الاتجاهات. هذا يتأتى من الحقيقة التى تنص على أن هذا الاحتمال يمكن حسابه بتكامل $|\psi(r,\theta,\phi)|^2$ على قشرة كروية نصف قطرها r وسمكها dr. أى أنه يعطى من:

$$\left|R^2(r)\right| r^2\, dr \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \left|Y_{lm}(\theta,\iota)\right|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = \left|\chi^2(r)\right| dr \qquad (2٢5)$$

وذلك باستخدام (٢٢١).

لكى يمكننا التقدم للحصول على حل المعادلة القطرية (٢٢٤)، يجب معرفة شكل دالة الجهد $V(r)$، فى الوحدة التالية سوف نعتبر حالة خاصة والتى لها شكل معلوم لدالة الجهد وهى ذرة الهيدروجين.

(٤-٦) ذرة الهيدروجين:

الآن نحن فى موقف جيد يمكننا منها تطبيق النظرية الكمية على حالة فيزيائية حقيقية وهى لإلكترون يتحرك تحت تأثير نواة موجبة الشحنة. إذا كانت هذه النواة تتكون فقط من بروتون واحد، مثل هذا النظام يتمل فى ذرة الهيدروجين، على الرغم من أن النظرية يمكن تطبيقها على حالات أكثر عمومية مثلاً لذرة ذات عدد ذرى Z (وبالتالى تكون الشحنة النووية تساوى Ze) مع إزالة أحد الكتروناتها أى تصبح أيون موجب (على سبيل المثال $He^+, Li^+, etc.$). عامة مثل تلك الأنظمة توصف بأنها الذرات المشابهة لذرة الهيدروجين (*hydrogenic atom*). عودة إلى نظامنا المدروس وهو ذرة الهيدروجين يكون لدينا، طاقة الجهد للتفاعل بين الإلكترون والنواة تساوى $-Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r$، لذلك تصبح المعادلة (٧٦-٤-١) فى هذه الحالة فى الشكل الآتى:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}\right)\chi = E\chi \qquad (226)$$

حيث أننا افترضنا هنا أنّ الإلكترون يتحرّكُ في مجال نواة ثابتة، لكن هذا لَنْ يكون حقيقيا تماماً كما لو كانت النواة تتحرّكُ أيضاً في مجال الإلكترون. هذه الحركة النووية يُمْكِنُ أَنْ يتكونَ مسموح بها بنفس الطريقة بالضبط كما في الميكانيكا الكلاسيكية بأخذ r لِكى يكون المسافة بين النواةِ والإلكترون، و تكون μ الكتلة المختزلة للنواةِ (ذات الكتلة m_N) والإلكترون (ذو الكتلة m_e). أى أن،

$$\mu = m_N\, m_e /(m_N + m_e) \qquad (٢٢٧)$$

ولأن كتلة الإلكترون أصغرُ بكثير مِنْ تلك التى للنواةِ، نجد أن μ تقريباً مساوية بدرجة كبيرة لكتلة الإلكترون m_e وبالتالى نجد أن تأثير الحركةِ النوويةِ صغيرُ. على أية حال، بدلاً مِنْ استخدام الكتلةِ المختزلةِ في المعالجة النظرية، عنـدما يتم إجراء مقارنة النتائج النظرية بالتجربةِ المعملية تضبط القِيَم التجريبية لإزالة تأثير الحركة النوويةِ.

لإيجاد حل المعادلة (٢٢٦) سوف تحتوى المعالجة لتبسيط المعادلة بإجراء التعويض المناسب. لإنجاز ذلك، سوف نعرف متغيراً جديداً ρ حيث:

$$\rho = \sqrt{-8 m_e E/\hbar^2}\; r \qquad (٢٢٨)$$

وجب أن نلاحظ أن الطاقة E سالبة للحالات المحددة لأن دالة الجهد يكون لها قيمة صفرية عندما تئول r للانهاية. وبالتالى نجد أن:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} = -\frac{8 m_e E}{\hbar^2}\frac{d^2\chi}{d\rho^2} \qquad (٢٢٩)$$

ومنها تصبح المعادلة (٢٢٦) فى الصورة:

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} - l(l+1)\,\frac{\chi}{\rho^2} + \left(\frac{\beta}{\rho} - \frac{1}{4}\right)\chi = 0 \qquad (٢٣٠)$$

حيث الثابت β يعرف بالقيمة:

$$\beta = \sqrt{-\frac{m_e}{2E}}\,\frac{Z e^2}{4\pi\,\varepsilon_0\,\hbar} \qquad (٢٣١)$$

أولاً سوف نعتبر حل المعادلة (٢٣٠) فى الحالة الخاصة عندما تكون قيمة ρ كبيرة جداً حينها تصبح المعادلة (٢٣٠) فى الصورة:

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}-\frac{1}{4}\chi=0 \qquad (٢٣٢)$$

وباستخدام التعويض $\chi=e^{\alpha\rho}$ حيث $\frac{d^2\chi}{d\rho^2}=\alpha^2\chi$ نحصل على:

$$\chi(\rho)=Ae^{\rho/2}+Be^{-\rho/2} \qquad (٢٣٣)$$

وبإهمال الأس الموجب حيث أنه يئول إلى اللانهاية عند قيم ρ الكبيرة، لنحصل على:

$$\chi(\rho)=F(\rho)e^{-\rho/2} \qquad (٢٣٤)$$

والذى يمكن اقتراحه حلاً للمعادلة (٢٣٠). وبالتعويض فى (٢٣٠) نحصل على المعادلة التفاضلية الآتية:

$$\frac{d^2F}{d\rho^2}-\frac{dF}{d\rho}-l(l+1)\frac{F}{\rho^2}+\frac{\beta}{\rho}F=0 \qquad (٢٣٥)$$

الآن نبحث عن حل لتلك المعادلة فى صورة متسلسلة، ذلك نستخدم التعويض:

$$F=\sum_{p=1}^{\infty}a_p\rho^p \qquad (٢٣٦)$$

حيث أن الحد الأدنى للمجموع السابق هو $p=1$ وليس $p=0$، فيما عدا ذلك لن تكون F وبالتالى χ لن تساوى الصفر عندما $\rho=0$.

