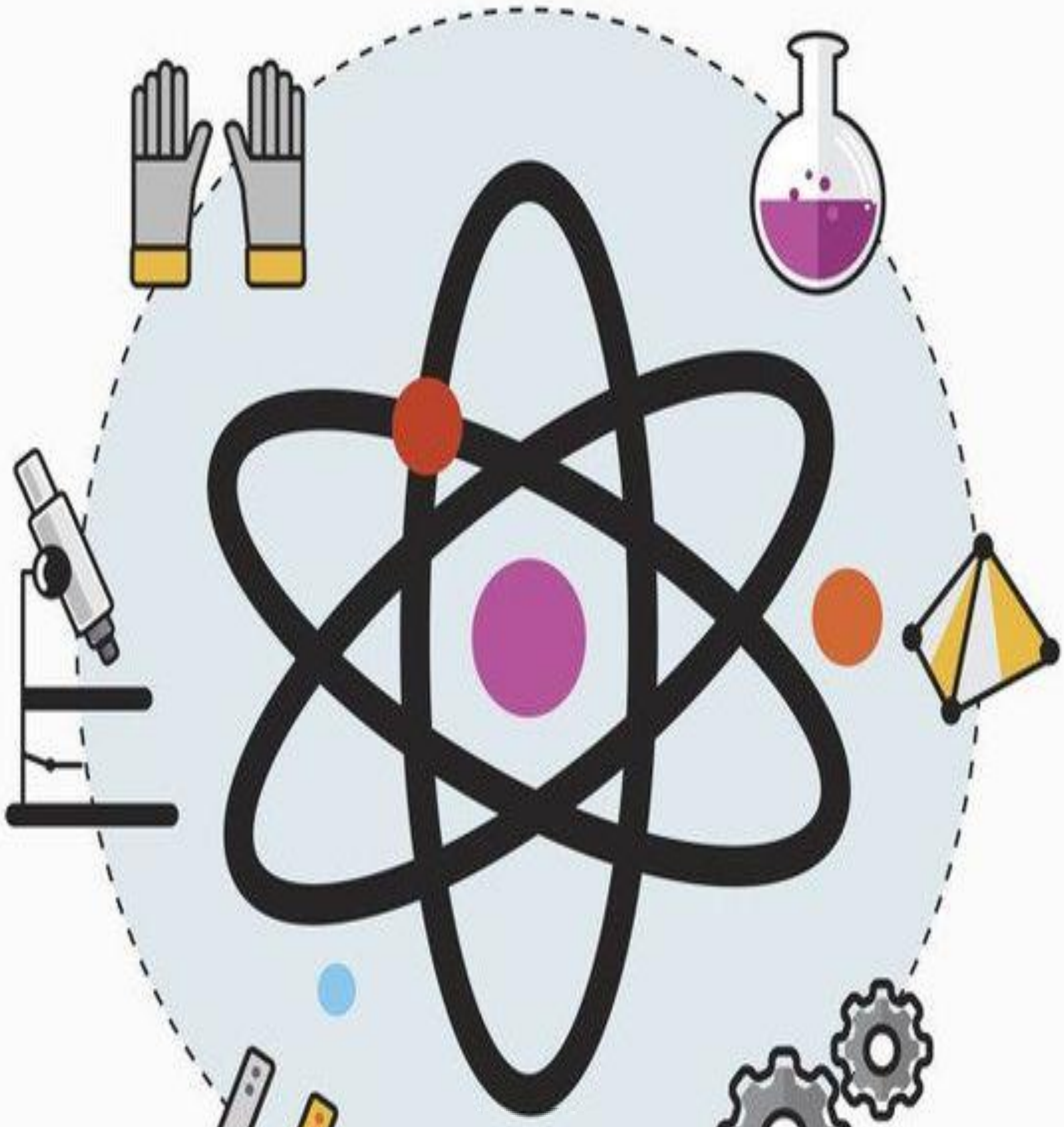
تطبيقات نظرية الكم



د. أسماء سيد

مدرس الفيزياء النظرية

كلية العلوم- جامعة جنوب الوادي

2023-2024

Chapter Three

Free Particle الجسيم الحر

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

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

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

معادلة شرودنكر الغيرمعتمدة على الزمن في بعد واحد

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

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

نضرب في $\frac{-2m}{\hbar^2}$

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

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

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

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

الحل العام للمعادلة (1) تكون بالشكل التالي

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

حيث A ، B ثابتين اختياريين

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

والان نطبق الحل على بعض الحالات الخاصه للجسيم الحر

1. الحالة الاولى:

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

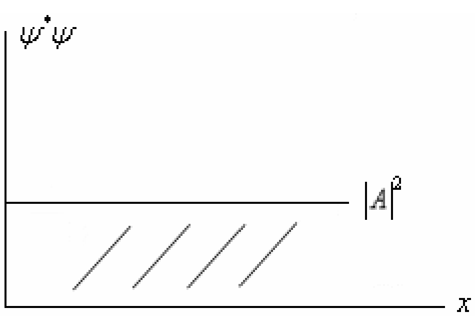
$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

وكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

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

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

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



وهذا يعني ان كثافة الاحتمالية عند اي نقطة تساوي مقدار ثابت

2. الحالة الثانية:

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

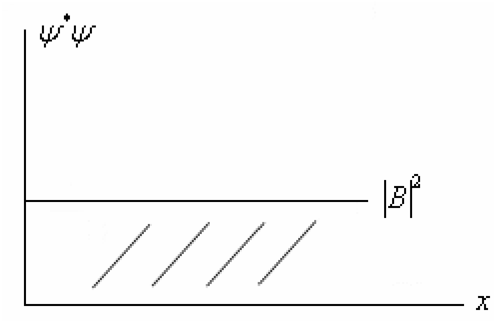
$$\psi(x) = Be^{-ikx}$$

فكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

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

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

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



وهذا يعني ان كثافة الاحتمالية عند اي نقطة تساوي مقدار ثابت

3. الحالة الثالثة

اذا اخذنا حركة الجسيم في كلا الاتجاهين

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

فكثافة الاحتمالية لوجود هذا الجسيم

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

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

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

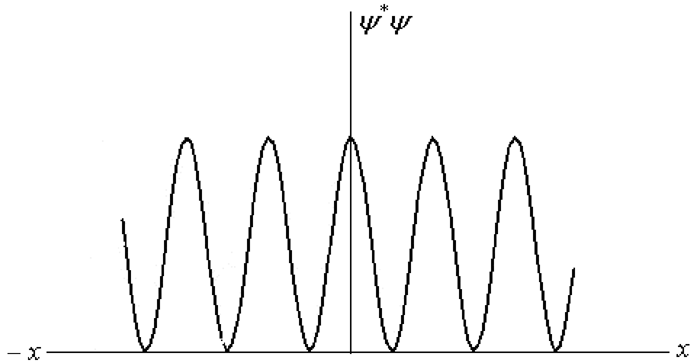
$$|\psi(x)|^2 = 2A^*A + A^*A\,(e^{2ikx} + e^{-2ikx})$$

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

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

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

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



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

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

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

<u>Solution</u>:

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

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

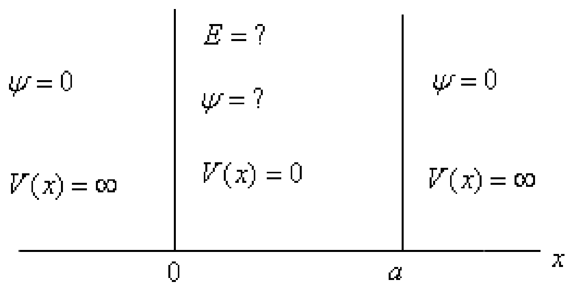
$$\therefore \; \Delta p_x = 0$$

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

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

Particle in Potential Box جسيم في صندوق

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

حل هذه المعادلة يكون

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

ولايجاد المقدارين الثابتين A ، B نستخدم الشرطين الحدوديين الاتيين

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

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

اولا عند $x = 0$

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

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

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

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

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

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

حيث $C = 2iA$

ثانيا عند $\mathrm{x = a}$

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

الثابت C لايمكن ان يساوي صفر

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

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

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

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

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

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

نستطيع ان نستنتج جملة من النقاط المهمة

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

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

الحالة الارضية

$n=2 \qquad E_2=4E_1$

$n=3 \qquad E_3=9E_1$

$n=4 \qquad E_4=16E_1$

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

$$n=4 \ \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} \ E_4=16E_1$$

$$n=3 \ \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} \ E_3=9E_1$$

$$n=2 \ \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} \ E_2=4E_1$$

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

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

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

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

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

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

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

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

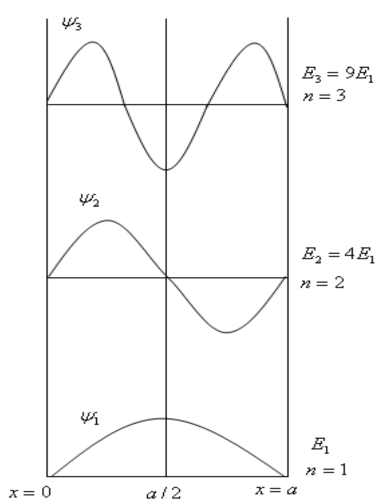
$$\frac{1}{2}C^2 \left\{ x\Big|_0^a - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)\sin(2n\pi x/a)\Big|_0^a \right\} = 1$$

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

$$\frac{1}{2}C^2 a = 1 \longrightarrow \quad C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

والشكل يوضح الدالات الموجية الثلاثة الاولى ψ_1 ، ψ_2 ، ψ_3



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

Solution:

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

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

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

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

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

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

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

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

Solution:

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

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

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

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

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

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

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

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

<u>Solution</u>:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Solution:

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

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

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

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

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

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

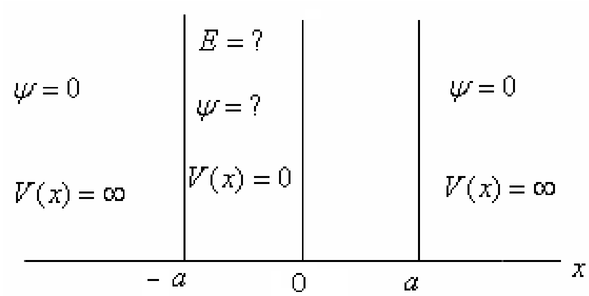
$$\frac{1}{a}(x)\Big|_0^a - \frac{1}{a}\frac{a}{2n\pi}\sin(\frac{2n\pi\, x}{a})\Bigg|_0^a$$

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

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

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

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



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

وأثبت أن

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

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

Solution :

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

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

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

ولايجاد المقدارين الثابتين A ، B نستخدم الشرطين الحدوديين الاتيين

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

عند $\mathrm{x}=\mathrm{a}$

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

عند $\mathrm{x}=-\mathrm{a}$

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

وهاتان المعادلتان تعطينا

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

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

اما $A=0$ و $\cos ka=0$ a

او $B=0$ و $\sin ka=0$ b

وهاتان النتيجتان تتضمنا المعنى التالي

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

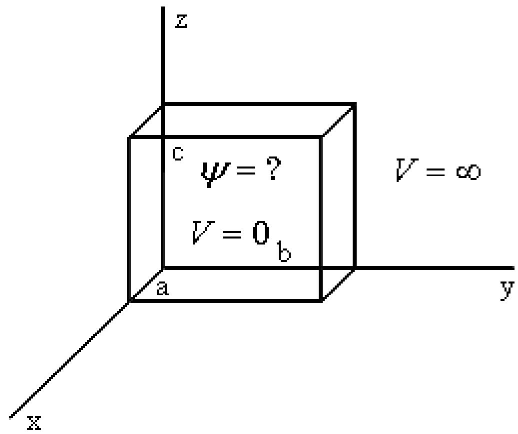
$$\therefore \quad \psi_n(x)=\sqrt{\tfrac{1}{a}}\sin(n\pi x/a)$$

وبنفس الطريقة يمكن ايجاد الثابت A

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

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

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



معادلة شرودنكرالغيرمعتمدة على الزمن داخل الصندوق

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

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

حيث ان $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

والحل العام لكل من المعادلات الثلاثة ** اعلاه على التوالي

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

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

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

Using the same procedure we can get

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

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

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

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

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

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

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

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

If $a=b=c=a$

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

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

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

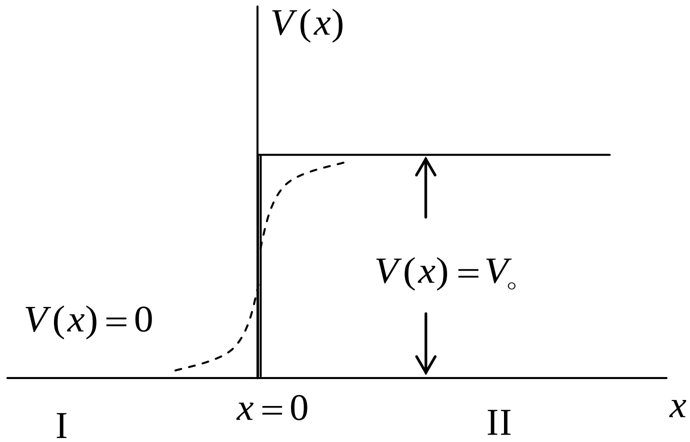
وطبيعي فان مستويات الطاقة تعتمد على $(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ وفي جميع الحالات التي تكون فيها الاعداد الكمية مرتبة بحيث يعطي نفس القيمة للعبارة $(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ تكون طاقاتها متساوية وبطبيعة الحال يمكن تبديل n_z,n_y,n_x بدون ان يتغير المقدار العبارة $(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ وهذا يعني ان دوال الموجة تتغير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

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

حاجز الجهد Potential Step

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

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



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

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

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

اولا اذا كانت $E<V_\circ$

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

كميا : (اي من وجهة نظر الميكانيك الكمي)

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

اولا في المنطقة I

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

بما ان $V(x)=0$

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

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

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

حيث ان $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

والحل العام للمعادلة اعلاه

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

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

المنطقة **II**

تكون معادلة شرودنكر بالشكل التالي

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

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

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

والحل العام لهذه المعادلة هو

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

الدالة الموجية ψ ذات قيمة محددة Bounded ويجب ان تتلاشى في اللانهاية اي ان $\psi=0$ عندما $x\to\infty$

لذلك يهمل الحد $De^{\alpha x}$

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

دالة الموجة النافذة

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

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

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

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

$$A+B=C$$

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

H.W

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

وبالتعويض عن الثوابت B ، C بالمعادلة 1 ، 2 ينتج

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

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

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

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

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

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

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

ولما كانت

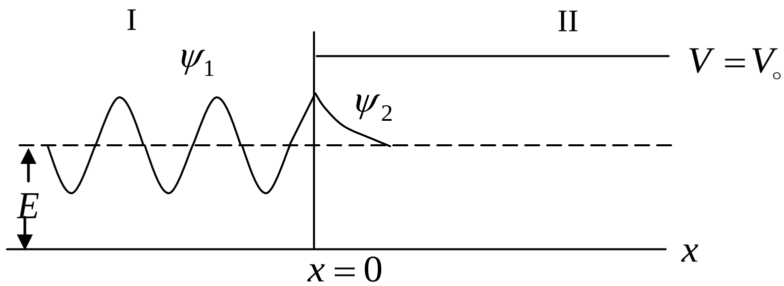
$$\psi_1(x) = \frac{A}{ik-\alpha}\left\{(ik-\alpha)\ e^{ikx} + (ik+\alpha)\ e^{-ikx}\right\}$$

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

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

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

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



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

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

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

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

ثانيا اذا كانت $E > V_\circ$

اولا في المنطقة **I**

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

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

حيث ان $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

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

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

في المنطقة **II**

تكون معادلة شرودنكر بالشكل التالي

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

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

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

حل هذه المعادلة هو

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

يهمل الحد الثاني لعدم وجود موجات منعكسة في الوسط الثاني

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

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

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

$$A + B = C$$

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

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

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

<u>الجواب</u>

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

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

حيث

J_i هو تيار الاحتمالية للموجة الساقطة

J_R هو تيار الاحتمالية للموجة المنعكسة

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

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

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

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

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

وبنفس الاسلوب نجد تيار الاحتمالية للموجة المنعكسة

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

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

وبالتعويض عن A ، B نجد

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

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

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

حيث ان

J_T هو تيار الاحتمالية للموجة النافذة

J_i هو تيار الاحتمالية للموجة الساقطة

وبنفس الاسلوب نجد تيار الاحتمالية للموجة النافذة

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

وتيار الاحتمالية للموجة الساقطة J_i هو

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

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

وبالتعويض عن قيمة C
اذن

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

ولكي يكون عدد الجسيمات محفوظا

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

Potential Barrier Penetration اختراق حاجز الجهد

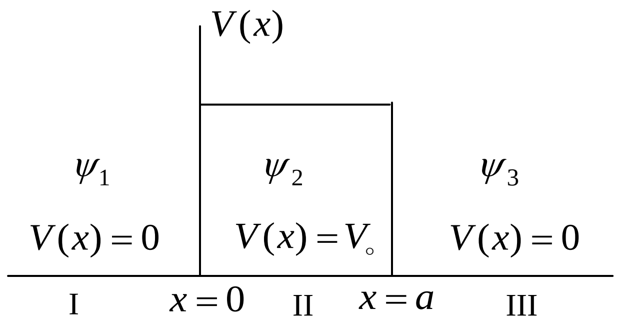
في هذه المسالة سنقوم بدراسة حزمة من الجسيمات قادمة من $x=-\infty$ تسقط على حاجز ذي ارتفاع مقداره $V_\circ$ وعرضه يساوي a وكما مبين في الشكل التالي

هنا نجزئ الفراغ الى ثلاث مناطق I ، II ، III

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

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

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



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

اولا عندما $E<V_\circ$

المنطقة **I**

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

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

حيث ان $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

حل هذه للمعادلة هو

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

المنطقة **II**

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

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

حل هذه للمعادلة هو

$$\psi_2(x)=Ce^{-\alpha x}\ +De^{+\alpha x} \qquad (2)$$

المنطقة **III**

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

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+k^2\psi_3(x)=0 \qquad\qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$ حيث ان

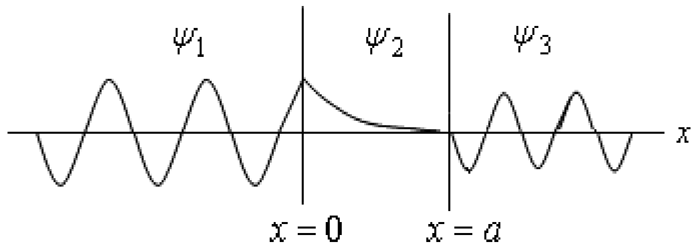
حل هذه للمعادلة هو

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

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

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

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



ثانيا اذا كانت $E > V_\circ$

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

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

المنطقة **I**

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

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

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

المنطقة **II**

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

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

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

المنطقة **III**

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

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k^2\psi_3(x) = 0 \quad ، \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$ حيث ان

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

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

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

س) جسيم يتحرك في صندوق الجهد الذي يوصف بدالة الموجة $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)$ اوجد $\langle p_x \rangle$ ، $\langle p_x^2 \rangle$ ، $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\Delta p\,\Delta x$.

Solution:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\,\hat{p}_x\,\psi_n(x)\,dx$$

$$= \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx$$

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

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

$$= \frac{-i\hbar}{a}\,\sin^2(n\pi x/a)\Big|_0^a$$

$$= 0$$

ولما كان الزخم كمية متجهة فمعدله يساوي صفر وتفسير ذلك بان احتمالية كون الجسيم يتحرك نحو اليسار تساوي احتمالية حركته نحو اليمين ولاتدل على ان الجسيم تعوزه الحركة

والان نجد $\langle p_x^2 \rangle$

$$\langle p_x^2 \rangle = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx$$

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

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

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

$$=\frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{a^3}\int_0^a \sin(n\pi x/a)\,\sin(n\pi x/a)\,dx$$

ويمكن كتابة المعادلة الاخيرة بالشكل التالي

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

وبما ان دوال الموجة لجسيم يتحرك في صندوق الجهد هي عيارية اي ان

$$\int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,\sqrt{\tfrac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)\,dx=1$$

$$\therefore \quad \langle p^2\rangle=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

$$\because \quad (\Delta p)^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

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

$$\therefore \quad (\Delta p)=\frac{n\pi\hbar}{a}$$

والان نجد $\langle x\rangle$

$$\langle x\rangle=\int_0^a \psi_n(x)\;x\psi_n(x)\,dx$$

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

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

ان هذا التكامل بسيط جدا وقيمته

$$\langle x\rangle=\frac{a}{2}\quad\Rightarrow\quad\langle x\rangle^2=\frac{a^2}{4}$$

وهي تشير الى تواجد الجسيم في نصف الصندوق الايسر او الايمن بنفس الاحتمالية

والان نجد $\langle x^2\rangle$

$$\langle x^2\rangle = \int_0^a \psi_n(x)\ x^2\ \psi_n(x)\ dx$$

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

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

ان هذا التكامل بسيط وقيمته هي

$$\langle x^2\rangle = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

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

$$= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \frac{a^2}{4}$$

$$= a^2\left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right]$$

$$\therefore\quad \Delta x = a\left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right]$$

$$\Delta p\,\Delta x = \frac{n\pi\hbar}{a} - a\left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right]$$

$$\Delta p\,\Delta x = \hbar\left[\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}\right]$$

ان اقل قيمة لحاصل الضرب ينتمي الى الحالة الارضية $n = 1$

$$\Delta p\,\Delta x = 0.567\,\hbar$$

وهذه النتيجة تتفق مع $\Delta p\,\Delta x \geq \hbar$

Chapter Four

Linear Harmonic Oscillator المتذبذب التوافقي الخطي

وفقا للنظرية الكلاسيكية فان المتذبذب التوافقي عبارة عن جسيم كتلته m يتحرك ذهابا وايابا حول موضع استقراره تحت تاثير القوة المعيدة Restoring Force اي ان

$$F = -kx$$

حيث ان k تمثل مقدار ثابت ويطلق عليه ثابت القوة، والاشارة السالبة تعني ان القوة تكون باتجاه معاكس لاتجاه الازاحة x. يمكن الحصول على معادلة الحركة من خلال قانون نيوتن الثاني:

$$F = m\ddot{x}$$

$$-kx = m\ddot{x}$$

$$m\ddot{x} + kx = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0$$

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

حيث ان $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ التردد الزاوي ، ان معادلة الحركة اعلاه تقبل بنوعين من الحلول هما

$$x = a\cos\omega t$$

$$x = a\sin\omega t$$

وكلا الحلين يمثل حركة اهتزازية بتردد زاوي ω وسعة a

ويرتبط الجهد بالقوة بالعلاقة

$$F = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} = -kx$$

وبعد اجراء عملية التكامل لهذه المعادلة نجد ان

$$V(x) = \tfrac{1}{2}k^2x^2 = \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2$$

ان الطاقة الكلية للمتذبذب التوافقي يمكن ايجادها وكما يلي:

$$E = T + V(x)$$

$$= \tfrac{1}{2} m\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\therefore \quad E = \tfrac{1}{2} m\omega^2 a^2$$

من خلال الدراسة الكلاسيكية للمتذبذب التوافقي اعلاه يمكن ان نستنتج مايلي

1. The minimum energy of H.O. is zero.
2. The energy of H.O. has a continuous spectrum of values.
3. The probability density of finding the oscillating particle has an inverse proportionality with its speed.

1. الطاقة الدنيا للمتذبذب التوافقي تساوي صفر.
2. الطاقة للمتذبذب التوافقي لها طيف مستمر من القيم .
3. كثافة الاحتمالية للمتذبذب تتناسب عكسيا مع السرعة.
4. لاتوجد حدود قصوى تفرض على الطاقة التي يمكن ان يتخذها المتذبذب التوافقي .

ان مسالة المتذبذب التوافقي من المسائل المهمة في ميكانيك الكم. حيث ترتبط هذه المسألة في تطبيقات عملية عديدة مثل اهتزاز جزيئات وذرات المواد الصلبة التي تقرب عادة من اهتزازات توافقية بسيطة وكذلك المجال الكهرومغناطيسي الذي يمكن اعتباره في تطبيقات كثيرة كعدد من الاهتزازات التوافقية البسيطة.

Quantum Theory Of Harmonic Oscillator النظريـــة الكميـــة للمتذبـــذب التـــوافقي

المؤثر الهاملتوني للمتذبذب التوافقي هو (The Hamiltonian of H.O is)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V(x)\psi_n = E_n\psi_n$$

نعوض عن $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi_n = E_n\psi_n$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left\{E_n - (\frac{1}{2} m\omega^2 x^2)\right\}\psi_n = 0$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + (\frac{2mE_n}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2)\psi_n = 0$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(\frac{2E_n}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar} x^2)\psi_n = 0$$

نفرض ان

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\ x \qquad y = \alpha\ x \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

and

$$\varepsilon_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} \qquad (1)$$

$$\therefore \quad \frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(\varepsilon_n - y^2)\psi_n = 0$$

$$\frac{d}{dx}=\frac{d}{dy}\frac{dy}{dx}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dy}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}=\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\frac{d^2}{dy^2}$$

$$=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dy^2}$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}\ \frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\frac{m\omega}{\hbar})(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0 \qquad \div\ \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0 \tag{2}$$

س / اثبت ان المتغيرات ε_n ، y هي متغيرات خالية من الوحدات (***HW***)

المعادلة (2) يمكن حلها بثلاث طرق هي :

1. طريقة شرودنكر او معالجة شرودنكر Schrödinger Treatment
2. طريقة المؤثرات Operator Treatment
3. طريقة المصفوفات Matrix Treatment

1. طريقة شرودنكر Schrödinger Treatment

في حالة $y\to\infty$ يمكن اهمال المقدار ε_n فالمعادلة (2) تصبح بالصيغة التالية

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}-y^2\psi_n=0 \tag{3}$$

والان نجد الحل التقريبي للحالة التي تكون فيها y كبيرة فاذا فرضنا ان

$$\psi_n(y) = e^{c y^2}$$

$$\frac{d\psi_n}{dy} = 2cy\, e^{c y^2}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2} = 2c\, e^{cy^2} + 2cy\, e^{c y^2} \cdot 2cy$$

$$= 2c\, e^{cy^2} + 4c^2 y^2 e^{c y^2}$$

وبالتعويض عن ψ_n ، $\frac{d^2\psi_n}{dy^2}$ في المعادلة (3) نحصل على

$$4c^2 y^2 e^{c y^2} + 2c\, e^{c y^2} - \mathrm{y}^2 e^{c y^2} = 0$$

وباهمال الحد الوسطي في المعادلة اعلاه لصغره نحصل على

$$(4c^2 - 1)\mathrm{y}^2\, e^{c y^2} = 0$$

$$\therefore \quad 4c^2 - 1 = 0$$

$$c = \pm \frac{1}{2}$$

$$\therefore \quad \psi_n(y) = e^{\pm \frac{1}{2} y^2}$$

ولما كانت دالة الموجة $\psi_n(y)$ يجب ان تقترب من الصفر عندما تقترب y من اللانهاية فان الحل $e^{+\frac{1}{2}y^2}$ يجب ان يهمل ونحتفظ بحل تقريبي واحد هو

$$\therefore \quad \psi_n(y) = e^{-\frac{1}{2} y^2} \qquad (4)$$

وهو يمثل حلا تقريبا وللقيم الكبيرة للمتغير y . واذا اردنا الحصول على الحل المظبوط فاننا نضرب الحل التقريبي للمعادلة (4) بدالة اعتباطية للمتغير y مثلا $F(y)$

$$\therefore \quad \psi_n(y) = F(y)\, e^{-\frac{1}{2} y^2} \qquad (5)$$

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

$$\psi'_n = F'(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} - yF(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$\frac{d^2\psi_n(y)}{dy^2} = \psi''_n(y) = F''(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - yF'(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - F'(y)\ y\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$
$$- F(y)\{(1)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} + y e^{-\frac{1}{2}y^2}(-y)\}$$

$$\psi''_n(y) = F''(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - 2yF'(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} - F(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2} + y^2F(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

وبتعويض العلاقة الاخيرة في المعادلة (2) نحصل

$$\{F''(y) - 2y\,F'(y) - F(y) + y^2F(y) + \varepsilon_n\,F(y) - y^2F(y)\}\,e^{-\frac{1}{2}y^2} = 0$$

$$\therefore \quad F''(y) - 2y\,F'(y) + (\varepsilon_n - 1)\,F(y) = 0 \qquad (6)$$

ان معادلة هيرمت التفاضلية من الدرجة n لها الصيغة الرياضية التالية:

$$H''_n(y) - 2y\,H'_n(y) + 2n\,H_n(y) = 0 \qquad (7)$$

وحل هذه المعادلة يدعى بمتعددة حدود هيرمت Hermit Polynomial والصيغة الرياضية لهذا الحل

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

حيث ان $n = 0,1,2,3.......$

بمقارنة العلاقتين (6) ، (7) نجد ان

$$F(y) = H_n(y)$$

$$\varepsilon_n - 1 = 2n$$

$$\therefore \quad \varepsilon_n = 2n + 1$$

اذن المعادلة (5) يمكن ان تكتب بالشكل التالي

$$\psi_n(y) = H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

ولاجل ان تكون دالة الموجة للمتذبذب التوافقي معيرة نضربها بثابت مثل N_n اي ان

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad (8)$$

حيث سنجد قيمة ثابت المعايرة N_n لاحقا

المعادلة (8) الان يمكن كتابتها بالشكل التالي حيث ان $y = \alpha\ x$

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \qquad (9)$$

حيث ان $\alpha = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$ ، $\alpha^2 x^2 = y^2$، هنا ω هو التردد الدائري الكلاسيكي و $H_n(\alpha x)$ هو كثيرة حدود هيرمت من الدرجة n

من معادلة (1)

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon_n$$

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

$$\therefore \quad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \qquad (10)$$

ان المعادلة (9) تمثل الصيغة العامة لدوال الموجة الذاتية والتي تصف المتذبذب التوافقي والمعادلة (10) تمثل القيم الذاتية لطاقة المتذبذب التوافقي، حيث n هو العدد الكمي وياخذ الاعداد الصحيحة $n = 0,1,2,3\cdots\cdots$

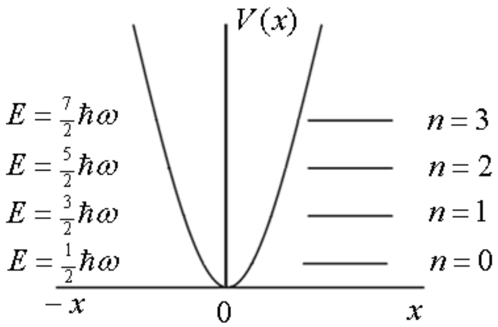
والمعادلة (10) تدلنا على ان طاقة المتذبذب التوافقي هي طاقة مكممة واقل قيمة لهذه الطاقة هي

$$E_\circ = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(Zero Point Energy)}$$

التي تتميز بالعدد الكمي $n = 0$ والتي تسمى بطاقة نقطة الصفر وهي اقل طاقة يستطيع المتذبذب امتلاكها.

الشكل يمثل مستويات الطاقة وهي

متباعدة بمقادير متساوية كل منها $\hbar\omega$



س / جد $H_n(y)$ ، ε_n ، E_n لاول اربعة حالات من n

الحل:-

باستخدام العلاقات التالية

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

$$\varepsilon_n = 2n + 1$$

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

n	$H_n(y)$	ε_n	E_n
0	1	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2y$	3	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4y^2$-2	5	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8y^3$-$12y$	7	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

Generating Function الدالة المولدة

الدالة الرياضية تدعى بالدالة المولدة

$$G(t,y)=e^{y^2-(t-y)^2}$$

$$G(t,y)=e^{-t^2+2ty} \tag{11}$$

وهي احدى اهم النظريات التي تتعلق بكثيرة حدود هيرمت وترتبط معها بالعلاقة

$$e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\,t^n}{n!} \tag{12}$$

ويمكن ان نثبت ان الطرف الايمن يساوي الطرف الايسر في المعادلة (12) وكما يلي

$$\text{R.H.S}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\,t^n}{n!}$$

$$=H_\circ(y)+\frac{H_1(y)\;t}{1!}+\frac{H_2(y)\;t^2}{2!}+\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=1+2yt+(4y^2-2)\frac{t^2}{2}+\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=1+2yt+(2y^2-1)t^2+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{a}$$

وباستخدام متسلسلة تايلر عند النقطة $(t=0)$ يمكن نشر الطرف الايسر

$$f(t)=f(0)+f'(0)\cdot t+\frac{f''(0)}{2!}\cdot t^2+\frac{f'''(0)}{3!}\cdot t^3+\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$L.H.S=1+2yt+(2y^2-1)t^2+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{b}$$

من الملاحظ ان المعادلة (b) هي نفسها المعادلة (a) اذن

L.H.S=R.H.S

الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي متعامدة وعيارية

The Wave Function of H.O are Orthonormal

لقد بينا في الفصل الثاني ان الدوال الموجية التي تحقق معادلة شرودنكر هي دوال عيارية ومتعامدة وقد عبرنا عن هذه الحقيقة من خلال المعادلة

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

حيث ان

$$\delta_{mn} = 0 \qquad m \neq n$$
$$= 1 \qquad n = m$$

وواضح ان في حالة المتذبذب التوافقي $\psi_m^* = \psi_m$ وباستخدام الدوال الموجية المعطاة في المعادلة (9) نحصل على

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

اذن في حالة $n \neq m$ تكون الدوال الموجية متعامدة

$$N_m N_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) \, dx = 0$$

اذن

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) \, dx = 0 \qquad (13)$$

وفي حالة $n = m$ تكون الدوال الموجية عيارية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) \, dx = N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_n^2(\alpha x) \, dx = 1$$

ايجاد ثابت التعيير N_n

لايجاد ثابت التعيير N_n نستخدم الشرط العياري

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\ dx = N_n^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}H_n^{\,2}(\alpha x)\,dx = 1$$

وعند تبديل المتغير x بالمتغير y حسب العلاقة $y=\alpha\,x$ وان $dy=\alpha\,dx$

$$\frac{N_n^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}H_n^{\,2}(y)\,dy = 1 \qquad \text{(a)}$$

ولايجاد هذا التكامل نستخدم تعريف الدالة المولدة كما يلي

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

نضرب هذه الدالة في نفسها ثم بالمقدار e^{-y^2} ونكامل على الفضاء سنحصل:

$$\int_{-\infty}^{\infty}g(t,y)\ g(t,y)\ e^{-y^2}dy=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{t^n}{n!}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}H_n^2(y)\,dy$$

من الملاحظ ان التكامل في الطرف الايمن من العلاقة الاخيرة هو نفسه التكامل في المعادلة (a). الان نجد التكامل في الطرف الايسر وكما يلي

$$L.H.S=\int_{-\infty}^{\infty}g(t,y)\ g(t,y)\ e^{-y^2}dy$$

$$L.H.S=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-t^2+2ty}\,e^{-t^2+2ty}\,e^{-y^2}dy$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2t^2+4t\,y-y^2}\ dy=\int_{-\infty}^{\infty}e^{2t^2}\,e^{-2t^2}\,e^{-2t^2+4\,t\,y-y^2}\ dy$$

$$=e^{2t^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-4t^2+4t\,y-y^2}\ dy$$

$$= e^{2t^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(y-2t)^2} \, dy$$

ولحل التكامل اعلاه نفرض ان $y - 2t = z$ ، $dy = dz$

$$L.H.S = e^{2t^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \, dz$$

وقيمة التكامل $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \, dz = \sqrt{\pi}$

$$= e^{2t^2} \sqrt{\pi}$$

وباستخدام متسلسلة تايلرلنشر الدالة e^{2t^2}

$$e^{2t^2} = 1 + 2t^2 + \frac{(2t^2)^2}{2!} + \frac{(2t^2)^3}{3!} + \cdots\cdots\cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n (t^2)^n}{n!}$$

$$\therefore \quad L.H.S = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^{2n}}{n!}$$

$$R.H.S = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t^n}{n!} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n^2(y) \, dy$$

وبالرجوع الى المعادلة (a) نجد ان

$$R.H.S = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t^n}{n!} \right)^2 \cdot \frac{\alpha}{N_n^2}$$

$$\therefore \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^{2n}}{n!} \sqrt{\pi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{(n!)^2} \cdot \frac{\alpha}{N_n^2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{(n!)^2} \cdot \frac{\alpha}{N_n^2} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n t^{2n}}{n!} \sqrt{\pi} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{(n!)^2} \left\{ \frac{\alpha}{N_n^2} - 2^n n! \sqrt{\pi} \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \quad N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \quad \psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$$

وفيما يلي ندرج في الجدول ادناه الدوال الذاتية العيارية والطاقة المقابلة لها لقيم $\mathrm{n} = 0,1,2,3$

n	$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$	$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$
0	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha\, x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 8\pi^{\frac{1}{4}})\ (4\alpha^2 x^2 - 2)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 48\pi^{\frac{1}{4}})\ (8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

على اننا نستطيع ايجاد $H_n(y)$ او $H_n(\alpha x)$ لاي قيمة لـ n من العلاقة التالية

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

بالاضافة الى ذلك فان $H_n(y)$ تخضع لعلاقات تفاضليه وتكاملية على درجة كبيرة من الفائدة منها

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y)\ dy = 2^n n! \sqrt{\pi}\ \delta_{mn}$$

نلاحظ انه اذا كان $n \neq m$ فان التكامل يصبح صفر وكما بينا سابقا واذا كان $n = m$ فان المعادلة تصبح

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n^2(y)\ dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \tag{14}$$

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = H_n{}'(y) = 2nH_{n-1}(y) \tag{15}$$

$$2yH_n(y) = H_{n+1}(y) + 2nH_{n-1}(y) \tag{16}$$

$$H_n{}''(y) - 2yH_n{}'(y) + 2nH_n(y) = 0 \tag{7}$$

مقارنة النظرية الكلاسيكية مع النظرية الكمية
Comparison of classical theory with quantum theory

تختلف النتائج التي حصلنا عليها عن نتائج النظرية الكلاسيكية فيما يلي

1. طاقة الحالة الدنيا لاتساوي صفر واقل قيمة للطاقة يمكن ان يتخذها المتذبذب هي $\frac{1}{2}\hbar\omega$.
2. مستويات الطاقة غير متصلة بل متقطعة (Discrete).
3. في النظرية الكلاسيكية تتناسب كثافة الاحتمالية عكسيا مع الانطلاق اما النظرية الكمية فانها تعطي بالكمية $|\psi_n(x)|^2$ وبدون شك فهي تعطي تصرف مختلفا عن تصرف المتذبذب الكلاسيكي.

واجب بيتي H.W

Prove that:

1. $\dfrac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y)$

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

3. $H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$

4. $y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$

5. $\dfrac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$

6. $\dfrac{1}{\sqrt{2}}(y + \dfrac{d}{dy})\ \psi_n(y) = \sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$

7. $\dfrac{1}{\sqrt{2}}(y - \dfrac{d}{dy})\ \psi_n(y) = \sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

8. برهن ان القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة للمتذبذب التوافقي لحالة ذاتية للطاقة هي

$$< V(x) > = \tfrac{1}{2}(n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

9. Consider a simple Harmonic oscillator, compute the expectation values $< T >$.

10. استخدم شرط المعايرة وتعريف الدالة المولدة اثبت ان

a) $N_n = (2^n n!\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$

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

11. جد H_0 ، H_1 ، H_2 ، H_3

12.برهن ان الدوال الموجية التالية هي دوال متعامده وعيارية

$$\psi_0(x) = (\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_1(x) = (\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

13. جد $\Delta x \Delta p$ مستخدما $\psi_0(x)$ في السؤال التاسع

14.) Using the uncertainty relation $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ estimate the energy ground state of harmonic oscillator

س15) برهن اذا كانت n زوجية فان $H_n(-y) = H_n(y)$ واذا كانت n فردية فان $H_n(-y) = -H_n(y)$

16.) Consider a simple harmonic oscillator find $\Delta p\, \Delta x$.

1. **Prove that** $\dfrac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y)$

Solution:

باستخدام الدالة المولدة

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

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة بالنسبة الى y

$$\frac{\partial g}{\partial y} = 2t\, e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!}$$

حيث ان $H'_n(y) = \dfrac{dH_n(y)}{dy}$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} = 2t \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^n}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = 0$$

$$H'_\circ(y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = 0$$

$$H'_\circ(y) = \frac{d}{dy}(1) = \text{zero}$$

$$\therefore \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = 0$$

Let $m = n+1$

$$\therefore \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{m=1}^{\infty} \frac{H_{m-1}(y)\ t^m}{(m-1)!} = 0$$

$$\therefore \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} - 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} = 0$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{(n-1)!} \left\{ H'_n - 2nH_{n-1}(y) \right\} = 0$$

$$\therefore \quad H'_n(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

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

<u>Solution:</u>

باستخدام الدالة المولدة

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

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة بالنسية الى t

$$\frac{\partial g(t,y)}{\partial t}=(-2t+2y)\ e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n\ H_n(y)\ t^{n-1}}{n!}$$

$$(-2t+2y)\ \ e^{-t^2+2ty}=2y\ e^{-t^2+2ty}-2t\ e^{-t^2+2ty}$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2y\,H_n(y)\ t^n}{n!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_n(y)\ t^{n+1}}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}2y\frac{H_n(y)\ \ t^n}{n!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_n(y)\ \ t^{n+1}}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{nH_n(y)\ \ t^{n-1}}{n!}$$

وبمساواة معاملات t^n في طرفي العلاقة

$$\sum_{n=0}^{\infty}2y\frac{H_n(y)\ \ t^n}{n!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_{n-1}(y)\ \ t^n}{(n-1)!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(n+1)H_{n+1}(y)\ \ t^n}{(n+1)!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2yH_n(y)\ \ t^n}{n(n-1)!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_{n-1}(y)\ \ t^n}{(n-1)!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(n+1)H_{n+1}(y)\ \ t^n}{(n+1)\,n\,(n-1)!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2yH_n(y)\ \ t^n}{n(n-1)!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_{n-1}(y)\ \ t^n}{(n-1)!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{n+1}(y)\ \ t^n}{n(n-1)!}=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{(n-1)!}\left\{\frac{2yH_n(y)}{n}-2H_{n-1}(y)-\frac{H_{n+1}(y)}{n}\right\}=0$$

$$\frac{2yH_n(y)}{n}-2H_{n-1}(y)-\frac{H_{n+1}(y)}{n}=0$$

نضرب في $\frac{n}{2}$ والترتيب نحصل على

$\therefore\quad yH_n(y)=\frac{1}{2}H_{n+1}(y)+nH_{n-1}(y)$ وهو المطلوب

3. **Prove that:** $H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$

Solution:

باستخدام المعادلة

$$H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y) \qquad \text{(a)}$$

$$H_{n+1}'(y) = 2(n+1)H_n(y)$$

$$H_{n+1}'(y) = 2nH_n(y) + 2H_n(y) \qquad \text{(b)}$$

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة (a) ينتج

$$H_n''(y) = 2nH_{n-1}'(y) \qquad \text{(c)}$$

وباستخدام المعادلة

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

وباخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$yH_n'(y) + H_n(y) = \tfrac{1}{2}H_{n+1}'(y) + nH_{n-1}'(y)$$

وبالتعويض عن b ، c في المعادلة اعلاه ينتج

$$yH_n'(y) + H_n(y) = \tfrac{1}{2}(2nH_n(y) + 2H_n(y)) + \frac{H_n''(y)}{2}$$

$$yH_n'(y) + H_n(y) = nH_n(y) + H_n(y) + \frac{H_n''(y)}{2}$$

نضرب في 2 ونرتب نحصل على

$$H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$$ وهو المطلوب

4. **Prove that:** $y\psi_n = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$

Solution:

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

نضرب طرفي المعادلة في y

$$y\ \psi_n(y) = N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2}\ y\ H_n(y)$$

باستخدام المعادلة

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

$$y\ \psi_n(y) = N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2}\left\{nH_{n-1}(y) + \tfrac{1}{2}H_{n+1}(y)\right\}$$

وبالتعويض عن قيمة $N_n = \dfrac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}$

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

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

$\therefore\quad y\psi_n = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$ وهو المطلوب

5. **Prove that:** $\dfrac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$

Solution:

$$\psi_n(y) = N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

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

$$= -yN_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

باستخدام المعادلة

$$H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

$$= -y\ N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + 2nN_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_{n-1}(y)$$

وبالتعويض عن قيمة N_n

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

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

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

$$\therefore\ \frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$$ وهو المطلوب

6. **Prove that:** $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$

<u>Solution:</u>

باستخدام المعادلة

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

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

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

$\therefore\quad \hat{a}\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$ وهو المطلوب

يسمى المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$ بالمؤثر الخافض Destruction Operator ويرمز له بالرمز $\hat{a}$ اي ان

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$$

ويسمى المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})$ بالمؤثر الرافع Creation Operator ويرمز له بالرمز $\hat{a}^+$ اي ان

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

(Read $\hat{a}^+$ as "a dagger")

7. **Prove that:** $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

or $\hat{a}^+\ \psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

Solution:

باستخدام المعادلات

$$y\psi_n=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y)+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y) \qquad \text{(b)}$$

من معادلة (a)

$$\psi_{n-1}(y)=\sqrt{\tfrac{2}{n}}\left\{y\ \psi_n(y)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)\right\} \qquad \text{(c)}$$

وبالتعويض عن قيمة c اي $\psi_{n-1}(y)$ في معادلة (b) ينتج

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\left\{\sqrt{\tfrac{2}{n}}(y\psi_n(y)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(y))\right\}$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+2y\psi_n(y)-2\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(y)$$

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

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

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

$\therefore \quad \hat{a}^+\psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$ وهو المطلوب

س 8 / برهن ان القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة للمتذبذب التوافقي لحالة ذاتية للطاقة هي

$$<V(x)>=\tfrac{1}{2}(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$=\tfrac{1}{2}E_n$$

Solution:

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y)+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

بضرب في $\psi_{n+1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\psi_{n+1}(y)\ dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة وعيارية اي ان

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy=1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy=0$$

$$\therefore\quad \int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy=\sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \qquad \text{(b)}$$

وبضرب في $\psi_{n-1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\psi_{n+1}(y)\ dy$$

$$\therefore\ \int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy=\sqrt{\tfrac{n}{2}} \qquad \text{(c)}$$

القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة تساوي

$$<V(x)>=\tfrac{1}{2}m\omega^2<x^2>$$

$$=\frac{1}{2}m\omega^2<\frac{y^2}{\alpha^2}>$$

$$= \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\alpha^2} < y^2 >$$

وبضرب طرفي المعادلة (a) في $y\ \psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \ y^2 \psi_n(y)\ \ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ \ y\ \psi_n(y)\ \ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \ y\ \psi_n(y)\ \ dy$$

وبالتعويض عن (b) ، (c) في المعادلة الاخيرة ينتج

$$< y^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \ y^2 \psi_n(y)\ \ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n}{2}} + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}$$

$$< y^2 >= \frac{n}{2} + \frac{n+1}{2} = n + \frac{1}{2}$$

$$\therefore \quad < V(x) >= \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\alpha^2} < y^2 >$$

$$< V(x) >= \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\alpha^2} (n + \frac{1}{2})$$

$$\because \quad \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$< V(x) >= \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{m\omega} \hbar \ \ (n + \frac{1}{2})$$

$$= \frac{1}{2} \hbar\omega \ (n + \frac{1}{2})$$

$$= \frac{1}{2} E_n$$ وهو المطلوب

9. Prove that expectation value of kinetic energy for harmonic oscillator

$$<T>=\frac{1}{2}\,(n+\frac{1}{2})\hbar\,\omega=\frac{1}{2}E_n$$

القيمة المتوقعة للطاقة الحركية $<T>=\dfrac{<p^2>}{2m}$

$$<T>=\frac{<p^2>}{2m}=\frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;p^2\psi_n(x)\,dx$$

$$<T>=\frac{<p^2>}{2m}=\frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\,\frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2}\;dx$$

نجد $\dfrac{\partial^2\psi_n(y)}{\partial y^2}$ **باستخدام دالة الموجة للمتذبذب التوافقي** $\psi_n(y)=N_n e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$ **او بلستخدام معادلة**

(2)

باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=N_n\;e^{-\frac{1}{2}y^2}(-y)H_n(y)+N_n\;e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{d\,y}=N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)-y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$$

باخذ المشتقة لثانية للمعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$\frac{d^2\psi_n(y)}{d\,y^2}=N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n''(y)-y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)-N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$$

$$-y\left(-y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)+N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)\right)$$

$$=N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n''(y)-2y\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n'(y)-N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)+y^2\,N_n\,e^{-\frac{1}{2}y^2}H_n(y)$$

باستخدام العلاقة $H_n''(y)-2yH_n'(y)+2nH_n(y)=0$ والتعويض في المعادلة اعلاه

$$= N_n e^{-\frac{1}{2}y^2}\left(2yH_n'(y) - 2nH_n(y)\right) - 2y N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

$$- N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + y^2 N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

$$= 2y N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y) - 2n N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) - 2y N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

$$- N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + y^2 N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

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

معادلة (2)

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

او بدلالة x **حيث ان** $y = \alpha x$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = \alpha^2(\alpha^2 x^2 - \varepsilon_n)\,\psi_n$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\,\alpha^2(\alpha^2 x^2 - \varepsilon_n)\,\psi_n(x)\,dx$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;\alpha^4 x^2\psi_n(x)\,dx - \alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon_n\;\psi_n(x)\psi_n(x)\,dx\right]$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2\alpha^4}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\;x^2\psi_n(x)\,dx + \frac{\varepsilon_n\hbar^2\alpha^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\psi_n(x)\,dx$$

لاحظ السؤال السابق

$$\because\quad < x^2 >= \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore\quad < T >= \frac{-\hbar^2\alpha^4}{2m}\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) + \frac{\varepsilon_n\hbar^2\alpha^2}{2m}$$

$$< T >= \frac{-\hbar^2\alpha^2}{2m}\,(n+\frac{1}{2}) + (2n+1)\,\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$$

$$<T> = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}(n+\frac{1}{2})$$

$$<T> = \hbar^2 \frac{m\omega}{2\hbar m}(n+\frac{1}{2})$$

$$<T> = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\,\omega = \frac{1}{2}E_n$$ وهو المطلوب

تكاملات مفيدة: اولا

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2}\,dx = 0 \qquad\qquad (n \text{ odd})$$

اذا كانت n فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

Example: 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\ e^{-ax^2}\,dx = 0$$

Example: 2

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-ax^2}\,dx = 0$$

ثانيا

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

وباخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ (a) نحصل على

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

وباجراء نفس العمل اي باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ (a) نحصل على

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2}\,dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$$

س12 : برهن ان الدوال الموجية التالية هي دوال متعامدة وعيارية

$$\psi_0 = (\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_1 = (\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

لقد بينا في الفصل الثاني ان مجموعة من الدوال التي تحقق المعادلة

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

تسمى مجموعة من الدوال العيارية المتعامدة Orthonormal Set of Function

$\delta_{mn} = 1$ at m = n تكون عيارية اذا

$\delta_{mn} = 0$ at m ≠ n تكون متعامدة اذا

<u>اولا</u>

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_1(x)\ dx = \frac{2\alpha^2}{2^{\frac{1}{2}}\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x\ e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0$$

من الملاحظ ان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر اذن الدوال متعامدة

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_1(x)\ dx = 0$$

<u>ثانيا</u>

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_0(x)\ dx = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} = 1$$

اذن الدوال عيارية

اخيرا

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)\ \psi_1(x)\ dx=\frac{4\alpha^3}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}=1$$

اذن الدوال عيارية

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)\ \psi_1(x)\ dx=1$$

وهو المطلوب

س 13: جد $\Delta x \Delta p$ مستخدما $\psi_0(x)$ في السؤال التاسع

<u>Solution:</u>

التفاوت (Variance) في الموضع Δx هو

$$(\Delta x)^2 = < x^2 > - < x >^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta x = \left(< x^2 > - < x >^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

التفاوت في الزخم Δp_x هو

$$(\Delta p_x)^2 = < p_x^2 > - < p_x >^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta p_x = \left(< p_x^2 > - < p_x >^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

اذن يجب عبينا ايجاد كل من $< x >^2$ ، $< x^2 >$ ، $< p_x >^2$ ، $< p_x^2 >$ وبعد ذلك ايجاد $\Delta x \Delta p$

اولا ايجاد $< x >$

$$< x > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \;\hat{x}\; \psi_0(x)\; dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} x \; dx$$

$$= 0$$

لان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

$$< x > = 0 \quad \Rightarrow \quad < x >^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $< x^2 >$

$$< x^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \;\hat{x}^2\; \psi_0(x)\; dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha^2}$$

$$\Delta x = \left(< x^2 > - < x >^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=(\frac{1}{2}\frac{1}{\alpha^2}-0)^{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha}$$

ثالثا ايجاد $< p_x >$

$$< p >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\ \ \hat{p}_x\ \psi_0(x)\ \ dx$$

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

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\ \ dx$$

$$=\frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\ \frac{\partial}{\partial x}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\ \ dx$$

$$=\frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\ (-\alpha^2 x)\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\ \ dx$$

$$=\frac{i\hbar\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x\ e^{-\alpha^2 x^2}dx$$

لان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

$$\therefore\ \ < p_x >=0 \qquad \Rightarrow \qquad < p_x >^2=0$$

رابعا ايجاد $< p_x^2 >$

$$< p_x^2 >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\ \ \hat{p}_x^2\ \psi_0(x)\ \ dx$$

بما ان $\hat{p}_x^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\ \ dx$$

$$= \frac{-\alpha\,\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\, dx$$

ایجاد $\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(-\alpha^2 x\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= -\alpha^2 \frac{\partial}{\partial x}\left(x\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

$$= -\alpha^2 \left(e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} - \alpha^2 x^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right)$$

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

$$\therefore \quad = \frac{-\alpha\,\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} \left(-\alpha^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}} + \alpha^4 x^2\, e^{\frac{-\alpha^2 x^2}{2}}\right) dx$$

$$= \frac{\alpha^3 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx - \frac{\alpha^5 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha^3 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} - \frac{\alpha^5 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}$$

$$= \alpha^2 \hbar^2 - \frac{1}{2} \alpha^2 \hbar^2$$

`

$$= \frac{1}{2} \alpha^2 \hbar^2$$

$$\Delta p_x = \left(< p_x^2 > - < p_x >^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left(\frac{1}{2} \alpha^2 \hbar^2 - 0\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \ \hbar$$

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \ \hbar \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\alpha}$$

$\therefore \quad \Delta p_x \Delta x = \frac{1}{2} \hbar$ وهو المطلوب

Q 14) Using the uncertainty relation $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ estimate the energy ground state of harmonic oscillator

استخدم مبدا الادقة $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ خمن طاقة الحالة الارضية للمتذبذب التوافقي

Solution:

(The Hamiltonian of H.O is) ان هاملتوني المتذبذب التوافقي هو

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

(The expectation value of energy is) القيمة المتوقعة للطاقة هي

$$\langle H \rangle = E = \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} < x^2 >$$

$$\because \quad (\Delta p)^2 = < p^2 > - < p >^2 \qquad , \qquad (\Delta x)^2 = < x^2 > - < x >^2$$

ويمكن اثبات بان للمتذبذب التوافقي $< p > = < x > = 0$ وكما يلي

اولا ايجاد $< x >$ (القيمة المتوقعة للموضع)

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n(y) = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$$

بضرب المعادلة اعلاه في $\psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة اذن

$$< y > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = 0 \qquad \Rightarrow \qquad < y >^2 = 0$$

$$\because \quad y=\alpha x$$

$$\therefore \quad <x>^2=0$$

ثانيا ايجاد $<p>$ (القيمة المتوقعة للزخم)

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ \hat{p}\ \psi_n(y)\ dy=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ (-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})\ \psi_n(y)\ dy$$

باستخدام المعادلة التالية لايجاد $\frac{\partial \psi_n}{\partial y}$

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

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)(-i\hbar)\{-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)\}\ dy$$

$$=-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy-i\hbar\sqrt{2n}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy$$

$$=0 \quad \Rightarrow \quad <p>^2=0$$

$$(\Delta p)^2=<p^2>-0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta p)^2=<p^2>$$

$$(\Delta x)^2=<x^2>-0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta x)^2=<x^2>$$

$$\Delta p\Delta x=\frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p=\frac{\hbar}{2\Delta x}$$

$$\therefore \quad (\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

$$E=\frac{<p^2>}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}<x^2>$$

بتعويض عن $<x^2>$ ، $<p^2>$

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

لدينا $(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$ وبالتعويض بالمعادلة اعلاه ينتج

$$E = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

ولايجاد اقل قيمة للطاقة نفاضل العلاقة الاخيرة وجعلها تساوي صفر

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3} + m\omega^2(\Delta x) = 0$$

$$\therefore \quad (\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

وبالتعويض عن $(\Delta x)^2$ لايجاد الطاقة

$$E = \frac{\hbar^2}{8m\cdot(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{8m\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)} + \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$= \frac{1}{4}\hbar\omega + \frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\therefore \quad E = \frac{1}{2}\hbar\omega$$ وهو المطلوب

س15 / برهن اذا كانت n زوجية فان $H_n(-y) = H_n(y)$ واذا كانت n فردية فان $H_n(-y) = -H_n(y)$

البرهان

باستخدام المعادلة

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

When n even =2

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

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

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

$$= e^{y^2} \left\{(-2y)\cdot(-2y)e^{-y^2} - 2e^{-y^2})\right\}$$

$$= 4y^2 - 2$$

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

$$\therefore \quad H_n(-y) = H_n(y)$$

When n odd=1

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

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

$\therefore \quad H_n(-y) = -H_n(y)$ When n odd وهو المطلوب

16.) Consider a simple harmonic oscillator find $\Delta p \, \Delta x$.

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2$$

$$(\Delta p)^2 = <p^2> - <p>^2$$

اولا ايجاد $<x>$

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n(y) = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \; \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \; \psi_{n+1}(y)$$

بضرب المعادلة اعلاه في $\psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \; y \; \psi_n(y) \; dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \; \psi_{n-1}(y) \; dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \; \psi_{n+1}(y) \; dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة اذن

$$<y> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \; y \; \psi_n(y) \; dy = 0 \qquad \Rightarrow \qquad <y>^2 = 0$$

$$\because \quad y = \alpha x$$

$$\therefore \quad <x>^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $<x^2>$

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \; \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \; \psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

بضرب في $\psi_{n+1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y) \; y \; \psi_n(y) \; dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y) \; \psi_{n-1}(y) \; dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y) \psi_{n+1}(y) \; dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة وعيارية اي ان

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy = 0$$

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \qquad \text{(b)}$$

وبضرب في $\psi_{n-1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y) \psi_{n+1}(y)\ dy$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \qquad \text{(c)}$$

وبضرب طرفي المعادلة (a) في $y\ \psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y^2 \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy$$

وبالتعويض عن (b) ، (c) في المعادلة الاخيرة ينتج

$$< y^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y^2 \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n}{2}} + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \cdot \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}$$

$$< y^2 >= \frac{n}{2} + \frac{n+1}{2} = n + \frac{1}{2}$$

$$y = \alpha x \qquad , \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\because \quad < y^2 >= \alpha^2 < x^2 > \qquad\qquad < x^2 >= \frac{y^2}{\alpha^2}$$

$$\therefore \; < x^2 >= \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \; (\Delta x) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})}$$

ملاحضة يمكن ايجاد القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة $< V(x) >$

$$< V(x) >= \frac{1}{2} m\omega^2 < x^2 >$$

$$< V(x) >= \frac{1}{2}\hbar\omega \,(n+\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}E_n$$

ثالثا ايجاد $< p >$

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; \hat{p} \;\; \psi_n(y) \;\; dy = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; (-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) \;\; \psi_n(y) \;\; dy$$

باستخدام المعادلة التالية لايجاد $\frac{\partial \psi_n}{\partial y}$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n} \;\; \psi_{n-1}(y)$$

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)(-i\hbar)\{-y\psi_n(y) + \sqrt{2n} \;\; \psi_{n-1}(y)\} \;\; dy$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; y \;\; \psi_n(y) \;\; dy - i\hbar\sqrt{2n} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; \psi_{n-1}(y) \;\; dy$$

$$= 0 \quad \Rightarrow \quad < p >^2 = 0$$

رابعا ايجاد $<\hat{p}^2>$

$$<p^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ p^2\psi_n(x)\,dx$$

$$<p^2>=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\,\frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2}\ dx$$

باستخدام معادلة رقم (2)

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0$$

او

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2}=\frac{m\omega}{\hbar}(\frac{m\omega}{\hbar}x^2-\varepsilon_n)\,\psi_n \qquad \text{Where } \varepsilon_n=(2n+1) \text{ and } \alpha^2=\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2}=\alpha^2(\alpha^2x^2-\varepsilon_n)\,\psi_n$$

$$<p^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ p^2\psi_n(x)\,dx$$

$$<p^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\,(-\hbar^2\,\frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2})\ dx$$

$$<p^2>=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\,\alpha^2(\alpha^2x^2-\varepsilon_n)\,\psi_n\ dy$$

$$<p^2>=-\hbar^2\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ \alpha^4x^2\psi_n(x)\,dx-\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon_n\ \psi_n(x)\psi_n(x)\,dx\right]$$

$$<p^2>=-\hbar^2\alpha^4\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\ x^2\psi_n(x)\,dx+\varepsilon_n\hbar^2\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\psi_n(x)\,dx$$

$$\because \quad < x^2 >= \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \; < p^2 >= -\hbar^2 \alpha^4 \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) + \varepsilon_n \hbar^2 \alpha^2$$

$$< p^2 >= -\hbar^2 \alpha^2 \; (n+\frac{1}{2}) + (2n+1)\, \hbar^2 \alpha^2$$

$$< p^2 >= \hbar^2 \alpha^2 \; (n+\frac{1}{2})$$

$$< p^2 >= \hbar^2 \frac{m\omega}{\hbar} \; (n+\frac{1}{2})$$

$$< p^2 >= \hbar m\omega \; (n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \quad (\Delta p) = \sqrt{\hbar m\omega \; (n+\frac{1}{2})}$$

$$\therefore \; \Delta p \, \Delta x = \sqrt{\hbar m\omega \; (n+\frac{1}{2})} \; \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})}$$

$$\therefore \; \Delta p \, \Delta x = (n+\frac{1}{2}) \; \hbar$$

ملاحضة يمكن ايجاد القيمة المتوقعة للطاقة الحركية $< T >$

$$< T >= \frac{< p^2 >}{2m} = \frac{\hbar m\omega}{2m} \; (n+\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2}) \; \hbar\omega = \frac{1}{2} E_n$$

Chapter Five

The One Electron Atom — الذرة الاحادية الالكترون

يتضمن هذا الفصل المسائل التي يكون فيها الجهد او (الطاقة الكامنة) متناظرة كرويا الذي يطلق عليه من الناحية الكلاسيكية بالجهد المركزي (Central Potential) والمقصود به هو ان الطاقة تعتمد فقط على المسافة القطرية بين الجسم ونقطة الاصل وتعرف رياضيا بـ $V(\vec{r}) = V(r)$

Central potential: is the potential that depend only on the radial distance i.e.

$$V(\vec{r}) = V(r)$$

وفي هذا الفصل سنقوم بدراسة الذرة الاحادية الالكترون التي تتكون من نواة ذات شحنة (ze) وإلكترون يدور حولها وسندرس بشكل مركز على النظرية الكمية لذرة الهيدروجين Quantum Theory of Hydrogen Atom

أن الطاقة الكامنة الناتجة من تجاذب الالكترون والنواة هو $V(r) = -\dfrac{k}{r}$ ، حيث ان k مقدار ثابت ويساوي $ze^2/4\pi\varepsilon_\circ$ (حيث ان $z=1$ لذرة الهيدروجين)

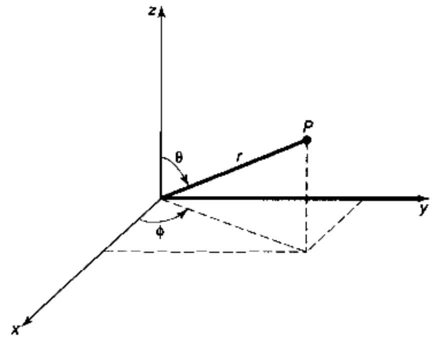
$$\therefore \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$$

من المعادلة الاخيرة نلاحظ ان الطاقة الكامنة تعتمد على الاحداثي القطري فقط .

في الأبعاد الثلاثة ترتبط المسافة r بين الجسم ونقطة الاصل بالاحداثيات الكارتيزية كما يلي

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$$

اي ان دالة الطاقة لجهد مركزي $V(r)$ هي دالة للمتغيرات الثلاثة x, y, z أو $V = V(x, y, z)$ في المحاور الكارتيزية لهذا السبب يفضل استخدام الاحداثيات القطبية الكروية (r, θ, ϕ) لكي تبقى الطاقة الكامنة معتمدة على متغير واحد هو r



أن الإحداثيات القطبية الكروية ترتبط مع الاحداثيات الكارتيزية بالعلاقات التالية:

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

اما معكوس هذه التحولات فهي كالاتي

$$\left.\begin{aligned} r^2 &= x^2+y^2+z^2 \\ \tan\phi &= \frac{y}{x} \\ \cos\theta &= \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}\right\} \qquad \text{(b)}$$

$\theta =$ الزاوية المحصورة بين المتجه الشعاعي $(\vec{r})$ والاتجاه الموجب للمحور z وتدعى بزاوية السمت (Zenith angle)

$\phi =$ الزاوية المحصورة بين مسقط المتجه الشعاعي $(\vec{r})$ على المستوي xy والاتجاه الموجب للمحور (x) وتدعى بزاوية الزوال (Azimuth angle)

The domain of r is $0 \to \infty$

The domain of θ is $0 \to \pi$

The domain of ϕ is $0 \to 2\pi$

The element volume $d\tau = dv = dx\ dy\ dz$ in Cartesian coordinate become in spherical coordinate $d\tau = r^2 \sin\theta\, dr\ d\theta\ d\phi$

$d\tau = r^2 \sin\theta dr\ d\theta\ d\phi$ (عنصر الحجم التفاضلي في المحاورالقطبية الكروية)

The form of del operator $\vec{\nabla}$ is

$$\vec{\nabla} = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z}$$ (مؤثر ديل في الاحداثيات الكارتيزية)

ولغرض تحويل المركبات اعلاه الى المحاور الكروية فاننا نحتاج الى تفاضلات المحاور z, y, x بدلالة المحاور الكروية. ويتم ذلك باستخدام قاعدة التفاضل المتسلسل كالاتي

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

لاحظ اننا لكي نجد $\frac{\partial}{\partial x}$ ، $\frac{\partial}{\partial y}$ ، $\frac{\partial}{\partial z}$ فإننا يجب أن نجد التفاضلات $\frac{\partial r}{\partial x}$ ، $\frac{\partial r}{\partial y}$ ، $\frac{\partial r}{\partial z}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial x}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial y}$ ، $\frac{\partial\theta}{\partial z}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial x}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial y}$ ، $\frac{\partial\phi}{\partial z}$

ويتم ذلك عن طريق المعادلات (b) فيكون لدينا

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$2r\frac{\partial r}{\partial x} = 2x + 0 + 0$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\ \cos\phi$$

وبنفس الأسلوب

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\ \sin\phi$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta$$

ولإيجاد $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ نجري الخطوات التالية

$$\cos\theta = \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$-\sin\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{z}{2}(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{3}{2}}(2x)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{z\,x}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}} \sin\theta}$$

$$= \frac{z\,x}{r^3 \sin\theta}$$

$$= \frac{r^2 \cos\theta \ \sin\theta \cos\phi}{r^3 \sin\theta}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta \ \cos\phi}{r}$$

وبالاسلوب نفسه

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta \ \sin\phi}{r}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$$

بقي لدينا تغيير ϕ بالنسبة لكل من z, y, x كل على انفراد

$$\tan\phi = \frac{y}{x}$$

$$\sec^2\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{r \sin\theta \sin\phi}{r^2 \sin^2\theta \cos^2\phi} \cos^2\phi$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r \sin\theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r \sin\theta}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$

والنتائج اعلاه يمكن ادراجها في الجدول ادناه

$$\frac{\partial r}{\partial x}=\sin\theta\cos\phi \qquad \frac{\partial r}{\partial y}=\sin\theta\sin\phi \qquad \frac{\partial r}{\partial z}=\cos\theta$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x}=\frac{\cos\theta\ \cos\phi}{r} \qquad \frac{\partial\theta}{\partial y}=\frac{\cos\theta\ \sin\phi}{r} \qquad \frac{\partial\theta}{\partial z}=-\frac{\sin\theta}{r}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial x}=-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta} \qquad \frac{\partial\phi}{\partial y}=\frac{\cos\phi}{r\sin\theta} \qquad \frac{\partial\phi}{\partial z}=0$$

$$\therefore\quad \frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$=\sin\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+(-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$=\sin\theta\ \sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\ \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\ \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$=\cos\theta\ \frac{\partial}{\partial r}+(-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})$$

مؤثر ديل في الاحداثيات الكروية

$$\therefore\quad \vec{\nabla}=\hat{r}\frac{\partial}{\partial r}+\hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

المؤثرالابلاسي بدلالة الاحداثيات القطبية الكروية

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

معادلة شرودنكر في الاحداثيات القطبية الكروية

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi)+V(r)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi) \qquad (1)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)\,\psi(r,\theta,\phi)=E\,\psi(r,\theta,\phi) \qquad (2)$$

لأجل حل المعادلة (2) نستخدم طريقة فصل المتغيرات Separation of variable وذلك بوضع

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y(\theta,\phi) \qquad (3)$$

حيث R دالة لـ r بينما Y هي دالة لـ θ , ϕ فقط

من معادلة (3) نستطيع كتابة

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial r}&=Y\frac{\partial R}{\partial r}\\ \frac{\partial\psi}{\partial\theta}&=R\frac{\partial Y}{\partial\theta}\\ \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}&=R\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

واذا عوضنا عن $\psi(r,\theta,\theta)=R(r)\,Y(\theta,\phi)$ ومشتقاتها من المعادلتين (3) ، (4) نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\,Y\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,R\frac{\partial Y}{\partial\theta})\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}R\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)\,RY=ERY$$

وعند قسمة المعادلة اعلاه على $R\,Y$ نحصل على

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

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}+V(r)=E \qquad (5)$$

نضرب طرفي المعادلة (5) بالمقدار $(-\frac{2mr^2}{\hbar^2})$ وإعادة ترتيب المعادلة نحصل على المعادلة التالية

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \qquad (6)$$

نلاحظ ان الطرف الايسر من المعادلة (6) يعتمد على r فقط ، بينما الطرف الايمن على ϕ,θ فقط . لذا يجب ان يكون كل طرف منهما مساوي الى عدد ثابت مثل λ

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=\lambda$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=\lambda$$

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]R=\lambda R \qquad (7)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0 \qquad (8)$$

ولحل المعادلة (8) ينبغي فصل متغيريها ϕ , θ وذلك بوضع

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi) \qquad (9)$$

وبتعويض المعادلة (9) في المعادل (8) نحصل على

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Phi(\phi)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)=0$$

وبالقسمة على $\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\frac{1}{\Phi(\phi)\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda=0$$

نضرب المعادلة اعلاه بـ $\sin^2\theta$ وتحويل الحد الثاني الى الجهة الاخرى

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta})+\lambda\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}$$

ونفس النقاش السابق نرى ان الطرف الايمن من المعادلة اعلاه يعتمد على θ بينما الطرف الايسر يعتمد على ϕ

لذا يجب ان يكون كل طرف منهما مساوي الى عدد ثابت مثل μ

$$-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}=\mu \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+\mu\ \Phi(\phi)=0 \qquad (10)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{\mu}{\sin^2\theta})\ \Theta(\theta)=0 \qquad (11)$$

حل المعادلات التفاضلية Solution of Differation Equation

نلاحظ من المعادلات السابقة اننا ادخلنا ثابتي الفصل λ , μ ومن الملاحظ ايضا ان الطاقة الكامنة $V(r)$ تظهر فقط في المعادلة (7) اي معادلة R .اي ان الدالة R والمعادلة التفاضلية الخاصة بها تعتمد بشكل ظاهر على نوع دالة الطاقة الكامنة $V(r)$ بينما الدالتان Θ,Φ ومعادلتهما التفاضليتان لاتختلفان اذا اختلف نوع دالة الطاقة الكامنة لان $V(r)$ لاتظهر في هاتين المعادلتين.