من هنا نجد أن:

$$\frac{dF}{d\rho}=\sum_{p=1}^{\infty}a_p\,p\,\rho^{p-1} \tag{٢٣٧}$$

$$\frac{d^2F}{d\rho^2}=\sum_{p=1}^{\infty}a_p\,p(p-1)\,\rho^{p-2}$$

$$=\sum_{p=1}^{\infty}a_{p+1}\,p(p+1)\,\rho^{p-1} \tag{٢٣٨}$$

أيضاً نجد أن:

$$F/\rho^2=\sum_{p=1}^{\infty}a_p\;\rho^{p-2}$$

$$=a_1\,\rho^{-1}+\sum_{p=1}^{\infty}a_{p+1}\;\rho^{p-1} \tag{٢٣٩}$$

بالتعويض من المعادلات (٢٣٦) - (٢٣٩) فى المعادلة (٢٣٥) نحصل على:

$$-l(l+1)\,a_1\,\rho^{-1}+\sum_{p=1}^{\infty}\Big[(p+1)\,p\,a_{p+1}-p\,a_p$$

$$-l(l+1)\,a_{p+1}+\beta\,a_p\Big]\,\rho^{p-1}=0 \tag{٢٤٠}$$

وحيث أن المعاملات لكل قوى ρ يجب أن تتلاشى يكون لدينا $a_1=0$ اذا لم يكون $l=0$، أيضاً

$$\frac{a_{p+1}}{a_p} = \frac{p-\beta}{p(p+1)-l(l+1)} \tag{٢٤١}$$

عند أخذ نهاية المعادلة الأخيرة عند اللانهاية نجد أن:

$$\lim_{p \to \infty} \frac{a_{p+1}}{a_p} = \lim_{p \to \infty} \frac{p-\beta}{p(p+1)-l(l+1)} = \frac{1}{p} \tag{242}$$

أولاً نلاحظ أن المقام فى المعادلة السابقة يساوى الصفر عندما $p = l$، والذى يستلزم أن a_{l+1} (والذى يتضمن أن كل المعاملات a_p، حيث $p > l$) يجب أن تكون لانهائية القيمة إذا لم تساوى قيمة a_l الصفر. أيضاً إذا كان $a_l = 0$، يتبع هذا من المعادلة (٢٤١) أن a_{l-1} , a_{l-2}, $etc.$, يجب أيضاً أن تساوى الصفر. من هذا نستنتج أن لكل المعاملات a_p التى لها $p \le l$ يجب أن تساوى الصفر ليمثل الحل دالة موجية فيزيائية حقيقية. نرى أيضاً أن المعادلة (٢٤٢) تماثل العلاقة التكرارية للحدود فى متسلسلة مفكوك المقدار e^{ρ} وكذلك مفكوك الدالة χ للمقدار $F e^{-\rho/2}$ (كما سبق فى الوحدة الرابعة من هذا الفصل)، سوف يتقارب مثل $e^{\rho/2}$ عندما $\rho \to \infty$. على أية حال، مثل حالة حلول المتذبذب التوافقى ودوال ليجيندر المذكورة سابقاً، هذا التقارب يُمنع بالتأكيد أن هذه المتسلسلة سوف تتوقف بعد عدد محدود من الحدود. وليحدث هذا عند الحد المشار إليه بالعدد المحدود n = $p = n$، يجب أن يكون لدينا:

$$\beta = n > l \tag{٢٤٣}$$

وبالتالى، باستخدام المعادلة (٢٣١) يكون:

$$E = E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2(4\pi \varepsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} \tag{٢٤٤}$$

هكذا نكون قد إشتققنا الصيغ الخاصة بمستويات الطاقةِ المنفصلةِ لذرة هيدروجينية بدلالة كتلةِ الإلكترون، الشحنة النووية والثوابت والأساسية، e ، $\hbar$ و ε_0. يجب ملاحظة أن مَستويات الطاقة (٢٤٤) لَيستْ فقط مستقلة عن العدد الكمى m ، كما هو مُتوقّعُ مِنْ المُناقشةِ السابقةِ، ولكنها مستقلة أيضاً عن l. هذا الإنحلال الإضافي إنما هو ميزّة محددة لجهد كولوم ولَيس خاصية عامّة للأنظمة المتماثلة كروياً.

الاختبار الدقيق للنظرية قد تطور بدرجة قوية حتى الآن حتى أنّنا يمكننا نُقارنُ هذه النتائج النظرية بتلك التى تم ملاحظتها بشكل تجريبي مِنْ لقياس الأطياف الذرّيةِ. رَأينَا في الفصلِ الأول أنّ أطياف خَطّ الهيدروجينِ يُمْكِنُ أَنْ تُحْسَبَ للحالة أذا فرض أن لذرّةِ الهيدروجينَ مجموعة من مستويات الطاقةِ تعطى مِن المعادلة (١٣٨):

$$E_n = -\frac{2\pi \hbar R_0 c}{n^2} \qquad (٢٤٥)$$

حيث n عدد صحيح موجب و R_0 ثابت رايدبيرج. بمقارنة المعادلتين (٢٤٤) و (٢٤٥) نلاحظ من النظرة الأولى أنهما متطابقتين لدرجة أنه يوجد اتفاق نوعى بين النظرية والتجربة. إذاً نجد أنه إذا تم عقد مقارنة نوعية تم فيها استخدام قيم الثوابت الأساسية المقاسة معملياً:

$$m_e = 9.10938188 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg} \qquad (٢٤٦)$$