الشرط العياري لدالة الموجة

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

حيث ان

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\ \Theta(\theta)\ \Phi(\phi)$$

$$\psi^*(r,\theta,\phi)=R^*(r)\ \Theta^*(\theta)\ \Phi^*(\phi)$$

وبما اننا استخدامنا الاحداثيات القطبية الكروية عنصر الحجم $d\tau$ هو

$$d\tau=r^2\sin\theta\ dr\ d\theta\ d\phi$$

$$\therefore\ \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}R^*(r)R(r)\ \Theta^*(\theta)\Theta(\theta)\ \Phi^*(\phi)\Phi(\phi)\ r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi=1$$

$$\int_0^\infty R^*(r)R(r)\ r^2dr\int_0^\pi\Theta^*(\theta)\ \Theta(\theta)\ \sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}\Phi^*(\phi)\ \Phi(\phi)\ d\phi=1$$

$$\Rightarrow$$

$$\int_0^\infty R^*(r)\,R(r)\ r^2dr=1$$

$$\int_0^{\pi} \Theta^*(\theta)\, \Theta(\theta) \sin\theta \, d\theta = 1$$

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

اولا حل المعادلة الخاصة لـ $\Phi(\phi)$

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + \mu\, \Phi(\phi) = 0 \qquad (10)$$

نفرض ان الحل للمعادلة اعلاه هو

$$\Phi(\phi) = Ae^{ik\phi}$$

وباخد المشتقة الثانية للمعادلة $\Phi(\phi) = Ae^{ik\phi}$ وتعويضها في معادلة (10) نحصل على

$$\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} = ik\, Ae^{ik\phi} \quad , \quad \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -k^2 Ae^{ik\phi}$$

$$-k^2 Ae^{ik\phi} + \mu\, Ae^{ik\phi} = 0$$

$$(-k^2 + \mu) Ae^{ik\phi} = 0$$

$$-k^2 + \mu = 0 \quad \Rightarrow \quad k^2 = \mu \quad ، \quad k = \pm\sqrt{\mu}$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi) = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi}$$

وبما ان دالة الموجة يجب ان تكون فريدة او احادية القيمة في اي نقطة اي ان

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

$$Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,(\phi+2\pi)}$$

$$Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} = Ae^{\pm i\sqrt{\mu}\,\phi} \cdot e^{\pm i\sqrt{\mu}\,2\pi}$$

$$e^{\pm i\sqrt{\mu}\,2\pi)} = 1$$

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

$$\cos 2\pi\sqrt{\mu} \pm i \sin 2\pi\sqrt{\mu} = 1$$

وواضح ان الحد الخيالي يجب ان يساوي صفر

$$\sin 2\pi\sqrt{\mu} = 0$$

$$\cos 2\pi\sqrt{\mu}=1 \quad \Rightarrow \quad 2\pi\sqrt{\mu}=\cos^{-1}1$$

$$\therefore \quad \sqrt{\mu}=m \qquad (12)$$

حيث أن $m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots\cdots\cdots$

ويسمى $m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots$ بالعدد الكمي المغناطيسي (Magnetic quantum number)

$$\therefore \quad \Phi(\phi)=Ae^{im\phi}$$

ولإيجاد A نستخدم الشرط العياري وكما يلي

$$\int \Phi^*(\phi)\,\Phi(\phi)\,d\phi=1$$

$$\int_0^{2\pi} A^* e^{-im\phi} A e^{im\phi}\,d\phi=1$$

$$A^2\int_0^{2\pi} d\phi=1$$

$$A=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\phi} \qquad (13)$$

حيث ان $m=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots\cdots$

تماثل الجزء الزوالي لدالة الموجة

في الاحداثيات الكارتيزية تماثل الدالة ψ يعني التحويل من $\vec{r}\rightarrow -\vec{r}$ ، ولكن في الاحداثيات القطبية الكروية يعني

$$r\rightarrow r \quad ، \quad \theta\rightarrow \pi-\theta \quad ، \quad \phi\rightarrow \pi+\phi$$

$$\phi(\pi+\phi)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\,e^{im(\phi+\pi)}$$

$$=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}e^{im\phi}\cdot e^{im\pi}$$

$$e^{im\pi}=\cos m\pi+i\sin m\pi$$

1. $\sin m\pi=\sin 0=\sin\pi=\sin 2\pi=0$
2. $\cos m\pi=(-1)^m$

$$\therefore \quad \Phi(\pi+\phi)=(-1)^m\,\Phi(\phi)$$

$\therefore$ Parity of $\Phi(\phi)$ is $(-1)^m$

اي بعبارة اخرى ان تماثل Φ فهو يعني ان الدالة $e^{im\phi}$ يجب ان تضرب بالعامل $e^{im\pi}$ والذي يساوي $(-1)^m$

حل المعادلة الخاصة بـ $\Theta(\theta)$ المعادلة (11)

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{\mu}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \qquad (11)$$

وبالتعويض عن الكمية $\mu=m^2$ في المعادلة اعلاه ينتج

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta})+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\,\Theta(\theta)=0 \qquad (14)$$

ولاجل حل المعادلة اعلاه نعمل بعض التسهيلات الرياضية

نفرض ان $\omega=\cos\theta$ ، $\Theta(\theta)=p(\omega)$

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{d\omega}{d\theta}\cdot\frac{d}{d\omega}$$

$$\frac{d}{d\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d\omega}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}(-\sin\theta\frac{d}{d\omega})(\sin\theta(-\sin\theta\frac{d}{d\omega}p(\omega)))+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\,p(\omega)=0$$

$$\frac{1}{d\omega}(\sin^2\theta\frac{dp(\omega)}{d\omega})+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})p(\omega)=0$$

$$\because\quad \cos^2\theta+\sin^2\theta=1 \quad\rightarrow\quad \sin^2\theta=1-\cos^2\theta$$

$$\therefore\quad \sin^2\theta=1-\omega^2$$

$$\frac{1}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\frac{dp(\omega)}{d\omega}\right]+(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2})\,p(\omega)=0 \qquad (15)$$

بما ان قيم $0\le\theta\le\pi$ فان قيم ω المقابلة ستكون $-1\le\omega\le+1$. لو لاحضنا المعادلة (15) نجد انها (Second order non linear differential equation) معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية فيها الثابت λ مجهول بينما m له قيم محددة وكما بينا سابقا وكما في المعادلات (12) (13) ، بصورة عامة فان حلولها تصبح مالانهاية في $\omega=\pm1$ وهذه هي حلول غير مقبولة فيزيائيا. اما الحل المقبول يقابل حالة خاصة فيها

$$\lambda=\ell(\ell+1) \quad ، \quad \ell=0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \quad , \ \ell\ge|m|$$

حيث ان ℓ يسمى العدد الكمي للزخم الزاوي المداري Angular Momentum Quantum Number

فالحلول المقبولة للمعادلة (15) تدعى دوال ليجندر المترافقة Associated Legender functions اي ان

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} p_\ell(\omega) \qquad (16)$$

$$\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \quad , \ \ell \geq |m|$$

حيث تسمى الدالة $p_\ell(\omega)$ كثير حدود ليجندر (Legender polynomial) من الرتبة ℓ والمعرفة بالمعادلة

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} \left[(\omega^2 - 1)^\ell \right] \qquad (17)$$

في حالة $m = 0$ فان المعادلة (16) تعطينا

$$p_\ell^0(\omega) = p_\ell(\omega) \qquad (18)$$

اي ان كثيرات حدود ليجندر تحقق المعادلة (15) عندما يكون $m = 0$ والذي يعني $p_\ell(\omega)$ تحقق المعادلة التالية

$$\frac{d}{d\omega}\left[(1-\omega^2) \frac{dp_\ell}{d\omega} \right] + \ell(\ell+1) p_\ell = 0 \qquad (19)$$

صفات دوال ليجندر

اولا $p_\ell(\omega)$ هي دوال حقيقية على شكل كثيرات حدود في ω ومن درجة ℓ وتماثل $(-1)^\ell$ ندرج بعض منها:

$$p_0(\omega)=1$$

$$p_1(\omega)=\omega$$

$$p_2(\omega)=\tfrac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_3(\omega)=\tfrac{1}{2}(5\omega^2-3\omega)$$

ثانيا الدوال $p_\ell^m(\omega)$ هي عبارة عن الكمية $(1-\omega)^{\frac{|m|}{2}}$ مضروبة في كثيرة حدود حقيقية من الدرجة $(\ell-|m|)$

ولها تماثل $(-1)^{\ell-|m|}$ وفي مايلي بعض من دوال ليجندر المترافقة

$p_1^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}$	$\ell=1$ ، $m=\pm1$
$p_2^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega$	$\ell=2$ ، $m=\pm1$
$p_3^{\pm1}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot\frac{3}{5}(5\omega-1)$	$\ell=3$ ، $m=\pm1$
$p_2^{\pm2}(\omega)=(1-\omega^2)\cdot 3$	$\ell=2$ ، $m=\pm2$
$p_3^{\pm2}(\omega)=(1-\omega^2)\cdot 15\omega$	$\ell=3$ ، $m=\pm2$
$p_3^{\pm3}(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{3}{2}}\cdot 15$	$\ell=3$ ، $m=\pm3$

Example : Set up the following associated Legender function $p_2^1(\omega)$

Solution: $\ell=2$ ، $m=1$

$$p_\ell^m(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}\,p_\ell(\omega)$$

حيث ان

$$p_\ell(\omega)=\frac{1}{2^\ell\,\ell!}\frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$\ell=2\ \Rightarrow\quad p_2(\omega)=\frac{1}{2^2 2!}\frac{d^2}{d\omega^2}\left[(\omega^2-1)^2\right]$$

$$=\frac{1}{8}\frac{d}{d\omega}\cdot\frac{d}{d\omega}(\omega^2-1)^2$$

$$=\frac{1}{8}\frac{d}{d\omega}\,2\cdot(\omega^2-1)\cdot 2\omega$$

$$=\frac{1}{2}\frac{d}{d\omega}(\omega^3-\omega)$$

$$=\frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$p_2^1(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\omega}\frac{1}{2}(3\omega^2-1)$$

$$=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega$$

$\therefore\quad p_2^1(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{1}{2}}\cdot 3\omega$ وهو المطلوب

ثالثا الدوال $p_\ell^m(\omega)$ هي دوال متعامدة مع بعضها التعض لقيم $-1\le\omega\le+1$

$$\int_{-1}^{+1}p_\ell^m(\omega)p_{\ell'}^m(\omega)\ \ d\omega=0$$

لكنها غير عياريه أي أن

$$\int_{-1}^{+1}\left|p_\ell^m(\omega)\right|^2 d\omega=\frac{2}{2\ell+1}\cdot\frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}$$

وعند ضرب دوال ليجندر المترافقة $p_{\ell'}^m(\omega)$ بالعدد $\left[\frac{2}{2\ell+1}\cdot\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$ تكون عندئذ دوال عيارية

Spherical Harmonics التوافقيات الكروية

Spherical Harmonics function is simply the product result of zenithal times azimuthal parts of the wave function i.e.

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = p_\ell^m \cdot \Phi_m(\phi)$$

تدعى حاصل ضرب الجزء السمتي بالجزء الزوالي من دالة الموجة بالتوافقيات الكروية اي عند مزج Θ ، Φ نحصل على:

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = N_\ell^m p_\ell^m(\cos\theta)\cdot e^{im\phi} \qquad (20)$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots\cdots$ ، $\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots$, $\ell \geq |m|$

حيث ان N_ℓ^m يدعى بثابت المعايرة لدالة التوافقيات الكروية ويعطى بالعلاقة التالية

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\cdot\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

ان دالة التوافقيات الكروية تكون مجموعة من الدوال الذاتية العيارية والمتعامدة كما ان الدالة Y_ℓ^m هي دالة ذاتية للمعادلة (8) بقيمة ذاتية قدرها $\lambda_\ell = \ell(\ell+1)$ والمسالة منحلة بدرجة انحلال مقدارها $(2\ell+1)$ وذلك لان لكل قيمة من ℓ هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m اي ان

$$m = -\ell\ ,\ \ell+1, \cdots\cdots\cdots \ell-1\ ,\ \ell$$

Example $\ell = 1 \Rightarrow m = -1, 0, 1$

$\ell = 2 \Rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2$

ان تماثل دالة التوافقيات الكروية هو $(-1)^\ell$ لان تماثل الدالة $p_\ell^m(\cos\theta)$ الجزء السمتي هو $(-1)^{(\ell-|m|)}$ وتماثل الجزء الزوالي هو $(-1)^{|m|}$ لذا فان تماثل دالة التوافقيات الكروية يصبح $(-1)^\ell$ وادناه بعض الدالات التوافقيات الكروية لقيم مختلفة لـ ℓ ، m

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \pm\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \pm\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta\cos\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2\theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

Example : Set up the following Spherical Harmonics function Y_2^{+1}

Solution:

$$Y_2^{+1} \Rightarrow \quad \ell = 2 \quad ، \quad m = 1$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = N_\ell^m \, p_\ell^m(\cos\theta) \, e^{im\phi}$$

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= (-1)^{\frac{1}{2}\cdot 2} \cdot \left(\frac{5}{4\pi} \cdot \frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left(\frac{5}{24\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$p_\ell^m(\omega) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} \, p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$= \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{d\omega^2}\left[(\omega^2-1)^2\right]$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} \frac{d}{d\omega} (\omega^2-1)^2$$

$$= \frac{1}{8} \frac{d}{d\omega} 2(\omega^2 - 1) \cdot 2\omega$$

$$= \frac{1}{2} \frac{d}{d\omega} (\omega^3 - \omega)$$

$$= \frac{1}{2} (3\omega^2 - 1)$$

$$p_2^1(\omega) = (1 - \omega^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{d\omega} \frac{1}{2} (3\omega^2 - 1)$$

$$= (1 - \omega^2)^{\frac{1}{2}} \cdot 3\omega$$

$$= 3\cos\theta \sin\theta$$

$$\therefore \quad Y_2^1 = -\left(\frac{5}{24\pi} \right)^{\frac{1}{2}} 3\cos\theta \sin\theta \, e^{i\phi}$$

$$= -\left(\frac{15}{8\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta \sin\theta \, e^{i\phi}$$

بعد الحصول على الحل الرياضي الخاص بـ Θ ، Φ وجدنا ان الدالة Φ تحتوي على الثابت الوسيط m المحدد بالاعداد الصحيحة الموجبة والسالية اي ان

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots\cdots\cdots$ (العدد الكمي المغناطيسي)

بينما الدالة Θ تحتوي على ثابت وسيط آخر ℓ محدد باعداد صحيحة موجبة اكبر او تساوي $|m|$

$\ell = 0, 1, 2, 3, \cdots\cdots\cdots$ $\ell \geq |m|$ العدد الكمي للزخم الزاوي (المداري)

ثالثا الجزء القطري

من المعادلة (7) وبعد التعويض عن $\lambda = \ell(\ell+1)$ تتحول الى

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(E - V(r)) = \ell(\ell+1)R$$

وبالقسمة على r^2 والترتيب نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R = 0 \qquad (21)$$

تسمى المعادلة (21) بمادلة شرودنكر القطرية ولاجل ايجاد الجزء القطري لدالة الموجة R يجب معرفة الطاقة الكاملة $V(r)$ وفي هذا الفصل سندرس ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة لها متناولين في دراستنا الجهد المتبادل بين الالكترون والنواة

ذرة الهيدروجين والذراة الشبيهة لها The Hydrogen and Hydrogen Like Atom

من المعروف ان الذرة الشبيهة بذرة الهيدروجين تتكون من نواة شحنتها Ze ويدور حولها الكترون واحد في مدارها الخارجي ، وعلية ان الطاقة الكامنة للنظام

$$V(r) = \frac{-Ze}{4\pi\varepsilon_\circ r} \quad \Rightarrow \quad V(r) = \frac{-k}{r} \quad ، \quad k = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$$

وبالتعويض عن $V(r) = \dfrac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$ بالمعادلة (21) نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{k}{r}) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R = 0$$

وبضرب المعادلة الاخيرة بالكمية $\dfrac{-\hbar^2}{8mE}$

$$\frac{-\hbar^2}{8mEr^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}(\frac{-\hbar^2}{8mE})(E + \frac{k}{r}) + \frac{\hbar^2}{8mE}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R = 0$$

$$\frac{-\hbar^2}{8mEr^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) - \frac{kR}{4Er} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{8mEr^2}R - \frac{R}{4} = 0 \qquad (22)$$

نفرض ان

$$\alpha^2 = \frac{-8mE}{\hbar^2}$$
$$n = \frac{-\alpha k}{4E} \qquad (23)$$

وبالتعويض بالمعادلة (22) ينتج

$$\frac{1}{\alpha^2 r^2}\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) - \frac{n}{\alpha}\frac{R}{r} + \frac{\ell(\ell+1)}{\alpha^2 r^2} R - \frac{R}{4} = 0$$

نبدل المتغير المستقل بـ ρ من خلال العلاقة

$$\rho = \alpha r$$

$$\therefore \; \frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr} \cdot \frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{d}{dr} = \alpha \frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{1}{\rho^2}(2\rho \frac{dR}{d\rho} + \rho^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2}) + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right] R = 0$$

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right] R = 0 \qquad (24)$$

لقيم كبيرة لـ ρ المعادلة (24) تختصر الى

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{R}{4} = 0$$

لحل المعادلة اعلاه نفرض الحل بالصيغة هو

$$R(\rho) = e^{c\rho}$$

لايجاد قيمة الثابت c نعوض الحل في المعادلة وكما يلي:

$$c^2 e^{c\rho} - \frac{e^{c\rho}}{4} = 0 \quad \Rightarrow \quad (c^2 - \frac{1}{4}) e^{c\rho} = 0$$

$$e^{c\rho} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad c^2 - \frac{1}{4} = 0$$

$$\therefore \quad c = \pm \frac{1}{2}$$

الحل بصيغة الاس الموجب غير مقبول فيزياويا وذلك لانه يقترب من المالانهاية عندما تقترب ρ من المالانهاية ويأخذ الحل السالب لانه يحقق الشرط الحدودي.

$$\therefore \quad R(\rho) = e^{-\rho/2} \qquad (25)$$

للحصول على الحل المضبوط للمعادلة 24 فاننا نضرب المعادلة 25 بدالة الى ρ مثل $F(\rho)$ وكما يلي

$$R(\rho) = F(\rho)\, e^{-\rho/2} \qquad (26)$$

ونفرض ان

$$F(\rho) = \rho^s L(\rho) \qquad (27)$$

حيث ان s هو عدد موجب وان $L(\rho)$ هي متسلسلة لانهائية بالصيغة

$$L(\rho) = a_\circ + a_1\rho + a_2\rho + \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots = \sum_{\upsilon=0}^{\infty} \rho^{\upsilon}$$

وان $a_\circ \neq 0$

بتعويض المعادلة 25 في المعادلة 24 نحصل على

$$R'(\rho) = -\frac{1}{2} e^{-\rho/2} F(\rho) + e^{-\rho/2} F'(\rho)$$

$$R''(\rho) = \frac{1}{4} e^{-\rho/2} F(\rho) + (-\frac{1}{2} e^{-\rho/2} F'(\rho)) + \{-\frac{1}{2} e^{-\rho/2} F'(\rho) + e^{-\rho/2} F''(\rho)\}$$

$$R''(\rho) = (F''(\rho) - F'(\rho) + \frac{1}{4} F(\rho)) e^{-\rho/2}$$

وبالتعويض عن $R(\rho)$ ، $R'(\rho)$ ، $R''(\rho)$

$$\{F''(\rho)-F'(\rho)+\frac{1}{4}F(\rho)\}e^{-\rho/2}+\frac{2}{\rho}\{F'(\rho)-\frac{1}{2}F(\rho)\}e^{-\rho/2}$$

$$+\{\frac{n}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}\}F(\rho)e^{-\rho/2}$$

وبالقسمة على $e^{-\rho/2}$ والتبسيط نحصل

$$F''(\rho)+(\frac{2}{\rho}-1)F'(\rho)+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})F(\rho)=0 \qquad (28)$$