$$\varepsilon_0 = 8.854187817 \times 10^{-12}\ \mathrm{F\ m^{-1}} \qquad (٢٤٧)$$

$$\hbar = 1.054571595 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\,s} \qquad (٢٤٨)$$

$$e = 1.602176462 \times 10^{-19}\ \mathrm{C} \qquad (٢٤٩)$$

$$c = 2.99792458 \times 10^{8}\ \mathrm{m\ s^{-1}} \qquad (٢٥٠)$$

بالتعويض بهذه القيم يؤدى بنا إلى تقدير قيمة ثابت رايدبيرج بالقيمة $R_0 = 10973731.6\ \mathrm{m}^{-1}$ وهى القيمة التى تم الحصول عليها فى الجزء الثانى بالوحدة الثالثة فى الباب الأول. أيضاً، نفس الإتفاق يمكن الحصول عليه لذرات هيدروجينية أخرى عند التعويض بالقيم المناسبة للشحنة النووية فى المعادلة (٢٤٤). هذه النتائج تمثل اختبار هام للنظرية الكمية، والتى عبرت بنجاح باهر. إن الاعتقاد فى الميكانيكا الكمية بالطبع لا يتوقف عند هذه النتيجة وحدها، فى الحقيقة أن هنال صيغة متطابقة مع المعادلة (٢٤٤) تم اشتقاقها بواسطة العالم نيلز بوهر باستخدام قديمة (تمت مناقشتها بالتفصيل فى الباب الأول) والتى ثبت بعد ذلك عدم صحتها عند تطبيقها على ذرات أخرى أكثر تعقيداً. علاوة على ذلك، بالرغم من أننا سنقارن نتائج الحسابات النظرية بالمعملية فى عديد من الأحيان عندها سنجد دائما اتفاق فى حدود الأخطاء المعملية، يوجد عدد قليل من أمثلة الكميات الفيزيائية والتى قيمها يمكن أن تقاس عملياً بدرجة عالية من الدقة وأيضاً يمكن حسابها بالضبط نظرياً بإيجاد حل لمعادلات كمية مناسبة لتمثيل النظام.

الدالة الموجية لذرة الهيدروجين:

سوف تم الآن دراسة ذرة الهيدروجين وذلك بمناقشة شكل دوالها الموجية المصاحبة لمستويات الطاقة المختلفة. رأينا سابقاً أن الجزء القطرى من الدالة الموجية متسق مع الشروط الحدية فقط إذا بدأت متسلسلة الدالة F (٢٣٦) عند الحد $p = l + 1$ وتوقفت عند الحد $p = n$. إذاً يكون لدينا:

$$F_n(\rho) = \sum_{p=l+1}^{n} a_p \rho^p \qquad (٢٥١)$$

حيث يمكن التعبير عن المعاملات a_p بدلالة المعاملات a_{l+1} باستخدام العلاقة التكرارية (٩٣-٤-١) بقيمة $\beta = n$. النتائج المصاحبة لهذه الشروط تعرف بكثيرات حدود لاقير (Laguerre polynomials). يمكننا استخدام المعادلة (٢٢٨) وتعريف ρ بدلالة r للحصول على $\chi(r)$ وبالتالى $R(r)$. هذا يمكن تركيبه مع التوافق الكروى المناسب للحصول على التعبير الكامل للجزء

المعتمد على الزمن من الدالة الموجية $u(r, \theta, \phi)$. هذا بالتالى سوف يتم معايرته إذا تم معايرة التوافق الكروى طبقاً للصيغة (٢١٩) ويتم اختيار الثابت a_{l+1} بحيث:

$$\int_0^{\infty} |R|^2 r^2 \, dr = 1 \qquad (٢٥٢)$$

ويكون لدينا:

$$u_{nlm} = R_{nl}(r) \, Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (٢٥٣)$$

حيث تبين اللواحق اعتماد الدوال المختلفة على الأعداد الكمية n، l و m.

الآن، الدوال الموجية المناظرة للحالات الخمس ذات أقل قيمة من الطاقة تتحدد فى الصيغ الآتية:

$$u_{100} = \sqrt{Z^3 / \pi a_0^3} \; e^{-Z r / 2 a_0} \qquad (٢٥٤)$$

$$u_{200} = \sqrt{Z^3 / 8\pi a_0^3} \; (1 - Z r / 2 a_0) \; e^{-Z r / 2 a_0} \qquad (255)$$

$$u_{210} = \sqrt{Z^3 / 32\pi a_0^3} \; (Z r / a_0) \cos\theta \; e^{-Z r / 2 a_0}$$

(256)

$$u_{21\pm1} = \mp\sqrt{Z^3 / \pi a_0^3} \; (Z r / 8 a_0) \sin\theta \; e^{\pm i\phi} \; e^{-Z r / 2 a_0} \qquad (257)$$

حيث الثابت a_0 يمثل نصف قطر بوهر والذى أعطيت قيمته أيضاً فى الباب الأول بالقيمة:

$$a_0 = 4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 = 0.5291766 \times 10^{-10} \text{ m} \qquad (258)$$

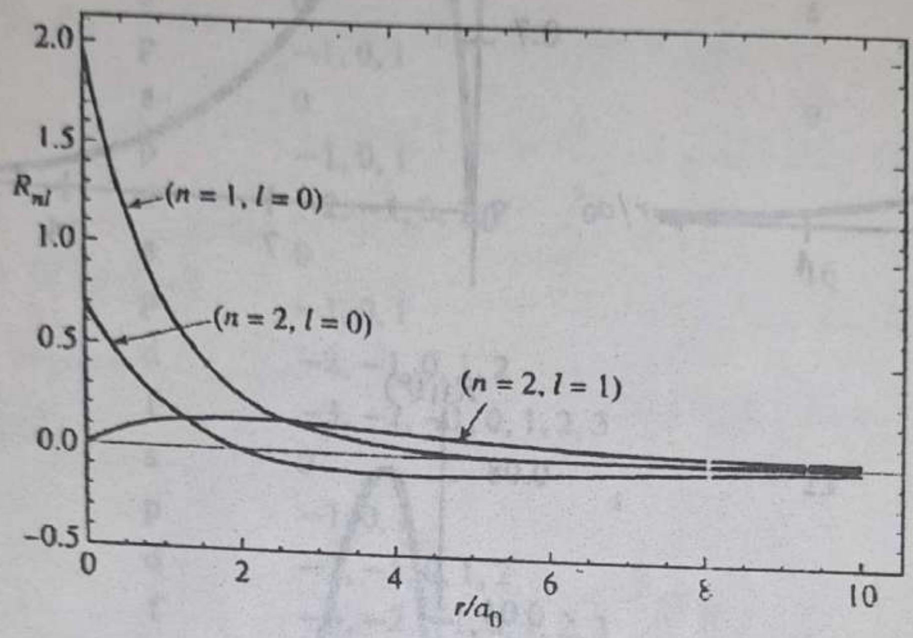
قيمة العدد الكمى l تعرف غالباً بشفرة حرفية خاصة، أى أن: الحالات التى لها $l = 0, 1, 2$ and 3 يشار إليها بالرموز s, p, d and f على الترتيب. هذه الحروف أحياناً تحدد بداية بعدد مساوى للعدد الكمى n، لذلك فإن، الحالة الأولى الممثلة بالمعادلة (254) تعرف بحالة $1s$، الحالة الثانية (255) تعرف بالحالة $2s$، أما الحالات الثلاث الأخيرة (256) و (257) فتعرف بالحالات $2p$..

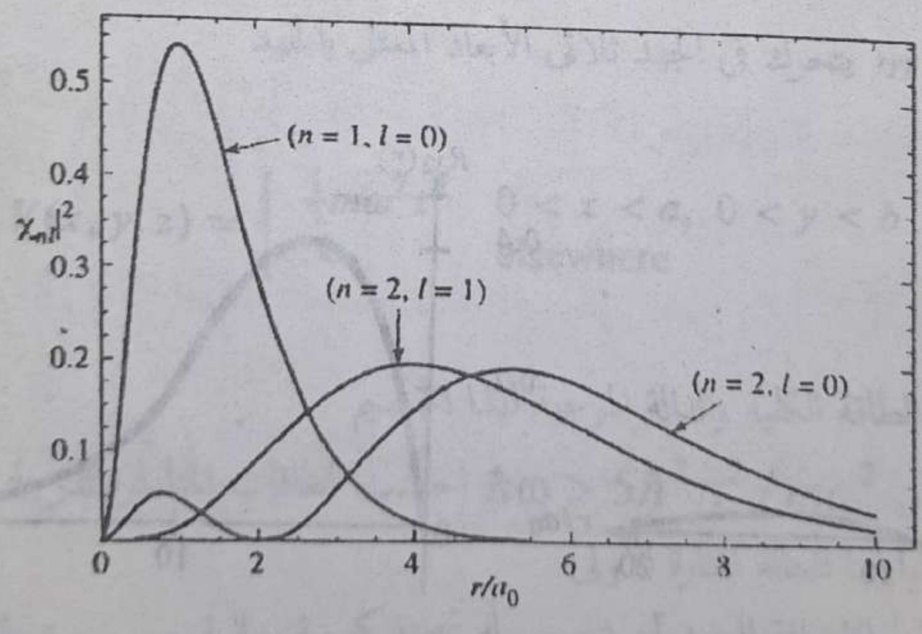
الجزر القطرى من الداول الموجية (245) ـ (257) تم رسمه كدوال فى r فى شكل (٢٠) فى حالة ذرة الهيدروجين حيث $Z = 1$. نلاحظ أن الثابت a_0 يميز اتساع الدالة الموجية للحالة الأرضية (حالة أقل طاقة) بينما يزيد هذا الاتساع للحالات ذات الطاقة الأعلى.

إذا تم استخدام المعادلة (258) فى المعادلة (244) يمكننا التعبير عن قيم الطاقة بدلالة نصف قطر بوهر a_0 كالآتى:

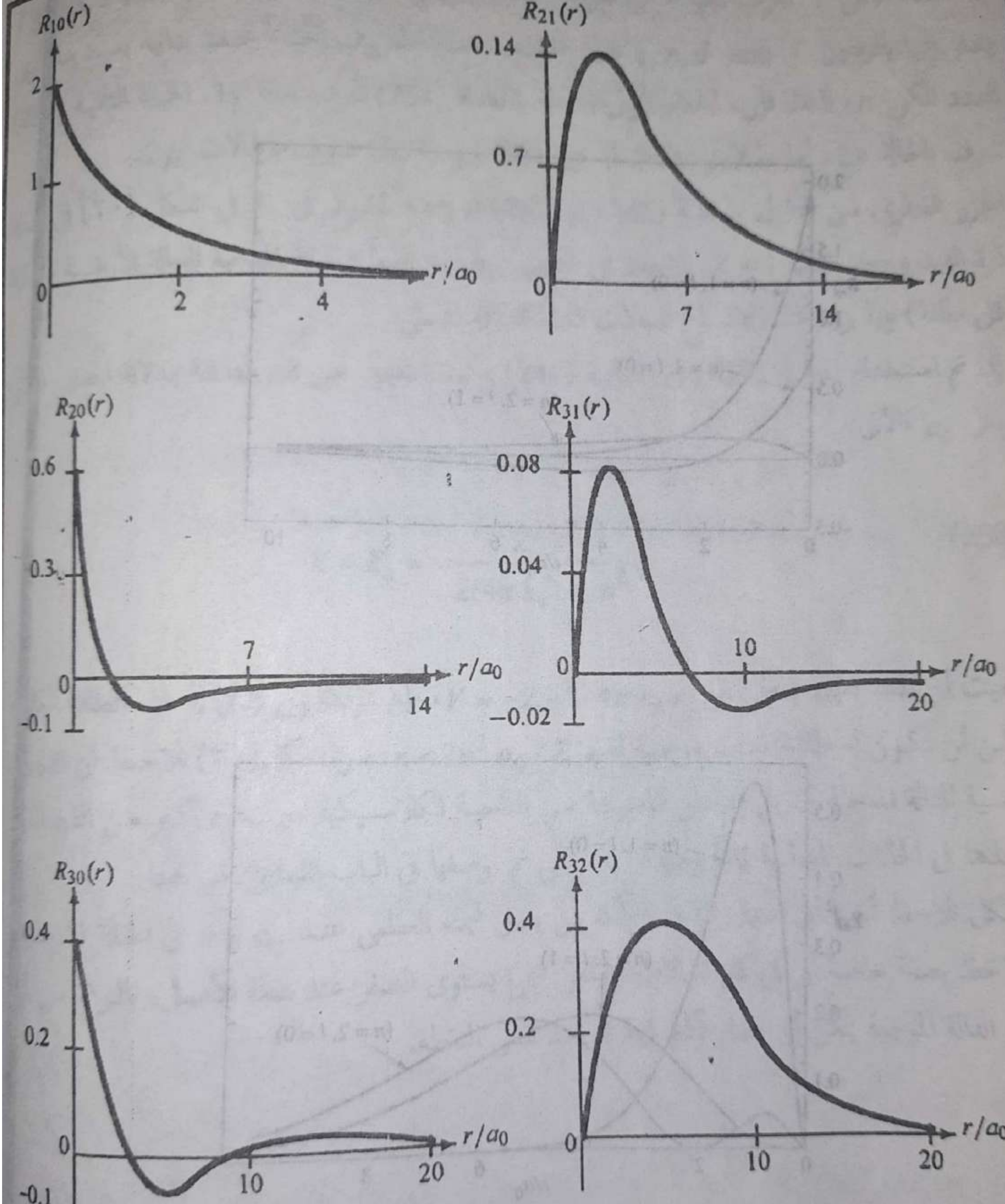
$$E = E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2(4\pi\,\varepsilon_0)\, a_0\, n^2} \tag{258}$$

وحيث أن طاقة الجهد تعطى من $V = -Z e^2 / 4\pi\,\varepsilon_0\, r$، فإن الإلكترون الذى له هذه الطاقة الكلية يمكن أن تكون له طاقة تحرك موجبة لقيم $r < 2n^2\, a_0 / Z$. من شكل (٢٠) نلاحظ أن الذيول الأسية للدالة الموجية تخترق المناطق الممنوعة من الناحية الكلاسيكية حيث r أكبر من القيم التى يأخذها فى الحالات المشابهة تماماً وحيدة البعد التى تم وصفها فى الباب السابق. من هذا الشكل نلاحظ أيضاً أن احتمال تواجد الإلكترون يصل قيمتة العظمى عند $r = a_0$ فى الحالة الأرضية. ونلاحظ بصفة خاصة أن فى كل الحالات المقدار $|\chi|^2$ يساوى الصفر عند نقطة الأصل، بالرغم من أن مربع الدالة الموجية يمكن أن يصل أكبر قيمة له عند نفس النقطة.


2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
R_{nl}
(n = 1, l = 0)
(n = 2, l = 0)
(n = 2, l = 1)
0
2
4
6
8
10
r/a_0


0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
$|\chi_{nl}|^2$
(n = 1, l = 0)
(n = 2, l = 1)
(n = 2, l = 0)
0
2
4
6
8
10
r/a_0

شكل(١١)



شكل(١٢) الدالة الموجية القطرية لذرة الهيدروجين

n	l	orbitals	m	g_n	E_n
1	0	s	0	1	$-e^2/(2a_0)$
2	0	s	0	4	$-e^2/(8a_0)$
	1	p	−1, 0, 1		
3	0	s	0	9	$-e^2/(18a_0)$
	1	p	−1, 0, 1		
	2	d	−2, −1, 0, 1, 2		
4	0	s	0	16	$-e^2/(32a_0)$
	1	p	−1, 0, 1		
	2	d	−2, −1, 0, 1, 2		
	3	f	−3, −2, −1, 0, 1, 2, 3		
5	0	s	0	25	$-e^2/(50a_0)$
	1	p	−1, 0, 1		
	2	d	−2, −1, 0, 1, 2		
	3	f	−3, −2, −1, 0, 1, 2, 3		
	4	g	−4, −3, −2, −1, 0, 1, 2, 3, ٤		

جدول (٢) مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين ودرجات انحلال كل منها

مثال: جسيم كتلته m يتحرك فى الجهد ثلاثى الأبعاد الممثل بالجهد

$$V(x,y,z)=\begin{cases}\frac{1}{2}m\omega^2z^2 & 0<x<a,\ 0<y<b\\ \infty & \text{elsewhere}\end{cases}$$

(أ) احسب الطاقة الكلية والدالة الموجية لهذا الجسيم

(ب) بفرض أن $\hbar\omega > 5\hbar^2\pi^2/ma^2$ احسب الطاقات المناظرة لدرجات الانحلال للحالة الأرضية وأيضا للحالة المثارة الأولى

(ت) بفرض أن بالإضافة للجهد أن الجسيم له شحنة كهربية سالبة $-q$ مرتبطة بمجال كهربى ε فى اتجاه محور z حيث يعطى مؤثر هاملتون لها فى اتجاه محور z فى الصورة

(ث)

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - q\epsilon z$$

اشتق صيغة الطاقة E_{n_z} لهذا الجيم وأيضا الطاقة الكلية $E_{n_x n_y n_z}$. أيضا أوجد طاقات الجسيم ودرجات الانحلال المناظرة للحالة الأرضية والحالة المثارة الأولى.