وبتعويض المعادلة 27 في المعادلة 28 نحصل على

$$F'(\rho)=s\rho^{s-1}L(\rho)+\rho^{s}L'(\rho)$$

$$F''(\rho)=s(s-1)\rho^{s-2}\cdot L(\rho)+s\rho^{s-1}L'(\rho)+s\rho^{s-1}L'(\rho)+\rho^{s}L''(\rho)$$

$$=\rho^{s}L''(\rho)+2s\rho^{s-1}L'(\rho)+s(s-1)\rho^{s-2}L(\rho)$$

بتعويض $F(\rho)$ ، $F'(\rho)$ ، $F''(\rho)$ نحصل على

$$=\rho^{s}L''(\rho)+2s\rho^{s-1}L'(\rho)+s(s-1)\rho^{s-2}L(\rho)$$

$$+(\frac{2}{\rho}-1)[\rho^{s}L'(\rho)+s\rho^{s-1}L(\rho)]+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell-1)}{\rho^2})\rho^{s}L(\rho)=0$$

وبضرب العلاقة الاخيرة بـ $\frac{\rho^2}{\rho^s}$

$$\rho^2L''(\rho)+2s\rho^{s}L'(\rho)+s(s-1)L(\rho)+(\frac{2}{\rho}-1)[\rho^{s}L'(\rho)+s\rho^{s}L(\rho)]$$

$$+(\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell-1)}{\rho^2})\rho^2L(\rho)=0$$

والعلاقة الاخيرة يمكن كتابتها بالشكل التالي

$$\rho^2L''(\rho)+[2s\rho+(2\rho-\rho^2)]L'(\rho)+[s(s-1)+s(\frac{2}{\rho}-1)\rho]L(\rho)$$

$$+(\rho(n-1)-\ell(\ell-1))L(\rho)=0$$

$$\therefore\ \rho^2 L''(\rho)+\rho\,[(2s+1)-\rho]L'(\rho)+[s(s-1)+\rho(n-s-1)-\ell(\ell-1)]\,L(\rho)=0 \qquad (29)$$

وبما ان $L(0)\neq 0$ والمعادلة 29 يجب ان تكون صحيحة لكل قيم ρ ، لذلك لقيمة $\rho=0$ نحصل على

$$s(s-1)=\ell(\ell-1)$$

وبحل هذه المعادلة للمتغير s

$$s^2+s-\ell(\ell+1)+s\ell-s\ell=0$$

$$s^2+s(\ell+1)-s\ell-\ell(\ell+1)=0$$

$$s[s+(\ell+1)]-\ell[s+(\ell+1)]$$

$$[s+(\ell+1)](s-\ell)=0$$

$$s=\ell \qquad \text{or} \qquad s=-(\ell+1)$$

وبما ان $\ell\geq 0$ فان الحل $s=-(\ell+1)$ يجب ان يهمل لانه يجعل المعادلة $R(\rho)$ لانهاية عند $\rho=0$ لذلك فان المعادلة 29 تصبح

$$\rho L''(\rho)+[(2\ell+1)-\rho]L'(\rho)+(n-\ell-1)L(\rho)=0 \qquad (30)$$

واذا عوضنا عن $L(\rho)=\sum_{\upsilon=0}^{\infty}a_\upsilon\rho^\upsilon$ في المعادلة 30 نحصل :

$$L'(\rho)=\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\, a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}$$

$$L''(\rho)=\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-2}$$

$$\therefore\quad \sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\, a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\, a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=0}^{\infty}a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}=0$$

$$\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon(\upsilon-1)\,a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\, a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\upsilon\, a_\upsilon\,\rho^{\upsilon-1}$$

$$+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}a_\upsilon\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_\circ=0$$

لنفرض ان $\upsilon=m+1$ ونعوض عن ذلك في الحد الاول والحد الثالث من العلاقة الاخيرة فنحصل على

$$\sum_{m=1}^{\infty}(m+1)m\ a_{m+1}\,\rho^m-\sum_{\upsilon=1}^{\infty}\upsilon\, a_\upsilon\,\rho^\upsilon+2(\ell+1)\sum_{m=1}^{\infty}(m+1)\ a_{m+1}\,\rho^m$$

$$+(n-\ell-1)\sum_{\upsilon=1}^{\infty}a_{\upsilon}\,\rho^{\upsilon}+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_{\circ}=0$$

بابدال الرمز m في الحد الاول والحد الثالث بالرمز υ

$$\sum_{\upsilon=2}^{\infty}\{\upsilon(\upsilon-1)\,a_{\upsilon+1}-\upsilon\,a_{\upsilon}+2(\ell+1)(\upsilon+1)\,a_{\upsilon+1}+(n-\ell-1)\,a_{\upsilon}\}\rho^{\upsilon}$$

$$+2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_{\circ}=0$$

لاجل ان تحقق هذه العلاقة يجب ان يكون

$$2(\ell+1)\,a_1+(n-\ell-1)\,a_{\circ}=0$$

$$a_{\upsilon+1}(\upsilon+1)(\upsilon+2(\ell+1))-a_{\upsilon}(\upsilon-n+\ell+1)=0$$

ومن ذلك نحصل

$$a_1=\frac{-(n-\ell-1)}{2(\ell+1)}\,a_{\circ}$$

$$\frac{a_{\upsilon+1}}{a_{\upsilon}}=\frac{\upsilon-n+\ell+1}{(\upsilon+1)(\upsilon+2\ell+2)}$$

ولقيم كبيرة لـ υ نجد ان

$$\frac{a_{\upsilon+1}}{a_{\upsilon}}=\frac{1}{\upsilon}$$

لذلك فان

$$L(\rho)\approx e^{\rho}$$

وعليه فان الدالة القطرية

$$R(\rho)=e^{\rho}\cdot e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$\approx e^{\frac{\rho}{2}}$$

وهذا غير مسموح لان $R(\rho)$ تزداد اسيا مع ρ وعندما $\rho\rightarrow\infty$ فانها تتباعد ولم تعد صالحة كحل ولتحقيق المحدودية فان يجب ان تقطع اي بعبارة اخرى ان تكون الدالة $F(\rho)$ كثيرة حدود بدلا من متسلسلة لانهائية وذلك يمكن عن طريق اختيار n عدد صحيح موجب بحيث ان

$$\upsilon = n - \ell - 1$$

او ان نقول

$$n = \upsilon + \ell + 1$$

وهذا الاجراء يجعل $a_{\upsilon+1}$ (او $a_{n-\ell}$) وكل المعاملات اللاحقة صفر

بما ان اقل قيمة لـ υ هي الصفر فهذا يعني

$$n \geq \ell + 1$$

او ان

$$n > \ell$$

ومن المعروف مسبقا ان $\ell = 0,1,2,3,\cdots\cdots\cdots \geq |m|$ لذلك فان

$$n = 1,2,3,\cdots\cdots\cdots\cdots > \ell$$

اذن الحالة $n > \ell$ فانه يوجد حل للدالة القطرية بالصيغة

$$R_{n\ell}(\rho) = \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, L_{n\ell} \qquad (31)$$

الدالة $L_{n\ell}(\rho)$ هي كثيرة الحدود ذا الدرجة $(n-\ell-1)$ لذا فان الدالة القطرية $R(\rho)$ هي عبارة عن المقدار $e^{-\frac{\rho}{2}}$ مضروبة في كثيرة حدود من الدرجة $(n-1)$

في الرياضيات الدالة $L_q^p(\rho)$ التي تحقق المعادلة التالية

$$\rho \frac{d^2 L_q^p}{d\rho^2} + (p+1-\rho)\,\frac{dL_q^p}{d\rho} (q-p)\, L_q^p = 0 \qquad (*)$$

تسمى بمتسلسلة لاكور المترافقة (Associated Laguerre Polynomials)

التي يعبر عنها رياضيا

$$L_p^q(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho)$$

حيث ان $L_q(\rho)$ تعرف بمتسلسلة لاكور (Laguerre polynomials)

$$L_q(\rho) = e^{\rho}\,\frac{d^q}{d\rho^q}\,(e^{-\rho}\rho^q)$$

بمقارنة المعادلة 30 مع المعادلة التفاضلية (*) نجد ان

حيث $p = 2\ell + 1$ ، $q = n + \ell$ $\qquad L_{n\ell}(\rho) = L_q^p(\rho) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$

اذن المعادلة القطرية بصيغتها النهائية هي :

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\ \rho^{\ell}\, e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1} \tag{32}$$

حيث $N_{n\ell}$ هو ثابت المعايرة ويعطى بالعلاقة

$$N_{n\ell} = -\left[\alpha^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\cdot[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \cdot \frac{(n-\ell-1)!}{2n\cdot[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{33}$$

متسلسلة لاكور المترافقة Associated Laguerre Polynomials $\quad L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \cdot L_{n+\ell}$

متسلسلة لاكور (Laguerre polynomials) $\quad L_{n+\ell} = e^{\rho} \cdot \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho}\cdot\rho^{n+\ell})$

حيث ان $\alpha = \frac{2z}{na_\circ}$ ، $a_\circ$ نصف قطر مدار بور الاول ، $\rho = \alpha\, r = \frac{2z}{na_\circ} r$

وندرج ادناه بعض الامثلة على الجزء القطري

$$R_{10}(\rho) = 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{20}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{21}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} \rho\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$R_{30}(\rho) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (6-6\rho+\rho^2)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

Example: Work out the radial wave function R_{10} , R_{20}

Solution:

اولا

$$R_{10} \Rightarrow n=1 \ , \ \ell=0$$

$$R_{n\ell}(\rho)=N_{n\ell}\ \rho^{\ell}\ e^{-\frac{\rho}{2}}L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$N_{n\ell}=-\left[\left(\frac{2z}{na_{\circ}}\right)^{3}\ \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^{3}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{10}=-\left[\left(\frac{2z}{1\cdot a_{\circ}}\right)^{3}\ \frac{(1-0-1)!}{2\,1[(1+0)!]^{3}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$=-\left[\left(\frac{2z}{a_{\circ}}\right)^{3}\ \frac{1}{2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$=-2\left(\frac{z}{a_{\circ}}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)=\frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}}\cdot L_{n+\ell}$$

$$L_{n+\ell}=e^{\rho}\ \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho}\ \ \rho^{n+\ell})$$

$$\therefore \quad L_{1}=e^{\rho}\,\frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\ \rho)$$

$$=e^{\rho}\ (e^{-\rho}-\rho\ e^{-\rho})$$

$$=1-\rho$$

$$L_{1}^{1}(\rho)=\frac{d}{d\rho}L_{1}=\frac{d}{d\rho}(1-\rho)$$

$$=-1$$

$$\therefore \quad R_{10}(\rho) = -2 \cdot \left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot (-1)$$

$$= 2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

ثانيا R_{20}

$$\Rightarrow \quad n = 2 \quad , \quad \ell = 0$$

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\ \rho^{\ell}\ e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

$$N_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{20} = -\left[\left(\frac{2z}{2\cdot a_\circ}\right)^3 \frac{(2-0-1)!}{2\cdot 2\,[(2+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\left[\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^3 \frac{1}{4\cdot 8}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{\,2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}}\, L_{n+\ell}(\rho)$$

$$L_{n+\ell}(\rho) = e^{\rho}\ \frac{d^{\,n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}\,(e^{-\rho}\ \ \rho^{n+\ell})$$

$$\therefore \quad L_2(\rho) = e^{\rho}\ \frac{d^2}{d\rho^2}\,(e^{-\rho}\ \rho^2)$$

$$= e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}\,\frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\ \rho^2)$$

$$= e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}\,(2\rho\, e^{-\rho} - \rho^2\, e^{-\rho})$$

$$= e^{\rho}\ (-2\rho\, e^{-\rho} + 2e^{-\rho} + \rho^2\ e^{-\rho} - 2\rho\, e^{-\rho})$$

$$\therefore \quad L_2 = \rho^2 - 4\rho + 2$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{\,2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}}\ L_{n+\ell}$$

$$\therefore \quad L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ L_2$$

$$L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ (\rho^2 - 4\rho + 2)$$

$$= 2\rho - 4$$

$$L_2^1(\rho) = -2(2-\rho)$$

$$\therefore \quad R_{20}(\rho) = -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\ [-2(2-\rho)]$$

$$= -\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)\ e^{-\frac{\rho}{2}}$$ وهو المطلوب

وللحصول على الدالات الموجية للذرات الاحادية الالكترون او الذرات الشبيهة بذرة الهيدروجين نمزج حلول $R_{n\ell}(r)$ من المعادلة (32) وحلول $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ من المعادلة (20) في المعادلة 3 نجد ان

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\ Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell\ e^{-\frac{\rho}{2}}\ L_{n+\ell}^{2\ell+1}\quad Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

او

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2z}{na_\circ}\, r\right)^\ell\ e^{-\frac{zr}{na_\circ}}\ L_{n+\ell}^{2\ell+1}\quad Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

$$p_\ell^m(\cos\theta) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} \, p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \, \ell!} \frac{d^\ell}{d\omega^\ell} \left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \, L_{n+\ell}(\rho)$$

$$L_{n+\ell} = e^\rho \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho} \, \rho^{n+\ell})$$

وندرج ادناه بعض الامثلة على الذرات الشبيهة لذرة الهيدروجين لبعض قيم لـ n

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2-\frac{zr}{a_\circ}\right) e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{zr}{a_\circ}\right) e^{-\frac{zr}{2a_\circ}} \cos\theta$$

مثال: اوجد دالة الموجة للحالة الارضية لذرة الهيدروجين

الحل ايجاد ψ_{100} اي ان $\quad n=1 \;،\; \ell=0 \;،\; m=0$

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell} \, Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$R_{n\ell} = -\left[\left(\frac{2z}{na_\circ}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\,[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell \, e^{-\frac{\rho}{2}} \, L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$= -\left[\left(\frac{2z}{1\cdot a_\circ}\right)^3 \frac{(1-0-1)!}{2\cdot 1[(1+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^0 \, e^{-\frac{\rho}{2}} \, L_{1+0}^{2\cdot 0+1}$$

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} \, L_{n+\ell}$$

$$L_{n+\ell} = e^{\rho}\ \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}}(e^{-\rho}\ \rho^{n+\ell}) \qquad\qquad n=1\ ,\quad \ell=0$$

$$L_1 = e^{\rho}\ \frac{d}{d\rho}(e^{-\rho}\ \rho) = e^{\rho}\ (e^{-\rho} - \rho\ e^{-\rho})$$

$$=1-\rho$$

$$L_1^1(\rho) = \frac{d}{d\rho}\ L_1$$

$$=\frac{d}{d\rho}(1-\rho) = -1$$

$$R_{10}(\rho) = -2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\ (-1)$$

$$=2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$=2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}}\ e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}\ P_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

$$p_\ell^m(\cos\theta) = (1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}}\ \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}\ p_\ell(\omega)$$

$$p_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell\ \ell!}\ \frac{d^\ell}{d\omega^\ell}\left[(\omega^2-1)^\ell\right]$$

$$\therefore\quad p_0(\omega) = \frac{1}{2^0 0!}\frac{d^0}{d\omega^0}\left[(\omega^2-1)^0\right]$$

$$=1$$

$\because\quad p_\ell^0 = p_\ell = 1$ **لاحظ معادلة رقم 18**

$$\therefore\quad Y_0^0 = (-1)^{\frac{0}{2}}\left[\frac{2\cdot 0+1}{4\pi}\cdot\frac{0!}{0!}\right]^{\frac{1}{2}}\cdot 1\cdot 1$$

$$=\left[\frac{1}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore\quad \psi_{100}=2\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_\circ}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{zr}{a_\circ}}$$

وبما ان $z=1$ لذرة الهيدروجين

$$=\frac{a^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{r}{a_\circ}}$$ وهو المطلوب

Energy eigen value

من المعادلة 23 نجد ان

$$\alpha^2=\frac{-8mE}{\hbar^2}\quad ،\quad n=\frac{-\alpha k}{4E}$$

$$\therefore\quad \alpha=\frac{-4En}{k}\quad\Rightarrow\quad \alpha^2=\frac{16E^2n^2}{k^2}$$

$$\therefore\quad \frac{16E^2n^2}{k^2}=\frac{-8mE}{\hbar^2}$$

$$\therefore\quad E=\frac{-mk^2}{2\cdot\hbar^2 n^2}$$

وبالتعويض عن قيمة $k=\frac{ze^2}{4\pi\varepsilon_\circ}$ ، $k^2=\frac{z^2e^4}{16\cdot\pi^2\varepsilon_\circ^2}$

$$\therefore\quad E_n=-\frac{me^4z^2}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}\qquad(34)$$

المعادلة (34) هي نفس المعادلة التي سبق ان حصل عليها بور عندما افترض ان الزخم الزاوي للالكترون في مداره حول النواة هو عبارة عن عدد صحيح مضروب في $\hbar$. والمعادلة (34) تبين ان الطاقة E تعتمد على العدد الكمي الاساسي n ولا تعتمد على العدد الكمي ℓ ، m لذلك تكتب E عادة بالشكل E_n بدلالة n فقط. واوطا طاقة تقابل الحالة $(n=1)$ أي أن

$$E_1=-\frac{me^4z^2}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}$$

وهو طاقة المستوى الارضي.

تعلمنا ان لكل قيمة لـ n هنالك n من القيم الممكنة لـ ℓ فمثلا عندما تكون $n=3$ فان $\ell = 0,1,2$ كذلك فان لكل قيمة لـ ℓ هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m فمثلا $m=-1,0,+1$ عندما تكون $\ell=1$ لذا يكون مستوى الطاقة لذرة الهيدروجين منحل بدرجة انحلال تساوي $g(n)=\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1}(2\ell+1)$ والتي تساوي n^2

Prove that $\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1}(2\ell+1)=n^2$ **واجب بيتي**

الزخم الزاوي **Angular momentum**

وفقا للميكانيك الكلاسيكي فان الزخم الزاوي لجسم حول نقطة الاصل يعطى بالعلاقة التالية

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$$

حيث $\vec{r}$ هو متجه الموضع ، $\vec{p}$ الزخم الخطي للجسيم. واذا كان الجسيم تحت تاثير طاقة كامنة متناظرة كرويا $V(r)$ فان الزخم الزاوي ثابت اي ان $\frac{d\vec{L}}{dt}=0$ والان ماهي صفات الزخم الزاوي لهذا الجسيم في الميكانيك الكمي ؟

الصفة الكمية لمؤثر الزخم الخطي هي

$$p=-i\hbar\nabla$$

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

وعليه فان

$$\hat{L}=-i\hbar\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

وهذا يعني ان مركبات مؤثر الزخم الزاوي تاخذ الصيغ الاتية

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$\hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$

$$\hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

ان انسب نوع من الاحداثيات لدراسة الزخم الزاوي بشكل خاص والحركة تحت تاثير القوة المركزية بشكل عام هي الاحداثيات القطبية الكروية.

باستخدام معادلات التحويل من الاحداثيات الكارتيزية الى الاحداثيات الكروية.

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

$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\,\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+(-\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\sin\theta\,\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\,\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}+(-\frac{1}{r})\,\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$$

ويمكن ايجاد مركبات الزخم الزاوي بالاحداثيات الكروية اذا ناخذ كل مركبة بصيفتها في الاحداثيات الكارتيزية ثم نجري التعويضات الازمة كما يلي

اولا $\hat{L}_x$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$=-i\hbar[\{r\sin\theta\sin\phi(\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta})\}-$$

$$\{r\cos\theta(\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})\}]$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar[r\sin\theta\sin\phi\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\sin\phi\sin^2\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$-r\cos\theta\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}-\cos^2\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}]$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi})$$

ثانيا L_y

$$\hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})$$

$$=-i\hbar[\{r\cos\theta(\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta})\}$$

$$-\{r\sin\theta\cos\phi(\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\,\frac{\partial}{\partial\theta})\}$$

$$=-i\hbar[r\cos\theta\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\cos^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$-r\sin\theta\cos\phi\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial r}+\sin^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}_y=i\hbar(\cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}-\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta})$$

ثالثا L_z

$$\hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

$$=-i\hbar[\{r\sin\theta\cos\phi\,(\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\,\cos\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$+\frac{1}{r}\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})-\{r\sin\theta\sin\phi\,(\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r}$$

$$+\frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi})\}]$$

$$= -i\hbar[\{r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial r} + \sin\theta\cos\phi\cos\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos^2\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$- r\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial r} - \cos\theta\cos\phi\sin\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \sin^2\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$\therefore$

$$\hat{L}_x = -i\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}) \qquad (35)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

ننتقل الان الى ايجاد $\hat{L}^2$ مربع الزخم الزاوي الكلي

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \qquad (36)$$

وبالتعويض عن قيم $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ من المعادلة 35 في المعادلة 36 ينتج

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2[(\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi})\ (\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$+ (\cot\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta})\ (\cot\theta\sin\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

$$\therefore\quad \hat{L}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \qquad (37)$$

لنعود الان الى دالة الموجة $\psi(r,\theta,\phi)$ التي تم ايجادها وهي

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\ Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$= R_{n\ell}\ N_\ell^m\ p_\ell^m(\cos\theta)\ e^{im\phi}$$

ولنؤثر عليها بالمؤثر $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$

$$\hat{L}_z\,\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\phi}\,[R_{n\ell}\,N_\ell^m\,p_\ell^m(\cos\theta)\,e^{im\phi}]$$

$$= -i\hbar\,R_{n\ell}\,N_\ell^m\,p_\ell^m(\cos\theta)\,\frac{d}{d\phi}\,e^{im\phi}$$

$$(-i\hbar)(im)[R_{n\ell}\,N_\ell^m\,p_\ell^m(\cos\theta)\,e^{im\phi}]$$

$$\hat{L}_z\,\psi = m\hbar\,\psi \qquad (38)$$

اي ان الدالة ψ هي قيمة ذاتية للمؤثر $\hat{L}_z$ وبقيمة ذاتية تساوي $m\hbar$. وبعبارة اخرى ان مركبة الزخم الزاوي في اتجاه z لجهد مركزي هي ثابت الحركة بقيمة تساوي $m\hbar$

ولنؤثر الان بـ $\hat{L}^2$ (مربع الزخم الزاوي) على دالة الموجة

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}\,Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

$$\hat{L}^2\psi_{n\ell m} = -\hbar^2\,[\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]\,\psi_{n\ell m}$$

$$= -\hbar^2\,[\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]\,R_{n\ell}\,Y_\ell^m$$

$$= -\hbar^2\,R_{n\ell}\,[\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\frac{\partial Y}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}]$$

وتبعا للمعادلة 8 فان الكمية داخل القوسين الكبيرين في هذه النتيجة تساوي $-\lambda Y$ اذن

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 R_{n\ell}(-\lambda Y)$$

$$= \lambda\hbar^2 R_{n\ell} Y$$

$$= \lambda\hbar^2\psi$$

وبالتعويض عن λ باكمية $\ell(\ell+1)$ يكون

$$\hat{L}^2\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)=\ell(\ell+1)\hbar^2\,\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) \qquad (39)$$

من المعادلة 39 ان الدالة $\psi_{n\ell m}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{L}^2$ وبقيمة ذاتية تساوي $\ell(\ell+1)\hbar^2$ لذا فان الزخم الزاوي لجسيم في جهد مركزي هو ثابت قيمة $\ell(\ell+1)\hbar^2$. او ان الزخم الزاوي للجسيم له قيمة مضبوطة تساوي $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ وله مركبة في الاتجاه z بقيمة مضبوطة ايضا تساوي $m\hbar$

مقارنة مع النظرية الكلاسيكية Comparison with classical theory

حركة جسيم مركزي الجهد في النظرية الكلاسيكية تبين ثبوت مربع الزخم الزاوي وكذلك مركباته في الاتجاهات الثلاثة اما في النظرية الكمية وجدنا $\hat{L}^2$ ، $\hat{L}_z$ ثابتتان بينما لم يكن $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ قيمتين معرفتين او ثابتتن لان الدالة ψ ليس بدالة ذاتية لاي من مؤثريها. اضافة الى ذلك فان اهم اسس النظرية الكمية هو مبدا اللادقة هذا المبدا اذا طبق على مركبات الزخم الزاوي سيكون بالشكل

$$\Delta\hat{L}_x\cdot\Delta\hat{L}_y\approx m\hbar$$

على فرض ان $\hat{L}_z$ثابت اي ان $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ في هذه الحالة لايمكن ان يثبتا انيا لان ذلك سيعني ان $\Delta\hat{L}_x=\Delta\hat{L}_y=0.$ اما النظرية الكلاسيكية فانها تتغاضى عن الكمية $m\hbar$ الضئيلة المقدار جدا وعندها يصبح بالفعل $\Delta\hat{L}_x$ ، $\Delta\hat{L}_y$ مساوي الى الصفر وهو مايقابل ثبوت كل منهما.