الحل:

(أ) الجهد ثلاثى الأبعاد يتكون من ثلاث معادلات احادية البعد مستقلة عن بعضها البعض وهى على التوالى الجهد فى تاجاه محور x وفى اتجاه محور y ومتذبذب توافقى فى اتجاه محور z ولذلك تعطى الطاقة من

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right) + \hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right)$$

وتعطى الدالة الموجية من

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = X_{n_x}(x) Y_{n_y}(y) Z_{n_z}(z) = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi n_x}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi n_y}{a}y\right) Z_{n_z}$$

حيث $Z_{n_z}(z)$ تمثل الدالة الموجية للمتذبذب التوافقى والتى تعطى بدلالة الدالة الهرميتية فى الصورة

$$Z_{n_z}(z) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,2^{n_z} n_z!\, z_0}} e^{-z^2/2z_0^2} H_{n_z}\left(\frac{z}{z_0}\right)$$

حيث $z_0 = \sqrt{\pi\hbar/(m\omega)}$.

(ب): طاقة الحالة الأرضية تعطى من

$$E_{110} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

وتعطى طاقة الحالة المثارة الأولى من

$$E_{120} = E_{210} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

(جـ): لكى نحصل على طاقات مؤثر هاملتون

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - q\epsilon z$$

هذا يعنى أن تلك الطاقات هى طاقة المتذبذب التوافقى مع انحراف ناحية النقصان مقداره

$q^2\epsilon^2/(2m\omega^2)$

أى أن

$$E_{n_z} = \hbar\omega(n_z + 1/2) - q^2\varepsilon^2/(2m\omega^2)$$

وكنتيجة لهذا تعطى الطاقة الكلية من

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right) + \hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}$$

وتعطى طاقات الحالة الأرضية والحلة المثارة الأولى على الترتيب من

$$E_{110} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}$$

$$E_{120} = E_{210} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{3\hbar\omega}{2} - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}$$

مثال: لإلكترون محبوس داخل الجهد الكرى

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ +\infty, & r > a. \end{cases}$$

(أ): باستخدام معادلة شرودنجر القطرية، احسب الطاقات والدوال الموجية المعايرة المناظرة لها للحالة التى لها كمية الحركة الزاوية المدارية للإلكترون تساوى الصفر أى أن $l = 0$.

(ب): بين أن أقل طاقة للحالة $l = 7$ تقع أعلى ثانى لأقل طاقة للحالة $l = 0$.

(جـ): احسب احتمال تواجد الإلكترون داخل كرة نصف قطرها $a/2$ وأيضا داخل قشرة كروية سمكها $a/2$ تقع بين $r = a$ و $r = 3a/2$.

الحل:

(أ): حيث أن $V(r) = 0$ فى المنطقة $r \le a$ تعطى معادلة شرودنجر القطرية من

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{\hbar^2 r^2}U_{nl}(r)\right] = EU_{nl}(r)$$

حيث $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$. للحالة حيث $l = 0$ تتقلص المعادلة إلى

$$\frac{d^2U_{n0}(r)}{dr^2} = -k_n^2 U_{n0}(r)$$

حيث $k_n^2 = 2mE_n/\hbar^2$. ويصبح الحل العام لهذه المعادلة التفاضلية فى الصورة

$$U_{n0}(r) = A\cos(k_n r) + B\sin(k_n r)$$

أو

$$R_{n0}(r) = \frac{1}{r}\left(A\cos(k_n r) + B\sin(k_n r)\right)$$

وحيث أن $R_{n0}(r)$ محددة عند نقطة الأصل أو بمعنى آخر $U_{n0}(0) = 0$ يصبح المعامل A مساويا للصفر. بالإضافة إلى أن الجهد غير محدود عند الحوائط $r = a$ أى أنه حائط لا يمكن اختراقه لابد أن تتلاشى الدالة القطرية $R_{n0}(a)$ أى أن

$$R_{n0}(a) = B\frac{\sin k_n a}{a} = 0$$

وذلك لا يتحقق إلا إذا كانت

$$ka = n\pi, n = 1, 2, 3, \ldots$$

هذه العلاقة تؤدى إلى

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

أما معايرة الدالة الموجية القطرية $R(r)$

$$\int_0^a |R_{n0}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

فيؤدى إلى

$$1 = |B|^2\int_0^a \frac{1}{r^2}\sin^2(k_n r)r^2 dr = \frac{|B|^2}{k_n}\int_0^{k_n a}\sin^2\rho\, d\rho = \frac{|B|^2}{k_n}\left(\frac{\rho}{2} - \frac{\sin 2\rho}{4}\right)\Big|_{\rho=0}^{\rho=ka}$$

$$= \frac{1}{2}|B|^2 a$$

مما يؤدى إلى

$$B = \sqrt{2/a}.$$

وتصبح الدالة الموجية القطرية المعايرة فى الصورة

$$R_{n0}(r) = \sqrt{\frac{2}{a}}\frac{1}{r}\sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}r\right)$$

(ب): للحالة $l = 7$

$$E_1(l=7) > V_{eff}(l=7) = \frac{56\hbar^2}{2ma^2} = \frac{28\hbar^2}{ma^2}$$

وتعطى ثانى أدنى طاقة للحالة $l = 0$ وهى حالة $3s$ والتى لها الطاقة

$$E_2(l=0) = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

حيث $n = 2$، نجد أن

$$E_1(l=7) > E_2(l=0).$$

(جـ): حيث أن احتمال تواجد الإلكترون داخل كرة نصف قطرها a يساوى الواحد الصحيح فإن احتمال تواجده داخل كره نصف قطرها $a/2$ يساوى $1/2$. أيضا فإن احتمال تواجد الإلكترون داخل قشرة كرية بين $r = a$ و $r = 3a/2$ يساوى الصفر حيث أن الإلكترون لا يمكنه اختراق جهد لا نهائى القيمة من $r < a$ إلى $r > a$.