س 1) اذا علمت ان الدالة الموجية لذرة الهيدروجين هي $\psi = \dfrac{a^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{r}{a_\circ}}$

أ- اوجد $< \dfrac{1}{r} >$

ب- $< r >$ ، $< r^2 >$ واجب بيتي

<u>الجواب</u>

$$< \frac{1}{r} > = \int \psi^* \frac{1}{r} \psi \; d\tau$$

حيث ان $d\tau = r^2 \sin\theta \; dr \; d\theta \; d\phi$

وبعد التعويض عن دالة الموجة ψ وترتيب الحدود نحصل

$$< \frac{1}{r} > = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{a_\circ^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-r}{a_\circ}} \; \frac{1}{r} \frac{a_\circ^{\frac{-3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-r}{a_\circ}} \; r^2 \sin\theta \; dr \; d\theta \; d\phi$$

$$= \frac{a_\circ^{-3}}{\pi} \int_0^\infty e^{\frac{-2r}{a_\circ}} \; r \; dr \int_0^\pi \sin\theta \; d\theta \; \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \frac{a_\circ^{-3}}{\pi} \, 4\pi \int_0^\infty e^{\frac{-2r}{a_\circ}} \; r \; dr$$

وباستخدام التكامل $\int_0^\infty x^n \; e^{-ax} \; dx = \dfrac{n!}{a^{n+1}}$

$$\frac{a_\circ^{-3}}{\pi} \, 4\pi \, \frac{1}{(\frac{2}{a_\circ})^2} = \frac{1}{a_\circ}$$

س 2) اذا كانت دالة الموجة لاحد المستويات لذرة الهيدروجين هي

$$\psi(r,\theta,\phi) = A\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\, r^2 \sin\theta \cos\theta\, e^{i\phi}$$

1. استخدم $\hat{L}^2$ (مربع الزخم الزاوي) ، $\hat{L}_z$ (مركبة الزخم الزاوي في اتجاه z) اوجد قيم ℓ ، m ؟
2. باستخدام معادلة شرودنكر اوجد الطاقة E ؟

<u>الجواب</u>

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

وبما ان مربع الزخم الزاوي هو دالة لـ θ ، ϕ لذا فان المتغير r يعتبر ثابت لذا نفرض ان

$$\psi(r,\theta,\phi) = C\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

حيث ان $C = A\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\, r^2$

نؤثر المؤثر $\hat{L}^2$ على دالة الموجة ψ

$$\hat{L}^2\psi = -\hbar^2 [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]\psi$$

$$= -\hbar^2 C\, [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}]$$

$$= -\hbar^2 C\, [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta(\cos^2\theta\, e^{i\phi} - \sin^2\theta\, e^{i\phi}) + \frac{\sin\theta\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} e^{i\phi}]$$

وحيث ان $\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} e^{i\phi} = -e^{i\phi}$

$$= -\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(1-\sin^2\theta)\, e^{i\phi}) - \sin^2\theta\, e^{i\phi} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta} e^{i\phi}]$$

حيث عوضنا عن $\cos^2\theta = 1 - \sin^2\theta$

$$=-\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\, e^{i\phi}-2\sin^3\theta)\, e^{i\phi})-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[\frac{1}{\sin\theta}(\cos\theta\, e^{i\phi}-6\sin^2\theta\cos\theta\;\, e^{i\phi})-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}-6\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\, e^{i\phi}]$$

$$=-\hbar^2 C[-6\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}]$$

$$=6\hbar^2 C\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$=6\hbar^2\psi$$

وبما ان

$$\hat{L}^2\psi=\hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$

$$6\hbar^2\psi=\hbar^2\ell(\ell+1)\psi$$

$$6=\ell(\ell+1)\quad\Rightarrow\quad\ell=2$$

وبتاثير المؤثر $\hat{L}_z$ على دالة الموجة ψ

$$\hat{L}_z\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi}$$

$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\,A\,r^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$=-i\hbar\, Ar^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi}\, e^{i\phi}$$

$$=-i\hbar\, Ar^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}\,\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}(i)$$

$$=\hbar\psi$$

وبما ان

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar\psi$$

$$\therefore \quad \hbar\psi = m\hbar\psi \quad \Rightarrow \quad m = 1$$

ب. بما ان الطاقة تظهر فقط بمعادلة شرودنكر القطرية اذن نستخدم

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \{\frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{k}{r}) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\}R = 0$$

نفرض ان $\psi = R = \beta' r^2\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$ حيث ان $\beta' = \sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\phi}$

$$\frac{dR}{dr} = 2r\,\beta'\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{\beta' r^2}{3a_\circ}\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$r^2\frac{dR}{dr} = 2r^3\,\beta'\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{\beta' r^4}{3a_\circ}\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) = 6r^2\,\beta'\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{2r^3}{3a_\circ}\,\beta'\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}} - \frac{4}{3}\frac{\beta' r^3}{a_\circ}\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}} + \frac{\beta' r^4}{3a_\circ}\, e^{-\frac{r}{3a_\circ}}$$

$$= 6R - \frac{2}{3}\frac{r}{a_\circ}R - \frac{4r}{3a_\circ}R + \frac{r^2}{9a_\circ^2}R$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) = \frac{6R}{r^2} - \frac{2}{r\,a_\circ}R + \frac{1}{9a_\circ^2}R$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2mER}{\hbar^2} + \frac{2mk}{\hbar^2 r} - \frac{6}{r^2}R = 0$$

$$\frac{6R}{r^2} - \frac{2R}{a_\circ r} + \frac{R}{9a_\circ^2} + \frac{2mER}{\hbar^2} + \frac{2mk}{\hbar^2 r} - \frac{6R}{r^2} = 0$$

$$\frac{-2}{a_\circ} + \frac{2mk}{\hbar^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{a_\circ} = \frac{mk}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad a_\circ = \frac{\hbar^2}{mk}$$

$$\frac{1}{9a_\circ^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 \qquad E = \frac{-\hbar^2}{18a_\circ^2 m} = \frac{-\hbar^2}{18\cdot\frac{\hbar^4}{m^2k^2}\cdot m}$$

$$= -\frac{m\,e^4}{32\pi^2\varepsilon_\circ^2\hbar^2}\,\frac{1}{9}$$

حيث $k = \dfrac{e^2}{4\pi\,\varepsilon_\circ}$

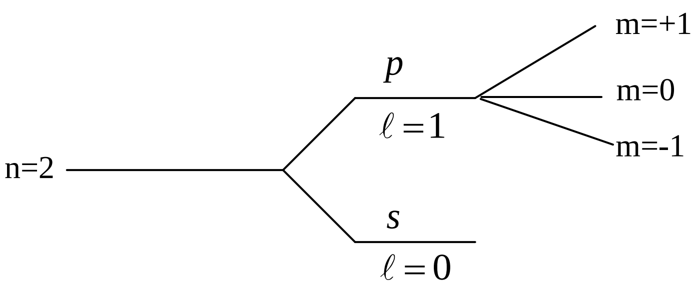
سبق ان بينا ان دالة الموجة ψ هي دالة ذاتية لمربع الزخم الزاوي وبقيمة ذاتية $\ell(\ell+1)\hbar^2$ لذلك فان الزخم الزاوي لجسيم يتحرك في جهد مركزي هو ثابت حركة قيمة هذا الزخم يمكن ان يحدد بدقة وهي تتخذ القيم $\ell = n-1 \Rightarrow \ell = 0$ ولذلك (في مجال كولوم لاي قيمة n تحدد مستوى الطاقة هنالك n من القيم المميزة للزخم الزاوي المداري. وكذلك بينا ان دالة الموجة ψ هي دالة ذاتية للمركبة z للزخم الزاوي وبقيمة ذاتية $m\hbar$ وهذا يعني ان اي جسيم يتحرك في نظام جهده مركزي فان المركبة z هي ثابت حركة وقيمتها $m\hbar$. ان قيم m تحدد

$$m = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \cdots\cdots\cdots 0, \cdots\cdots\cdots \ell$$

ان الحالات التي تتميز بعدد كمي مداري $\ell = 0$ وعدد كمي مغناطيسي $m = 0$ تسمى بحالات s اما الحالة p فهي تتميز بالعدد الكمي المداري $\ell = 1$ وبذلك ياخذ العدد الكمي المغناطيسي (هنالك $(2\ell+1)$ من القيم لـ m) القيم $m = -1, 0, 1$ ولهذا توجد ثلاث دوال منحلة وعموما يرمز للحالات ℓ بالرموز الطيفية الاتية

i	-	2	3	4
s	p	d	f	g

لناخذ مثال عندما $n = 2$



نلاحظ ان دوال الموجة هي ψ_{200} ، ψ_{21+1} ، ψ_{210} ، ψ_{21-1} اذن عدد الانحلال هو 4

ان قيمة m لايمكن ان تتعدى قيمة ℓ وهذا مطابق لواقع الحال اذ ان مركبة الزخم الزاوي $\hat{L}_z$ لايمكن ان تساوي تماما قيمة الزخم الزاوي الكلي لان:

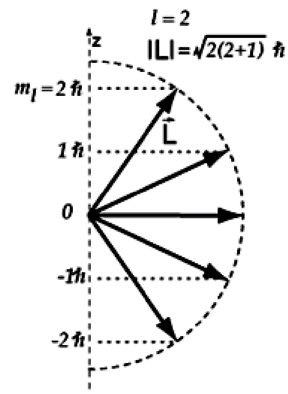
$$\hat{L} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$$

$$(\hat{L}_z)_{max} = \ell\hbar$$

ان المعادلتين الاخيرتين هما صيغة اخرى لمبدا الدقة فيما ان $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ لاتحقق خاصية التبادل فيما بينهما فمعنى ذلك اننا لانستطيع قياس هذه الكميات بدقة تامة في ان واحد

***H.w* Show that** $1)\ [\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z$ $\quad 2)\ [\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hbar\hat{L}_x$

$3)\ [\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y$



الشكل يبين تكميم الزخم الزاوي (الزخم الزاوي الكلي) ياخذ اتجاهات معينة فقط التي تلك التي تكون فيها مساقط على محور z اي المركبة $\hat{L}_z$ عبارة عن مضاعفات صحيحة للمقدار $\hbar$

***H.w* Show that** $1)\ [\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$ $\quad 2)\ [\hat{L}^2,\hat{L}_x]=0$ $\quad 3)\ [\hat{L}^2,\hat{L}_y]=0$

التفسير الفيزياوي للمعادلات اعلاه ان المؤثر $\hat{L}^2$ يتبادل مع جميع مركبات الزخم الزاوي اي يمكن ايجاد قيم مضبوطة وبنفس الوقت لـ $\hat{L}^2$

Prove that $[L_x\ ,\ L_y]=i\hbar L_z$

$$[L_x\ ,\ L_y]\psi=(L_xL_y-L_yL_x)\,\psi$$

$$\hat{L}_x=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\quad,\quad \hat{L}_y=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})\quad,\quad \hat{L}_z=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$$

$$[L_x\ ,\ L_y]\psi$$
$$=\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[\left((y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\cdot(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})\right)-\left((z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z})\cdot(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\right)\right]\psi$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[y \frac{\partial}{\partial z}(z\frac{\partial \psi}{\partial x}) - y\frac{\partial}{\partial z}(x\frac{\partial \psi}{\partial z}) - z\frac{\partial}{\partial y}(z\frac{\partial \psi}{\partial x}) + z\frac{\partial}{\partial y}(x\frac{\partial \psi}{\partial z}) \right.$$

$$\left. - z\frac{\partial}{\partial x}(y\frac{\partial \psi}{\partial z}) + z\frac{\partial}{\partial x}(z\frac{\partial \psi}{\partial y}) + x\frac{\partial}{\partial z}(y\frac{\partial \psi}{\partial z}) - x\frac{\partial}{\partial z}(z\frac{\partial \psi}{\partial y}) \right]$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[y\frac{\partial \psi}{\partial x} + yz\frac{\partial^2 \psi}{\partial z x} - yx\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y x} + zx\frac{\partial^2 \psi}{\partial y z} - zy\frac{\partial^2 \psi}{\partial x z} + z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x y} \right.$$

$$\left. + xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - x\frac{\partial \psi}{\partial y} - xz\frac{\partial^2 \psi}{\partial z y} \right]$$

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

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

$$= i\hbar L_z \psi$$

$$= i\hbar L_z$$

برم الإلكترون Electron Spin

كان نقاشنا للحالات الكمية للذرة الوحيدة الإلكترون محددا بأبسط نموذج ممكن مما جعل الحصول على حل للمسالة بدلالة دوال معروفة امرا سهلا نسبيا. غير أن الأمور تتعقد شيا فشيا عندما نحاول استخدام الميكانيك الكمي لتفسير ظواهر شائعة في التجارب المعروفة عن الأطياف ونخص بالذكر ظاهرة زيمان الشاذة التي قادت الى افتراض البرم الإلكتروني.

يتاثر الإلكترون كأي جسم مشحون اذا ادخل ضمن مجال مغناطيسي. فمثلا لمجال مغناطيسي متجانس شدته H_z وفي الاتجاه z فان طاقة التفاعل التي تدخل في معادلة شرودنكر كحد اضافي هي $\frac{e}{2m}L_z H_z$ حيث L_z هي مركبة الزخم الزاوي المداري للالكترون و $(-e)$ هي شحنة الالكترون و m هي كتلة الالكترون. ولتفسير هذه الطاقة نعطي للالكترون عزما مغناطيسيا من خلال العلاقة

$$\mu = -\frac{e}{2m}L \qquad (1)$$

ان تاثير حد طاقة التفاعل هو تزحزح في مستويات الطاقة الذري يؤدي الى تغير في الطيف الخطي عندما يتسلط مجال مغناطيسي خارجي على الذرة. لقد استطاعت النظرية الكلاسيكية في تفسير ما يسمى ظاهرة زيمان الاعتيادية والتي فيها يتفرق الطيف الى ثلاث ترددات في حين تصبح المسالة معقدة عندما يحصل ما يسمى بظاهرة زيمان الشاذة والتي لايمكن تفسيرها بالطريقة ذاتها لان خطوط الطيف تتفرق بشكل متعدد فجاء افتراض البرم الإلكتروني.

لقد افترض ان للالكترون برم σ وعزم مغناطيسي داخلي μ_s اما مقدار البرم فقد افترض انه يقابل اعدادا كمية بنصف وحدة لمربع البرم ولمركبتة في الاتجاه z. أي القيمة الذاتية الوحيدة الممكنة لمربع σ هي:

$$\sigma \cdot \sigma = \delta(\delta+1)\hbar^2 \qquad (2)$$

حيث $\delta = \frac{1}{2}$ أي ان

$$\sigma^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \qquad (3)$$

ولمركبة σ باي اتجاه مثل الاتجاه z هنالك قيمتين ذاتيتين ممكنتين :

$$\sigma_z = m_s \hbar \qquad (4)$$

حيث $m_s = \frac{1}{2}$ او $-\frac{1}{2}$ اما العزم المغناطيسي فيفترض انه يتناسب مع σ بثابت تناسب يساوي $-e/m$ أي ان

$$\mu_s = -\frac{e}{m}\,\sigma \qquad (5)$$

وعليه يكون

$$\mu_{s_z} = -\frac{e}{m}\,\sigma_z$$

واذا عوضنا عن σ_z بـــ $\pm\frac{1}{2}\hbar$ نحصل على

$$\mu_{s_z} = \pm\frac{e\hbar}{2m} \qquad (6)$$

حيث μ_{s_z} يسمى بمغنيطون بور Bohr magneton ويرمز له μ_B

ان برم الاكترون هي صفة كمية ليس لها نضير في الفيزياء الكلاسيكية لان البرم استنادا الى مبدا التقابل يصبح مهملا اذا اهمل ثابت بلانك. ان فكرة البرم تقترن ادخال متغيرات ثلاثة جديدة هي σ_x , σ_y , σ_z لتعريف مسقط البرم على المحاور الثلاثة , وكذلك مؤثرات ثلاثة مقابله هي $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ وطبيعي فان المتغيرات البرمية تتخذ لنفسها القيمتين المتميزتين $\pm\frac{1}{2}\hbar$ فقط. اضافة الى ذلك يجب ان يتصف كل مؤثر بالصفة التالية:

$$\hat{\sigma}_z S = \sigma_\circ S \qquad (7)$$

حيث المعادلة اعلاه هي معادلة قيمة ذاتية فيها $\sigma_\circ = \pm\frac{1}{2}\hbar$ عبارة عن القيمتين الذاتيتين. ودالتا الموجة المقابلتان للمتغير σ_z يرمز لهما $S_{\frac{1}{2}}$ و $S_{-\frac{1}{2}}$ هاتان الدالتان يجب ان تكونا مجموعة عيارية متعامدة كاملة للدوال الموجية البرمية بحيث ان اعتماد البرم على اية دالة يمكن التعبير عنه بالمزج الخطي.

$$S(\sigma_z) = aS_{\frac{1}{2}}(\sigma_z) + bS_{-\frac{1}{2}}(\sigma_z) \qquad (8)$$

وصفة العيارية والتعامد تاخذ هنا صيغة الجمع على القيمتين الممكنتين لـ σ_z

$$\sum_{\sigma_z=-\frac{1}{2}\hbar}^{+\frac{1}{2}\hbar} S^*{}_{m_s}(\sigma_z)\; S_{m_s'}(\sigma_z) = \sigma_{m_s\, m_s'} \qquad (9)$$

في نظرية باولي تمثل المعاملات a و b في المعادلة 8 بمصفوفة عمودية ثنائية هكذا:

$$S = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

ومؤثرات البرم $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ تمثل بالمصفوفات التالية

$$\hat{\sigma}_x = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\sigma}_y = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\sigma}_z = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \qquad (10)$$

هذه المصفوفات اذا اثرت على دالة الموجة فان

$$\hat{\sigma}_z S = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

$$= \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}a\\ -b\end{pmatrix}$$

ودوال الموجة هنا تساوي الى

$$S_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \quad , \quad S_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

وفي نظرية باولي فان المصفوفة الاجونية الهرميتية Hermitian Adjoint Matrix تلعب دور الدالة ψ^* في نظرية شرودنكر ونحصل على هذه المصفوفة باستبدال الصفوف بالاعمدة ثم استبدال كل عنصر في المصفوفة الناتجة بمرافقه المعقد فمثلا اذا كان $S = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$ فان $S^+ = \begin{pmatrix}a^* & b^*\end{pmatrix}$ هي المصفوفة الاجونية الهرميتية لـ S. مما تقدم يظهر حاصل ضرب مصفوفة عمودية في مصفوفتها الاجونية هي مصفوفة حقيقية لصف واحد وعمود واحد. يقابل التكامل $\int \psi^* \psi \, d\tau$ أي

$$S^+ S = \begin{pmatrix}a^* & b^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = a^* a + b^* b = 1$$

والقيمة المتوقعه لمتغيرات البرم تكتب على النحو التالي :

$$< \sigma_i > = S^+ \, \hat{\sigma}_i \, S \qquad (11)$$

اسئله

س1) جد القيمة المتوقعه لـ σ_z ؟

س2) افرض ان $S(\sigma_z)$ معلوم جد a و b

س3) جد مؤثر باولي لمربع البرم ومن ثم اثبت ان أي دالة برمية عيارية هي دالة ذاتية لـ $\hat{\sigma}\cdot\hat{\sigma}$ بقيمة ذاتية تساوي $\frac{3}{4}\hbar^2$

-References   - المصادر

- الميكانيك الكمي - د. جاسم الحسيني ، د. عبدالسلام عبد الامير
- اساسيات ميكانيك الكم – د. سالم حسن الشماع ، د. أمجد عبدالرازق كريجه
- مقدمة فى ميكانيك الكم - د. جاسم عبود ، د. ضياء احمد

- Fundamental University Physics, Alonson and Fin, Part 3.

- Introduction to Quantum Mechanics, Matthews.

- Quantum Mechanics, Powell and Grasmanu.

الفصل الرابع

المتذبذب التوافقي الخطي Linear Harmonic Oscillator

وفقا للنظرية الكلاسيكية فان المتذبذب التوافقي عبارة عن جسيم كتلته m يتحرك ذهابا وايابا حول موضع استقراره تحت تاثير القوة المعيدة Restoring Force اي ان

$$F=-kx$$

حيث ان k تمثل مقدار ثابت ويطلق عليه ثابت القوة، والاشارة السالبة تعني ان القوة تكون باتجاه معاكس لاتجاه الازاحة x. يمكن الحصول على معادلة الحركة من خلال قانون نيوتن الثاني:

$$F=m\ddot{x}$$

$$-kx=m\ddot{x}$$

$$m\ddot{x}+kx=0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x}+\frac{k}{m}x=0$$

$$\ddot{x}+\omega^2 x=0$$

حيث ان $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ التردد الزاوي ، ان معادلة الحركة اعلاه تقبل بنوعين من الحلول هما

$$x=a\cos\omega t$$

$$x=a\sin\omega t$$

وكلا الحلين يمثل حركة اهتزازية بتردد زاوي ω وسعة a

ويرتبط الجهد بالقوة بالعلاقة

$$F=-\frac{\partial V(x)}{\partial x}=-kx$$

وبعد اجراء عملية التكامل لهذه المعادلة نجد ان

$$V(x)=\tfrac{1}{2}k^2x^2=\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2$$

ان الطاقة الكلية للمتذبذب التوافقي يمكن ايجادها وكما يلي:

$$E = T + V(x)$$

$$= \tfrac{1}{2} m\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\therefore \quad E = \tfrac{1}{2} m\omega^2 a^2$$

من خلال الدراسة الكلاسيكية للمتذبذب التوافقي اعلاه يمكن ان نستنتج مايلي

1. The minimum energy of H.O. is zero.
2. The energy of H.O. has a continuous spectrum of values.
3. The probability density of finding the oscillating particle has an inverse proportionality with its speed.

1. الطاقة الدنيا للمتذبذب التوافقي تساوي صفر.
2. الطاقة للمتذبذب التوافقي لها طيف مستمر من القيم .
3. كثافة الاحتمالية للمتذبذب تتناسب مع السرعة.
4. لاتوجد حدود قصوى تفرض على الطاقة التي يمكن ان يتخذها المتذبذب التوافقي .