مثال: أوجد الدلة الموجية والطاقة للحالة $l = 0$ لجسيم كتلته m يتحرك فى الجهد المركزى الآتى:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & a < r < b \\ \infty, & \text{elsewhere} \end{cases}$$

الحل: يتحرك الجسيم كرتين لهما نصفى الأقطار $r = a$ و $r = b$. المعادلة القطرية للحالة $l = 0$ بين $a < r < b$ يمكن كتابتها فى الصورة

$$\frac{d^2U_{n0}(r)}{dr^2} + k^2U_{n0}(r) = 0$$

حيث $U_{n0}(r) = rR_{n0}(r)$ and $k^2 = 2mE/\hbar^2$.

وحيث أن الحل يجب أن يحقق الشرط $U_{n0}(a) = 0$ يمكننا كتابة

$$U_{n0}(r) = A\sin[k(r-a)]$$

الدالة الموجية القطرية تساوى الصفر فى كل مكان أى أن $U_{n0}(r) = 0$ للحالات $0 < r < a$ و $r > b$، علاوة على ذلك الدالة الموجية القطرية يجب أن تتلاشى عند $r = b$ أى أن $U_{n0}(b) = 0$. ولذلك لدينا

$$A\sin[k(b-a)] = 0 \implies k(b-a) = n\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

بربط المعادلة الأخيرة مع

$$k^2 = 2mE/(\hbar^2)$$

نحصل على

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(a-b)^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

وبمعايرة الدالة الموجية نحصل على الثابت A

$$1 = \int_a^b r^2 R_{n0}^2(r) dr = \int_a^b U_{n0}^2(r) dr = A^2 \int_a^b \sin^2[k(r-a)]\, dr$$

$$= \frac{A^2}{2} \int_a^b \{1 - \cos[2k(r-a)]\}\, dr = \frac{b-a}{2} A^2$$

أى أن

$$A = \sqrt{2/(b-a)}$$

وحيث أن $k_n = n\pi/(b-a)$ تعطى الدالة الموجية القطرية المعايرة بالصورة

$$R_{n0}(r) = \frac{1}{r} U_{n0}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{b-a}} \frac{1}{r} \sin[\frac{n\pi(r-a)}{b-a}] & a < r < b \\ 0 & \text{elsewhere.} \end{cases}$$

لكى نحصل على الدالة الموجية $\psi_{nlm}(\vec{r})$ نحتاج ببساطة لقسمة الدالة الموجية القطرية على المقدار $1/\sqrt{4\pi}$ لأنه فى الحالة $l = 0$ تعتمد الدالة الموجية $\psi_{n00}(r)$ على أنه لا يوجد درجات حرية زاوية، انما تعتمد فقط على نصف القطر

$$\psi_{n00}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{n0}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{4\pi(b-a)}} \frac{1}{r} \sin[\frac{n\pi(r-a)}{b-a}] & a < r < b \\ 0 & \text{elsewhere.} \end{cases}$$

مثال:

(أ): للحالات الآتية احسب قيمة r والتى عندها يصل الكثافة الاحتمالية القطرية لذرة الهيدروجين قيمته العظمى (١) $n=1, l=0, m=0$ (٢) $n=2, l=1, m=0$

(٣) $l=n-1, m=0$

(ب): قارن النتائج بنصف قطر بوهر للمدارات الدائرية.

الحل:

(أ): حيث أن الدالة الموجية القطرية للحالة $n=1, l=0$ تكون فى الصورة

$$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2}e^{-r/a_0}$$

تعطى الكثافى الاحتمالية من

$$P_{10}(r) = r^2|R_{10}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3}r^2e^{-2r/a_0}$$

(١): القيمة العظمى للاحتمال $P_{10}(r)$ تحدث عند r_1 حيث

$$\left.\frac{dP_{10}(r)}{dr}\right|_{r=r_1} = 0 \implies 2r_1 - \frac{2r_1^2}{a_0} = 0 \implies r_1 = a_0$$

(٢) بالمثل لأن $R_{21}(r) = 1/(2\sqrt{6}a_0^{5/2})re^{-r/2a_0}$ نجد أن

$$\left.\frac{dP_{21}(r)}{dr}\right|_{r=r_2}=0 \implies 4r_2^3-\frac{r_2^4}{a_0}=0 \implies r_2=4a_0$$

(ب): الدالة الموجية القطرية للحالة $l=n-1$ يمكن الحصول عليها من

$$R_{n(n-1)}(r)=-\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{2n[(2n-1)!]^3}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^{(n-1)}e^{-r/na_0}L_{2n-1}^{2n-1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

من الخواص التالية لكثيرات حدود ليجيندر

$$L_k^N(r)=\frac{d^N}{dr^N}L_k(r)$$

$$L_k(r)=e^r\frac{d^k}{dr^k}(r^ke^{-r})$$

يمكن اثبات أن كثيرات حدود ليجيندر المصاحبة L_{2n-1}^{2n-1} تساوى مقدار ثابت أى أن