ان مسالة المتذبذب التوافقي من المسائل المهمة في ميكانيك الكم. حيث ترتبط هذه المسألة في تطبيقات عملية عديدة مثل اهتزاز جزيئات وذرات المواد الصلبة التي تقرب عادة من اهتزازات توافقية بسيطة وكذلك المجال الكهرومغناطيسي الذي يمكن اعتباره في تطبيقات كثيرة كعدد من الاهتزازات التوافقية البسيطة.

Quantum Theory Of Harmonic Oscillator النظريـــة الكميـــة للمتذبــذب التــوافقي

المؤثر الهاملتوني للمتذبذب التوافقي هو (The Hamiltonian of H.O is)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V(x)\psi_n = E_n\psi_n$$

نعوض عن $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi_n = E_n\psi_n$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left\{E_n - (\frac{1}{2}m\omega^2 x^2)\right\}\psi_n = 0$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + (\frac{2mE_n}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2)\psi_n = 0$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(\frac{2E_n}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar}x^2)\psi_n = 0$$

نفرض ان

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$$

and

$$\varepsilon_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} \qquad (1)$$

$$\therefore \quad \frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}(\varepsilon_n - y^2)\psi_n = 0$$

$$\frac{d}{dx}=\frac{d}{dy}\frac{dy}{dx}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dy}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}=\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\frac{d^2}{dy^2}$$

$$=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dy^2}$$

$$\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\frac{m\omega}{\hbar})(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0 \qquad \div\ \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}+(\varepsilon_n-y^2)\psi_n=0 \tag{2}$$

س / اثبت ان المتغيرات ε_n ، y هي متغيرات خالية من الوحدات

المعادلة (2) يمكن حلها بثلاث طرق هي :

1. طريقة شرودنكر او معالجة شرودنكر Schrödinger Treatment
2. طريقة المؤثرات Operator Treatment
3. طريقة المصفوفات Matrix Treatment

1. طريقة شرودنكر Schrödinger Treatment

في حالة $y\rightarrow\infty$ يمكن اهمال المقدار ε_n فالمعادلة (2) تصبح بالصيغة التالية

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2}-y^2\psi_n=0 \tag{3}$$

والان نجد الحل التقريبي للحالة التي تكون فيها y كبيرة فاذا فرضنا ان

$$\psi_n(y)=e^{cy^2}$$

$$\frac{d\psi_n}{dy} = 2cye^{cy^2}$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2} = 2ce^{cy^2} + 2cye^{cy^2} \cdot 2cy$$

$$= 2ce^{cy^2} + 4c^2y^2e^{cy^2}$$

وبالتعويض عن ψ_n ، $\frac{d^2\psi_n}{dy^2}$ في المعادلة (3) نحصل على

$$4c^2y^2e^{cy^2} + 2ce^{cy^2} - y^2e^{cy^2} = 0$$

وباهمال الحد الوسطي في المعادلة اعلاه لصغره نحصل على

$$(4c^2 - 1)y^2 e^{cy^2} = 0$$

$$\therefore \quad 4c^2 - 1 = 0$$

$$c = \pm\frac{1}{2}$$

$$\therefore \quad \psi_n(y) = e^{\pm\frac{1}{2}y^2}$$

ولما كانت دالة الموجة $\psi_n(y)$ يجب ان تقترب من الصفر عندما تقترب y من اللانهاية فان الحل $e^{+\frac{1}{2}y^2}$ يجب ان يهمل ونحتفظ بحل تقريبي واحد هو

$$\therefore \quad \psi_n(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad (4)$$

وهو يمثل حلا تقريبا وللقيم الكبيرة للمتغير y . واذا اردنا الحصول على الحل المظبوط فاننا نضرب الحل التقريبي للمعادلة (4) بدالة اعتباطية للمتغير y مثلا $F(y)$

$$\therefore \quad \psi_n(y) = F(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} \qquad (5)$$

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

$$\psi_n' = F'(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} - yF(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$\frac{d^2\psi_n(y)}{dy^2} = \psi_n''(y) = F''(y)e^{-\frac{y^2}{2}} - yF'(y)e^{-\frac{y^2}{2}} - F'(y)\,y\,e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$- F(y)\{(1)\cdot e^{-\frac{y^2}{2}} + y\,e^{-\frac{y^2}{2}}(-y)\}$$

$$\psi_n''(y) = F''(y)e^{-\frac{y^2}{2}} - 2yF'(y)e^{-\frac{y^2}{2}} - F(y)e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2F(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$$

وبتعويض العلاقة الاخيرة في المعادلة (2) نحصل

$$\{F''(y) - 2y\,F'(y) - F(y) + y^2F(y) + \varepsilon_n\,F(y) - y^2F(y)\}e^{-\frac{y^2}{2}} = 0$$

$$\therefore \quad F''(y) - 2y\,F'(y) + (\varepsilon_n - 1)\,F(y) = 0 \tag{6}$$

ان معادلة هيرمت التفاضلية من الدرجة n لها الصيغة الرياضية التالية:

$$H_n''(y) - 2y\,H_n'(y) + 2n\,H_n(y) = 0 \tag{7}$$

وحل هذه المعادلة يدعى بمتعددة حدود هيرمت Hermit Polynomial الصيغة الرياضية لهذا الحل

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

حيث ان $n = 0,1,2,3........$

بمقارنة العلاقتين (6) ، (7) نجد ان

$$F(y) = H_n(y)$$

$$\varepsilon_n - 1 = 2n$$

$$\therefore \quad \varepsilon_n = 2n + 1$$

اذن المعادلة (5) يمكن ان تكتب بالشكل التالي

$$\psi_n(y) = H_n(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

ولاجل ان تكون دالة الموجة للمتذبذب التوافقي معيرة نضربها بثابت مثل N_n اي ان

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2} \tag{8}$$

حيث سنجد قيمة ثابت المعايرة N_n لاحقا

المعادلة (8) الان يمكن كتابتها بالشكل التالي

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \tag{9}$$

حيث ان $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ ، $\alpha^2 x^2 = y^2$، هنا ω هو التردد الدائري الكلاسيكي و $H_n(\alpha x)$ هو كثيرة حدود هيرمت من الدرجة n

من معادلة (1)

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon_n$$

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

$$\therefore \quad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \tag{10}$$

ان المعادلة (9) تمثل الصيغة العامة لدوال الموجة الذاتية والتي تصف المتذبذب التوافقي والمعادلة (10) تمثل القيم الذاتية لطاقة المتذبذب التوافقي، حيث n هو العدد الكمي وياخذ الاعداد الصحيحة $n = 0,1,2,3\cdots\cdots$

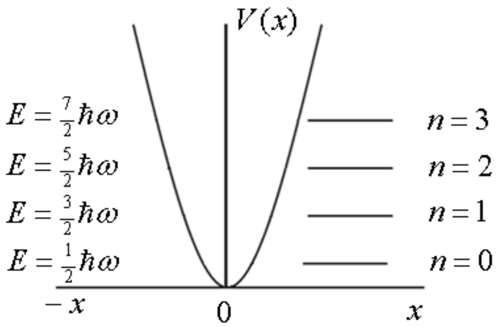
والمعادلة (10) تدلنا على ان طاقة المتذبذب التوافقي هي طاقة مكممة واقل قيمة لهذه الطاقة هي

$$E_\circ = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{(Zero Point Energy)}$$

التي تتميز بالعدد الكمي $n = 0$ والتي تسمى بطاقة نقطة الصفر وهي اقل طاقة يستطيع المتذبذب امتلاكها.

الشكل يمثل مستويات الطاقة وهي

متباعدة بمقادير متساوية كل منها $\hbar\omega$



س / جد $H_n(y)$ ، ε_n ، E_n لاول اربعة حالات من n

الحل:-

باستخدام العلاقات التالية

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

$$\varepsilon_n = 2n+1$$

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

n	$H_n(y)$	ε_n	E_n
0	1	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2y$	3	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4y^2-2$	5	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8y^3-12y$	7	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

Generating Function الدالة المولدة

الدالة الرياضية تدعى بالدالة المولدة

$$G(t,y)=e^{y^2-(t-y)}$$

$$G(t,y)=e^{-t^2+2ty} \tag{11}$$

و هي احدى اهم النظريات التي تتعلق بكثيرة حدود هيرمت وترتبط معها بالعلاقة

$$e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\ t^n}{n!} \tag{12}$$

ويمكن ان نثبت ان الطرف الايمن يساوي الطرف الايسر في المعادلة (12) وكما يلي

$$\text{R.H.S}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\ t^n}{n!}$$

$$=H_\circ(y)+\frac{H_1(y)\ t}{1!}+\frac{H_2(y)\ t^2}{2!}+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=1+2yt+(4y^2-2)\frac{t^2}{2}+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=1+2yt+(2y^2-1)t^2+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{a}$$

وباستخدام متسلسلة تايلر عند النقطة $(t=0)$ يمكن نشر الطرف الايسر

$$f(t)=f(0)+f'(0)\cdot t+\frac{f''(0)}{2!}\cdot t^2+\frac{f'''(0)}{3!}\cdot t^3+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$L.H.S=1+2yt+(2y^2-1)t^2+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{b}$$

من الملاحظ ان المعادلة (b) هي نفسها (a) اذن

L.H.S=R.H.S

الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي متعامدة وعيارية

The Wave Function of H.O are Orthonormal

لقد بينا في الفصل الثاني ان الدوال الموجية التي تحقق معادلة شرودنكر هي دوال وعيارية و متعامدة وقد عبرنا عن هذه الحقيقة من خلال المعادلة

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

حيث ان

$$\delta_{mn} = 0 \qquad m \neq n$$
$$= 1 \qquad n = m$$

وواضح ان في حالة المتذبذب التوافقي $\psi_m^* = \psi_m$ وباستخدام الدوال الموجية المعطاة في المعادلة (9) نحصل على

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

اذن في حالة $n \neq m$ تكون الدوال الموجية متعامدة

$$N_m N_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) \, dx = 0$$

اذن

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) \, dx = 0 \qquad (13)$$

وفي حالة $n = m$ تكون الدوال الموجية عيارية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) \, dx = N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_n{}^2(\alpha x) \, dx = 1$$

ايجاد ثابت التعيير N_n

لايجاد ثابت التعيير N_n نستخدم الشرط العياري

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\;dx = N_n^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}\,{H_n}^2(\alpha x)\,dx = 1$$

وعند تبديل المتغير x بالمتغير y حسب العلاقة $y=\alpha\,x$ وان $dy=\alpha dx$

$$\frac{N_n^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}\,{H_n}^2(y)\,dy = 1 \qquad \text{(a)}$$

ولايجاد هذا التكامل نستخدم تعريف الدالة المولدة كما يلي

$$g(t,y)=e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(y)\;t^n}{n!}$$

نضرب هذه الدالة في نفسها ثم بالمقدار e^{-y^2} ونكامل على الفضاء سنحصل:

$$\int_{-\infty}^{\infty}g(t,y)\,g(t,y)\,e^{-y^2}dy=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{t^n}{n!}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}H_n^2(y)\,dy$$

من الملاحظ ان التكامل في الطرف الايمن من العلاقة الاخيرة هو نفسه التكامل في المعادلة (a). الان نجد التكامل في الطرف الايسر وكما يلي

$$L.H.S=\int_{-\infty}^{\infty}g(t,y)\,g(t,y)\,e^{-y^2}dy$$

$$L.H.S=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-t^2+2ty}\cdot e^{-t^2+2ty}\,e^{-y^2}dy$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2t^2+4ty-y^2}\;dy=\int_{-\infty}^{\infty}e^{2t^2}e^{-2t^2}e^{-2t^2+4ty-y^2}\;dy$$

$$=e^{2t^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-4t^2+4ty-y^2}\;dy$$

$$=e^{2t^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(y-2t)^2}\ dy$$

ولحل التكامل اعلاه نفرض ان $y-2t=z$ ، $dy=dz$

$$L.H.S=e^{2t^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}\ dz$$

وقيمة التكامل $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}\ dz=\sqrt{\pi}$

$$=e^{2t^2}\sqrt{\pi}$$

وباستخدام متسلسلة تايلرلنشر الدالة e^{2t^2}

$$e^{2t^2}=1+2t^2+\frac{(2t^2)^2}{2!}+\frac{(2t^2)^3}{3!}+\cdots\cdots\cdots$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n(t^2)^n}{n!}$$

$$\therefore\quad L.H.S=\sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n t^{2n}}{n!}$$

$$R.H.S=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{t^n}{n!}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}H_n^2(y)\,dy$$

وبالرجوع الى المعادلة (a) نجد ان

$$R.H.S=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{t^n}{n!}\right)^2\cdot\frac{\alpha}{N_n^2}$$

$$\therefore\quad \sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n t^{2n}}{n!}\sqrt{\pi}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{2n}}{(n!)^2}\cdot\frac{\alpha}{N_n^2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{2n}}{(n!)^2}\cdot\frac{\alpha}{N_n^2}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n t^{2n}}{n!}\sqrt{\pi}=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{2n}}{(n!)^2}\left\{\frac{\alpha}{N_n^2}-2^n n!\sqrt{\pi}\right\}=0$$

$$\Rightarrow \quad N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \quad \psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$$

وفيما يلي ندرج في الجدول ادناه الدوال الذاتية العيارية والطاقة المقابلة لها لقيم $n = 0, 1, 2, 3$

n	$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$	$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$
0	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}}) \; e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}) \; 2(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 8\pi^{\frac{1}{4}}) \; (4\alpha^2 x^2 - 2) \; e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$(\alpha^{\frac{1}{2}} / 48\pi^{\frac{1}{4}}) \; (8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x) \; e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

على اننا نستطيع ايجاد $H_n(y)$ او $H_n(\alpha x)$ لاي قيمة لـ n من العلاقة التالية

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

بالاضافة الى ذلك فان $H_n(y)$ تخضع لعلاقات تفاضليه وتكاملية على درجة كبيرة من الفائدة منها

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) \; dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

نلاحظ انه اذا كان $n \neq m$ فان التكامل يصبح صفر وكما بينا سابقا واذا كان $n = m$ فان المعادلة تصبح

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n^2(y)\ dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \qquad (14)$$

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = H_n{}'(y) = 2nH_{n-1}(y) \qquad (15)$$

$$2yH_n(y) = H_{n+1}(y) + 2nH_{n-1}(y) \qquad (16)$$

$$H_n{}''(y) - 2yH_n{}'(y) + 2nH_n(y) = 0 \qquad (7)$$

مقارنة النظرية الكلاسيكية مع النظرية الكمية
Comparison of classical theory with quantum theory

تختلف النتائج التي حصلنا عليها عن نتائج النظرية الكلاسيكية فيما يلي

1. طاقة الحالة الدنيا لاتساوي صفر واقل قيمة للطاقة يمكن ان يتخذها المتذبذب هي $\frac{1}{2}\hbar\omega$.
2. مستويات الطاقة غير متصلة بل متقطعة (Discrete).
3. في النظرية الكلاسيكية تتناسب كثافة الاحتمالية عكسيا مع الانطلاق اما النظرية الكمية فانها تعطي بالكمية $|\psi_n(x)|^2$ وبدون شك فهي تعطي تصرف مختلفا عن تصرف المتذبذب الكلاسيكي.

واجب بيتي ***H.W***

Prove that:

1. $\dfrac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y)$

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

3. $y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$

4. $\dfrac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$

5. $\dfrac{1}{\sqrt{2}}(y + \dfrac{d}{dy})\ \psi_n(y) = \sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$

6. $\dfrac{1}{\sqrt{2}}(y - \dfrac{d}{dy})\ \psi_n(y) = \sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

7. استخدم شرط المعايرة وتعريف الدالة المولدة اثبت ان

a) $N_n = (2^n n!\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$

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

8. جد H_0 ، H_1 ، H_2 ، H_3

9. برهن ان الدوال الموجية التالية هي دوال متعامده وعيارية

$$\psi_0(x) = (\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_1(x) = (\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha x)\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

10. جد $\Delta x \Delta p$ مستخدما $\psi_0(x)$ في السؤال التاسع

11.

1. **Prove that** $\dfrac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y)$

Solution:

باستخدام الدالة المولدة

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

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة بالنسية الى y

$$\frac{\partial g}{\partial y} = 2t\ e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!}$$

حيث ان $H'_n(y) = \dfrac{dH_n(y)}{dy}$

$$2t\ e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(y)\ t^{n+1}}{n!}$$

وعليه فان

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(y)\ t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!}$$

وبمساواة معاملات t^n في طرفي هذه العلاقة

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n!} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(y)\ t^n}{n(n-1)!} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{(n-1)!} \left\{ 2H_{n-1}(y) - \frac{H'_n(y)}{n} \right\} = 0$$

$$2H_{n-1}(y) - \frac{H'_n(y)}{n} = 0$$

$$\therefore \quad H'_n(y) = 2nH_{n-1}(y)$$ وهو المطلوب

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

Solution:

باستخدام الدالة المولدة

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

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة بالنسبة الى t

$$\frac{\partial g}{\partial y}=(-2t+2y)\ e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{nH_n(y)\ t^{n-1}}{n!}$$

$$(-2t+2y)\ e^{-t^2+2ty}=2y\ e^{-t^2+2ty}-2t\ e^{-t^2+2ty}$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2yH_n(y)\ t^n}{n!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_n(y)\ t^{n+1}}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}2y\frac{H_n(y)\ t^n}{n!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_n(y)\ t^{n+1}}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{nH_n(y)\ t^{n-1}}{n!}$$

وبمساواة معاملات t^n في طرفي العلاقة

$$\sum_{n=0}^{\infty}2y\frac{H_n(y)\ t^n}{n!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(n+1)H_{n+1}(y)\ t^n}{(n+1)!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2yH_n(y)\ t^n}{n(n-1)!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(n+1)H_{n+1}(y)\ t^n}{(n+1)n(n-1)!}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2yH_n(y)\ t^n}{n(n-1)!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2H_{n-1}(y)\ t^n}{(n-1)!}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{n+1}(y)\ t^n}{n(n-1)!}=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{(n-1)!}\left\{\frac{2yH_n(y)}{n}-2H_{n-1}(y)-\frac{H_{n+1}(y)}{n}\right\}=0$$

$$\frac{2yH_n(y)}{n}-2H_{n-1}(y)-\frac{H_{n+1}(y)}{n}=0$$

نضرب في $\frac{n}{2}$ والترتيب نحصل على

$\therefore\quad yH_n(y)=\frac{1}{2}H_{n+1}(y)+nH_{n-1}(y)$ وهو المطلوب

3. **Prove that:** $H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$

Solution:

باستخدام المعادلة

$$H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y) \qquad \text{(a)}$$

$$H_{n+1}'(y) = 2(n+1)H_n(y)$$

$$H_{n+1}'(y) = 2nH_n(y) + 2H_n(y) \qquad \text{(b)}$$

باخذ المشتقة الجزئية لطرفي المعادلة (a) ينتج

$$H_n''(y) = 2nH_{n-1}'(y) \qquad \text{(c)}$$

وباستخدام المعادلة

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

وباخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

$$yH_n'(y) + H_n(y) = \tfrac{1}{2}H_{n+1}'(y) + nH_{n-1}'(y)$$

وبالتعويض عن b ، c في المعادلة اعلاه ينتج

$$yH_n'(y) + H_n(y) = \tfrac{1}{2}(2nH_n(y) + 2H_n(y)) + \frac{H_n''(y)}{2}$$

$$yH_n'(y) + H_n(y) = nH_n(y) + H_n(y) + \frac{H_n''(y)}{2}$$

نضرب في 2 ونرتب نحصل على

$$H_n''(y) - 2yH_n'(y) + 2nH_n(y) = 0$$ وهو المطلوب

4. **Prove that:** $y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$

Solution:

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

نضرب طرفي المعادلة في y

$$y\ \psi_n(y) = N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2}\ y\ H_n(y)$$

باستخدام المعادلة

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

$$y\ \psi_n(y) = N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2}\left\{nH_{n-1}(y) + \tfrac{1}{2}H_{n+1}(y)\right\}$$

وبالتعويض عن قيمة $N_n = \dfrac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}$

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

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

$\therefore\quad y\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$ وهو المطلوب

5. **Prove that:** $$\frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$$

Solution:

$$\psi_n(y) = N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y)$$

باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ y

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

$$= -yN_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + N_n\ e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n'(y)$$

باستخدام المعادلة

$$H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

$$= -y\ N_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_n(y) + 2nN_n e^{-\frac{1}{2}y^2} H_{n-1}(y)$$

وبالتعويض عن قيمة N_n

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

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

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

$$\therefore\quad \frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y)$$ وهو المطلوب

6. **Prove that:** $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$

Solution:

باستخدام المعادلة

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

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

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

$\therefore\quad \hat{a}\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$ وهو المطلوب

يسمى المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$ بالمؤثر الخافض Destruction Operator ويرمز له بالرمز $\hat{a}$ اي ان

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$$

ويسمى المؤثر $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})$ بالمؤثر الرافع Creation Operator ويرمز له بالرمز $\hat{a}^+$ اي ان

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

7. **Prove that:** $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

or $\hat{a}^+\ \psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$

<u>Solution:</u>

باستخدام المعادلات

$$y\psi_n=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y)+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\ \psi_{n-1}(y) \qquad \text{(b)}$$

من معادلة (a)

$$\psi_{n-1}(y)=\sqrt{\tfrac{2}{n}}\left\{y\ \psi_n(y)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)\right\} \qquad \text{(c)}$$

وبالتعويض عن قيمة c اي $\psi_{n-1}(y)$ في معادلة (b) ينتج

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+\sqrt{2n}\left\{\sqrt{\tfrac{2}{n}}(y\psi_n(y)-\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(y))\right\}$$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy}=-y\psi_n(y)+2y\psi_n(y)-2\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(y)$$

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

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

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

$\therefore \quad \hat{a}^+\psi_n(y)=\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(y)$ وهو المطلوب

س / برهن ان القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة للمتذبذب التوافقي لحالة ذاتية للطاقة هي

$$< V(x) >= \tfrac{1}{2}(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$= \tfrac{1}{2} E_n$$

Solution:

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y) \qquad \text{(a)}$$

بضرب في $\psi_{n+1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\psi_{n+1}(y)\ dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة وعيارية اي ان

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy = 0$$

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \qquad \text{(b)}$$

وبضرب في $\psi_{n-1}(y)$ في طرفي المعادلة (a) ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\psi_{n+1}(y)\ dy \qquad \therefore$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \qquad \text{(c)}$$

القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة تساوي

$$< V(x) >= \tfrac{1}{2} m\omega^2 < x^2 >$$

$$= \frac{1}{2} m\omega^2 < \frac{y^2}{\alpha^2} >$$

$$=\frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2}< y^2 >$$

وبضرب طرفي المعادلة (a) في $y\ \psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ y^2\psi_n(y)\ dy=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n-1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{n+1}(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy$$