$$L_{2n-1}^{2n-1}(y)=-(2n-1)!$$

وبالتالى يمكننا كتابة $R_{n(n-1)}(r)$ فى الصورة

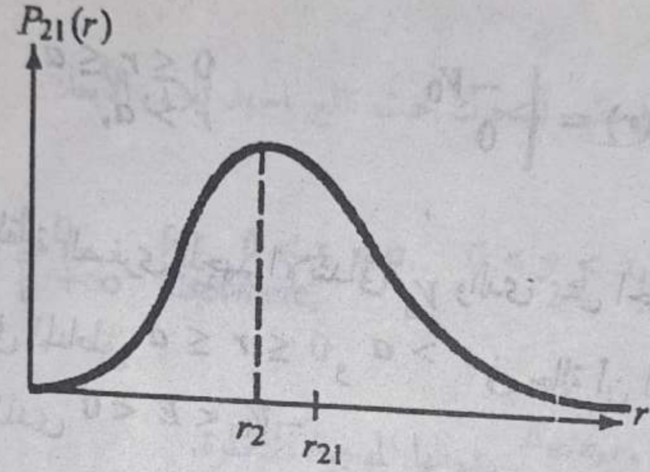
$$R_{n(n-1)}(r)=A_nr^{n-1}e^{-r/na_0}$$

حيث A_n مقدار ثابت. وبالتالى تعطى الكثافة الاحتمالية من

$$P_{n(n-1)}(r) = r^2|R_{n(n-1)}(r)|^2 = A_n^2 r^{2n} e^{-2r/na_0}$$

وتعطى القيمة العظمى للكثافة الاحتمالية من

$$\left.\frac{dP_{n(n-1)}(r)}{dr}\right|_{r=r_n} = 0 \implies 2nr_n^{2n-1} - \frac{2r_n^{2n}}{na_0} = 0 \implies r_n = n^2 a_0$$



شكل (١٣): الكثافة الاحتمالية $P_{21}(r) = a_0^5 r^4 e^{-r/a_0}/24$ والتى تتماثل حول قيمتها العظمى $r_2 = 4a_0$،
حيث متوسط r يساوى $r_{21} = 5a_0$ ويساوى التساع فى الكثافة الاحتمالية $\Delta r_{21} = \sqrt{5}a_0$

(ب): قيم r_n فى المعادلات السابق، ليس إلا أنصاف أقطار بوهر للمدارات الدائرية حيث $r_n = n^2 a_0$.
ويعطى نصف قطر بوهر $r_n = n^2 a_0$ موضع القيمة العظمى لكثافة الاحتمال لإلكترون فى ذرة الهيدروجين.

تمرين (١٩): اعتبر الحالة $l = 0$ لنظام ما لكوكبين لهما الكتلة m ويتحركان تحت تأثير الجهد $V(r) = kr$.

(أ): باستخدام نموذج بوهر: أوجد سرعة ونصف قطر وطاقة النظام فى حالة المدارات الدائرية. عين أيضا التردد الزاوى للإشعاع الناتج من انتقال النظام من الحالة n إلى الحالة m.

(ب): أوجد حل معادلة شرودنجر للجهد المركزى $V(r) = kr$ للكوكبين ثم أوجد صيغ الطاقة والدلة الموجية القطرية $R_{nl}(r)$. قارن قيمة الطاقة الناتجة مع قيمتها فى (أ)

(جـ): استخدم الصيغ المشتقة فى (أ) و (ب) لحساب مستويات الطاقة الأربعة الأدنى طاقة للنظام لقيم العدد الموجى $k = 15\ GeV\ fm^{-1}$ حيث تعطى قيمة الكتلة $mc^2 = 4.4\ GeV$.

تمرين (٢٠): اعتبر النظام لجسيمين لهما الكتلة m والذى يتحرك تحت تأثير الجهد المركز المحدود

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \le r \le a \\ 0 & r > a, \end{cases}$$

حيث V_0 موجبة. أوجد القيمة الصغرى للجهد الابتدائى V_0 والذى يمثل الجهد عند $l = 0$، أوجد حل معادلة شرودنجر القطرية فى المناطق $0 \le r \le a$ و $r > a$ فى حالة أن للجسيم كمية حركة زاوية صفرية وطاقة متمركزة فى المدى $-V_0 < E < 0$.

تمرين(٢١): لجسيم كتلته m يتحرك فى المستوى xy فى الجهد

$$V(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 & \text{for all } y \text{ and } 0 < x < a \\ +\infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

(أ): أكتب صيغة معادلة شرودنجر غير المستقرة لهذا الجسيم ثم اختصرها إلى مجموعة من المعادلات ذات البعد الواحد

(ب): أوجد القيم المتوسطة وقيم الطاقة المعايرة

تمرين (٢٢): لجسيم كتلته m يتحرك فى المستوى xy فى الجهد

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a, \quad 0 < y \le b \\ +\infty & \text{elsewhere,} \end{cases}$$

عن طريق اختصار معادلة شرودنجر غير المستقرة إلى مجموعة من المعادلات أحادية البعد، أوجد الدالة الموجية المعايرة ومستويات الطاقة لهذا الجسيم.

تمرين (٢٣): لجسيم كتلته m مقيد ليتحرك تحت تاثير الجهد ثلاثى الأبعاد

$$\hat{V}(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{for } \; 0 < x < a, \quad 0 < y < a, \quad 0 < z < b \\ +\infty & \text{elsewhere,} \end{cases}$$

(أ): احسب الطاقة الكلية $E_{n_x n_y n_z}$ ودوالها الموجية المناظرة.

(ب): إذا كان $a = 2b$ أوجد طاقات الخمس مستويات للحالات الخمس الأولى.

تمرين (٢٤): لجسيم كتلته m مقيد. ليتحرك تحت تاثير الجهد ثلاثى الأبعاد

$$V(x,y,z) = \begin{cases} \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 & \text{for } 0 < x < a, \; 0 < y < a \text{ and } z > 0 \\ +\infty & \text{elsewhere,} \end{cases}$$

(أ): أكتب صيغة معادلة شرودنجر لهذا الجسيم ثم اختصرها إلى مجموعة من المعادلات أحادية البعد ثم أوجد الدالة الموجية المعايرة $\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z)$.

(ب): أوجد قيم الطاقة المسموح بها لهذا الجسيم واثبت أنها يمكن أن تكتب فى الصورة

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x n_y} + E_{n_z}$$

(جـ): أوجد طاقات أول أربع مستويات طاقة فى المستوى xy (أى $E_{n_x n_y}$).