وبالتعويض عن (b) ، (c) في المعادلة الاخيرة ينتج

$$< y^2 >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\ y^2\psi_n(y)\ dy=\sqrt{\tfrac{n}{2}}\cdot\sqrt{\tfrac{n}{2}}+\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\cdot\sqrt{\tfrac{n+1}{2}}$$

$$< y^2 >=\frac{n}{2}+\frac{n+1}{2}=n+\frac{1}{2}$$

$$\therefore\quad < V(x) >=\frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2}< y^2 >$$

$$< V(x) >=\frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2}(n+\frac{1}{2})$$

$$\because\quad \alpha^2=\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$< V(x) >=\frac{1}{2}\frac{m\omega^2}{m\omega}\hbar\ \ (n+\frac{1}{2})$$

$$=\frac{1}{2}\hbar\omega\ (n+\frac{1}{2})$$

$$=\frac{1}{2}E_n$$ وهو المطلوب

تكاملات مفيدة: **اولا**

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = 0 \qquad (n \text{ odd})$$

اذا كانت n فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

Example: 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \ e^{-ax^2} dx = 0$$

Example: 2

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = 0$$

ثانيا

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

وباخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ (a) نحصل على

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

وباجراء نفس العمل اي باخذ المشتقة لطرفي المعادلة اعلاه بالنسبة لـ (a) نحصل على

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$$

س9 : برهن ان الدوال الموجية التالية هي دوال متعامدة وعيارية

$$\psi_0 = (\alpha^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{1}{4}})\ e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_1 = (\alpha^{\frac{1}{2}} / 2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}})\ 2(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

لقد بينا في الفصل الثاني ان مجموعة من الدوال التي تحقق المعادلة

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

تسمى مجموعة من الدوال العيارية المتعامدة Orthonormal Set of Function

$\delta_{mn} = 1$ at $m = n$ تكون عيارية اذا

$\delta_{mn} = 0$ at $m \neq n$ تكون متعامدة اذا

اولا

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_1(x)\ dx = \frac{2\alpha^2}{2^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x\ e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0$$

من الملاحظ ان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر اذن الدوال متعامدة

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_1(x)\ dx = 0$$

ثانيا

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\ \psi_0(x)\ dx = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} = 1$$

اذن الدوال عيارية

اخيرا

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\ \psi_1(x)\ dx = \frac{4\alpha^3}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3} = 1$$

اذن الدوال عيارية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\ \psi_1(x)\ dx = 1$$

وهو المطلوب

س 10: جد $\Delta x \Delta p$ مستخدما $\psi_0(x)$ في السؤال التاسع

<u>Solution:</u>

التفاوت (Variance) في الموضع Δx هو

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta x = \left(<x^2> - <x>^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

التفاوت في الزخم Δp_x هو

$$(\Delta p_x)^2 = <p_x^2> - <p_x>^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta p_x = \left(<p_x^2> - <p_x>^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

اذن يجب عبينا ايجاد كل من $<x>^2$ ، $<x^2>$ ، $<p_x>^2$ ، $<p_x^2>$ وبعد ذلك ايجاد $\Delta x \Delta p$

اولا ايجاد $<x>$

$$<x> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \ \hat{x} \ \psi_0(x) \ dx$$
$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} x \ dx$$
$$= 0$$

لان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

$$<x> = 0 \quad \Rightarrow \quad <x>^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $<x^2>$

$$<x^2> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \ \hat{x}^2 \ \psi_0(x) \ dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha^2}$$

$$\Delta x = \left(<x^2> - <x>^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=(\frac{1}{2}\frac{1}{\alpha^2}-0)^{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha}$$

ثالثا ايجاد $< p_x >$

$$< p >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\ \ \hat{p}_x\ \psi_0(x)\ \ dx$$

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

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ dx$$

$$=\frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \frac{\partial}{\partial x}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ dx$$

$$=\frac{-i\hbar\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}(-\alpha^2x)\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ dx$$

$$=\frac{i\hbar\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x\ e^{-\alpha^2x^2}dx$$

لان الدالة فردية فقيمة التكامل يساوي صفر

$$\therefore\ \ < p_x >= 0\qquad\Rightarrow\qquad < p_x >^2=0$$

رابعا ايجاد $< p_x^2 >$

$$< p_x^2 >=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)\ \ \hat{p}_x^2\ \psi_0(x)\ \ dx$$

بما ان $\hat{p}_x^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})\ \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ dx$$

$$=\frac{-\alpha\ \hbar^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}\ dx$$

ايجاد $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}$

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

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

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

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

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

$$\therefore\quad =\frac{-\alpha\ \hbar^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}(-\alpha^2\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}+\alpha^4x^2\ e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}})\ dx$$

$$=\frac{\alpha^3\hbar^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2x^2}dx-\frac{\alpha^5\hbar^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{\alpha^3\hbar^2}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}-\frac{\alpha^5\hbar^2}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3}$$

$$=\alpha^2\hbar^2-\frac{1}{2}\alpha^2\hbar^2$$

`

$$=\frac{1}{2}\alpha^2\hbar^2$$

$$\Delta p_x=\left(< p_x^2 > - < p_x >^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$=\left(\frac{1}{2}\alpha^2\hbar^2-0\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \hbar$$

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \hbar \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\alpha}$$

$\therefore \quad \Delta p_x \Delta x = \frac{1}{2} \hbar$ وهو المطلوب

Q) Using the uncertainty relation $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ estimate the energy ground state of harmonic oscillator

استخدم مبدا الادقة $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ خمن طاقة الحالة الارضية للمتذبذب التوافقي

Solution:

(The Hamiltonian of H.O is) ان هاملتوني المتذبذب التوافقي هو

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

(The expectation value of energy is) القيمة المتوقعة للطاقة هي

$$\langle H \rangle = E = \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} < x^2 >$$

$$\because \quad (\Delta p)^2 = < p^2 > - < p >^2 \qquad , \qquad (\Delta x)^2 = < x^2 > - < x >^2$$

ويمكن اثبات بان للمتذبذب التوافقي $< p > = < x > = 0$ وكما يلي

اولا ايجاد $< x >$ (القيمة المتوقعة للموضع)

باستخدام المعادلة

$$y\psi_n(y) = \sqrt{\tfrac{n}{2}}\ \psi_{n-1}(y) + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}(y)$$

بضرب المعادلة اعلاه في $\psi_n(y)$ ونكامل على الفضاء ينتج

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = \sqrt{\tfrac{n}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \psi_{n-1}(y)\ dy + \sqrt{\tfrac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ \psi_{n+1}(y)\ dy$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة اذن

$$< y > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)\ y\ \psi_n(y)\ dy = 0 \qquad \Rightarrow \qquad < y >^2 = 0$$

$$\therefore \; <x>^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $<p>$ (القيمة المتوقعة للزخم)

$$<p> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; \hat{p} \; \psi_n(y) \; dy = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; (-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}) \;\; \psi_n(y) \; dy$$

باستخدام المعادلة التالية لايجاد $\frac{\partial \psi_n}{\partial y}$

$$\frac{d\psi_n(y)}{dy} = -y\psi_n(y) + \sqrt{2n} \;\; \psi_{n-1}(y)$$

$$<p> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y)(-i\hbar)\{-y\psi_n(y) + \sqrt{2n} \;\; \psi_{n-1}(y)\} \; dy$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \; y \;\; \psi_n(y) \; dy - i\hbar\sqrt{2n} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(y) \;\; \psi_{n-1}(y) \; dy$$

$$= 0 \quad \Rightarrow \quad <p>^2 = 0$$

$$(\Delta p)^2 = <p^2> - 0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta p)^2 = <p^2>$$

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - 0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta x)^2 = <x^2>$$

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x}$$

$$\therefore \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

$$E = \frac{<p^2>}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} <x^2>$$

بتعويض عن $<x^2>$ ، $<p^2>$

$$E=\frac{(\Delta p)^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

لدينا $(\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$ وبالتعويض بالمعادلة اعلاه ينتج

$$E=\frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2$$

ولايجاد اقل قيمة للطاقة نفاضل العلاقة الاخيرة وجعلها تساوي صفر

$$\frac{dE}{d(\Delta x)}=-\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3}+m\omega^2(\Delta x)=0$$

$$\therefore \quad (\Delta x)^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$$

وبالتعويض عن $(\Delta x)^2$ لايجاد الطاقة

$$E=\frac{\hbar^2}{8m\cdot(\Delta x)^2}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2=\frac{\hbar}{8m\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)}+\frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$=\frac{1}{4}\hbar\omega+\frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\therefore \quad E=\frac{1}{2}\hbar\omega$$ وهو المطلوب

س / برهن اذا كانت n زوجية فان $H_n(-y)=H_n(y)$ واذا كانت n فردية فان $H_n(-y)=-H_n(y)$

البرهان

باستخدام المعادلة

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

When n even =2

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

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

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

$$=e^{y^2}\left\{(-2y)\cdot(-2y)e^{-y^2}-2e^{-y^2})\right\}$$

$$=4y^2-2$$

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

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

When n odd=1

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

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

$\therefore$ وهو المطلوب dod n When $H_n(-y)=-H_n(y)$

Q) Verify the operator equation

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

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

Solution:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

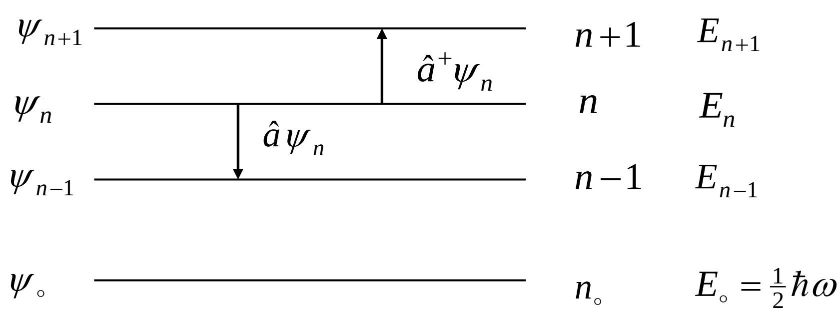
Creation and destruction operator المؤثرات الرافعة والخافضة

From the following equation

1. $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$ (1)

2. $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})\ \psi_n(y)=\sqrt{n+}\ \psi_{n+1}(y)$ (2)

One can see that the effect of the operator $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$ on the function $\psi_n(y)$ it will turn it to the wave function that describe the first lower state on the state (n) ; while the effect of the $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})$ on same function $\psi_n(y)$ is to turn it to the wave function that describe the first upper state of the state (n) ; for these reasons the operator $\frac{1}{\sqrt{2}}(y+\frac{d}{dy})$ is called destruction operator and the operator $\frac{1}{\sqrt{2}}(y-\frac{d}{dy})$ is called creation operator and denoted by $\hat{a}$ and $\hat{a}^+$ respectively



Prove that:

1. $\hat{a} = (2m\omega\ \hbar)^{-\frac{1}{2}}(m\omega\ \hat{x} + i\hat{p}_x)$ (3)

2. $\hat{a}^{+} = (2m\omega\ \hbar)^{-\frac{1}{2}}(m\omega\ \hat{x} - i\hat{p}_x)$ (4)

3. $\left[\hat{a}, \hat{a}^{+}\right] = 1$ (5)

4. $\left.\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega(\hat{a}^{+}\hat{a} + \tfrac{1}{2}) \\ \hat{H} &= \hbar\omega(\hat{a}\ \hat{a}^{+} - \tfrac{1}{2}) \end{aligned}\right\}$ (6)

5. $\hat{x} = \left(\dfrac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a} + \hat{a}^{+})$ (7)

6. $\hat{p}_x = -i\left(\dfrac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^{+})$ (8)

7. $\left[\hat{a}\ ,\ \hat{H}\right] = \hbar\omega\hat{a}$ (9)

8. $\left[\hat{a}^{+}, \hat{H}\right] = -\hbar\omega\hat{a}^{+}$ (10)

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

Solution:

باستخدام المعادلة

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(y + \frac{d}{dy})$$

$$\because \quad y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad , \quad \frac{d}{dy} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}$$

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

$$\hat{a} = (\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx})$$

$$p_x = -i\hbar\frac{d}{dx} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d}{dx} = \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\frac{i}{\hbar}\hat{p}_x)$$

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

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

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

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

Solution:

باستخدام المعادلة

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

$$\because \quad y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} \quad , \quad \frac{d}{dy} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}$$

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

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

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

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\frac{i}{\hbar}\hat{p}_x)$$

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

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

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

Prove that: $\hat{H} = (\hat{a}^+ \hat{a} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$

<u>Solution:</u>

$$\because \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega}{2}\hat{x}^2$$

باستخدام المعادلات

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

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

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

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

نضرب طرفي المعادلة في $\hbar\omega$

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

وبما اثبتنا سابقا بان $[\hat{x}, \hat{p}_x] = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = i\hbar$

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

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

$\therefore \quad (\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega = \hat{H}$ وهو المطلوب

وبنفس الطريقة يمكن ان نبرهن على ان $(\hat{a}\ \hat{a}^+ - \tfrac{1}{2})\hbar\omega = \hat{H}$

Prove that: $\left[\hat{a}\ ,\ \hat{a}^{+}\right]=1$

Solution:

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

نضرب طرفي المعادلة بـ ψ

$$\left[\hat{a}\ ,\ \hat{a}^{+}\right]\psi_n=(\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a})\psi_n$$

$$=\hat{a}\hat{a}^{+}\psi_n-\hat{a}^{+}\hat{a}\psi_n$$

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

$$=\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\ \psi_n-\sqrt{n}\sqrt{n}\ \psi_n$$

$$=(n+1-n)\ \psi_n$$

$$=\psi_n$$

$\therefore$ $\left[\hat{a}\ ,\ \hat{a}^{+}\right]=1$ وهو المطلوب

Prove that: $\hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^{+})$

باستخدام المعادلات

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

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

بالجمع ينتج

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

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

بالضرب في $(2m\omega\hbar)^{\frac{1}{2}}$

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

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

$$\therefore \quad \hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^{+})$$ وهو المطلوب

Prove that: $\hat{p}_x = -i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$

باستخدام المعادلات

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

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

بالطرح ينتج

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

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

بالضرب في $(2m\omega\ \hbar)^{\frac{1}{2}}$ ينتج

$$\therefore \quad \hat{p}_x = -i\left(\frac{m\omega\ \hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$$ وهو المطلوب

Prove that: $\left[\hat{a}\ ,\ \hat{H}\right] = \hbar\omega\ \hat{a}$

<u>Solution:</u>

$$\left[\hat{a}\ ,\ \hat{H}\right] = (\hat{a}\hat{H} - \hat{H}\hat{a})$$

باستخدام المعادلة

$$\hat{H} = (\hat{a}^{+}\hat{a} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\left[\hat{a}\ ,\ \hat{H}\right] = \hat{a}\ \ (\hat{a}^{+}\hat{a} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega - (\hat{a}^{+}\hat{a} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\ \hat{a}$$

$$= \hat{a}\ \hat{a}^{+}\hat{a}\ \hbar\omega + \tfrac{1}{2}\hat{a}\ \hbar\omega - \hat{a}^{+}\hat{a}\ \hat{a}\ \hbar\omega - \tfrac{1}{2}\hbar\omega\ \hat{a}$$

$$= \hat{a}\ \hat{a}^{+}\hat{a}\ \hbar\omega - \hat{a}^{+}\hat{a}\ \hat{a}\ \hbar\omega$$

$$= (\hat{a}\ \hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a})\hbar\omega\ \hat{a}$$

$$\because \quad (\hat{a}\ \hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a}) = \left[\hat{a}\ ,\ \hat{a}^{+}\right] = 1$$

$\therefore \quad \left[\hat{a}\ ,\ \hat{H}\right] = \hbar\omega\ \hat{a}$ وهو المطلوب

Operator Treatment　　　2) المعالجة بطريقة المؤثرات

من معادلة (2)

$$\frac{d^2\psi_n}{dy^2} + (\varepsilon_n - y^2)\psi_n = 0$$

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

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

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

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

$$\left[(\frac{d}{dy} - y)(\frac{d}{dy} + y) - 1\right]\ \psi_n(y) = -\varepsilon\psi_n(y)$$

$$\because \quad \varepsilon = \frac{2E_n}{\hbar\omega}$$

$$\left[(\frac{d}{dy} - y)(\frac{d}{dy} + y) - 1\right]\ \psi_n(y) = \frac{-2E_n}{\hbar\omega}\psi_n(y)$$

نضرب طرفي المعادلة في $\frac{\hbar\omega}{2}$

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left[(\frac{d}{dy} - y)(\frac{d}{dy} + y) - 1\right]\ \psi_n(y) = -E_n\psi_n(y)$$

$$2 = \sqrt{2}\cdot\sqrt{2}$$

$$\hbar\omega\ \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{dy} - y)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{dy} + y) - \frac{1}{2}\right]\ \psi_n(y) = -E_n\psi_n(y)$$

$$\because \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(y + \frac{d}{dy})$$

$$\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(y - \frac{d}{dy}) \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^{+} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{dy} - y)$$

$$\hbar\omega \ (-\hat{a}^{+}\hat{a} - \frac{1}{2}) \ \psi_n(y) = -E_n\psi_n(y)$$

نضرب في -1

$$\hbar\omega \ (\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}) \ \psi_n(y) = E_n\psi_n(y) \qquad (11)$$

باستخدام المتطابقة

$$\left[\hat{a} \ , \ \hat{a}^{+}\right] = 1 \quad \Rightarrow \quad (\hat{a} \ \hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a}) = 1$$

$$\hbar\omega\{(\hat{a} \ \hat{a}^{+} - 1) + \frac{1}{2}\} \ \psi_n(y) = E_n\psi_n(y)$$

نضرب المعادلة $\hat{a}^{+}$ من اليسار

$$\hbar\omega \ \hat{a}^{+}\{(\hat{a} \ \hat{a}^{+} - 1) + \frac{1}{2}\} \ \psi_n(y) = E_n \ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega \ (\hat{a}^{+}\hat{a} \ \hat{a}^{+} - \frac{1}{2}\hat{a}^{+}) \ \psi_n(y) = E_n \ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

وباخراج $\hat{a}^{+}$ من القوس من اليمين

$$\hbar\omega \ (\hat{a}^{+}\hat{a} - \frac{1}{2}) \ \hat{a}^{+}\psi_n(y) = E_n \ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

نضيف ونطرح 1 للقوس $(\hat{a}^{+}\hat{a} - \frac{1}{2})$ فتصبح

$$\hbar\omega \ (\hat{a}^{+}\hat{a} - \frac{1}{2} + 1 - 1) \ \hat{a}^{+}\psi_n(y) = E_n \ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega \ (\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2} - 1) \ \hat{a}^{+}\psi_n(y) = E_n \ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

بالترتيب

$$\hbar\omega\ (\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)-\hbar\omega\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)=E_n\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega\ (\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)=E_n\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)+\hbar\omega\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega\ (\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)=(E_n+\hbar\omega)\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)$$

$$\because\quad \hat{H}=\hbar\omega\ (\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})$$

$$\therefore\quad \hat{H}\ \hat{a}^{+}\psi_n(y)=(E_n+\hbar\omega)\ \hat{a}^{+}\psi_n(y) \qquad (\blacklozenge)$$

نفرض ان $\hat{a}^{+}\psi_n(y)=\phi_m$

$$\hat{H}\ \phi_m=(E_n+\hbar\omega)\ \phi_m \qquad n\neq m \qquad (12)$$

هذه هي معادلة شرودنكر ولكن بصيغة اخرى وهي تنص على ان دالة الموجة ψ_n اذا كانت دالة ذاتية للمؤثر الهملتوني بقيمة ذاتية E_n فان $\phi_m=\hat{a}^{+}\psi_n$ هي دالة جديدة للمؤثر $\hat{H}$ وبقيمة ذاتية مقدارها $(E_n+\hbar\omega)$ وباستخدام الرمز $E_{n+1}=E_n+\hbar\omega$ وذلك لان $\hbar\omega$ هو فرق الطاقة بين اي مستويين كميين متتالين اذا فان E_n هو مقدار الطاقة في المستوى n، $E_n+\hbar\omega$ هو مقدار الطاقة في المستوى $n+1$

من تعريف المؤثر الرافع

$$\hat{a}^{+}\psi_n(y)=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}(y)$$

وبالتعويض بالمعادلة $(\blacklozenge)$

$$\hat{H}\ \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(y)=E_{n+1}\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(y)$$

$$\hat{H}\ \psi_{n+1}(y)=E_{n+1}\psi_{n+1}(y) \quad , \quad n=0,1,2,3\cdots \qquad (13)$$

وبنفس الطريقة لو ضربنا المعادلة (11) بالمؤثر الخافض $\hat{a}$

$$\hbar\omega\ (\hat{a}\ \hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{a})\ \psi_n(y)=E_n\hat{a}\psi_n(y)$$

باستخدام العلاقة

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

$$\hat{a}\ \hat{a}^{+}=1+\hat{a}^{+}\hat{a}$$

$$\hbar\omega\{(\hat{a}^{+}\hat{a}+1)\ \hat{a}+\frac{1}{2}\hat{a}\}\ \psi_n(y)=E_n\hat{a}\psi_n(y)$$

وباخراج $\hat{a}$ من يمين القوس

$$\hbar\omega\{\hat{a}^{+}\hat{a}+1+\frac{1}{2}\}\hat{a}\ \psi_n(y)=E_n\hat{a}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega\{(\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})+1\}\hat{a}\ \psi_n(y)=E_n\hat{a}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega(\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})\ \hat{a}\ \psi_n(y)+\hbar\omega\ \hat{a}\ \psi_n(y)=E_n\hat{a}\psi_n(y)$$

$$\hbar\omega(\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})\ \hat{a}\ \psi_n(y)=E_n\hat{a}\psi_n(y)-\hbar\omega\ \hat{a}\ \psi_n(y)$$

$$\hbar\omega(\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2})\ \hat{a}\ \psi_n(y)=(E_n-\hbar\omega)\ \hat{a}\ \psi_n(y)$$

باستخدام العلاقة

$$\hat{H}=\hbar\omega\ (\hat{a}^{+}\hat{a}+\tfrac{1}{2})$$

$$\hat{H}\ \hat{a}\ \psi_n(y)=(E_n-\hbar\omega)\ \hat{a}\ \psi_n(y)$$

تعريف المؤثر الخافض

$$\because \quad \hat{a}\psi_n(y) = \sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$$

بالتعويض

$$\therefore \ \hat{H}\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y) = (E_n - \hbar\omega)\sqrt{n}\ \psi_{n-1}(y)$$

$$\hat{H}\ \psi_{n-1}(y) = (E_n - \hbar\omega)\ \psi_{n-1}(y)$$

وبما ان $\hbar\omega$ هو الفرق بين اي مستويين كميين متتاليين فان

$$E_n - \hbar\omega = E_{n-1}$$

$$\therefore \quad \hat{H}\ \psi_{n-1}(y) = E_{n-1}\ \psi_{n-1}(y) \qquad (14)$$

وهي معادلة شرودنكر للحالة الكمية $(n-1)$

وبما ان $E_\circ$ هي اوطا مستوى طاقة للمتذبذب التوافقي الموصوف بدالة الموجة $\psi_\circ$

$$\hat{H}\ \hat{a}\ \psi_\circ = (E_\circ - \hbar\omega)\ \hat{a}\ \psi_\circ$$

وبما ان لاتوجد قيمة ذاتية لمؤثر الطاقة اقل من المستوي الارضي لذا وجب ان يكون $\hat{a}\ \psi_\circ = 0$

$$\hat{H}\psi_\circ = E_\circ\psi_\circ$$

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})\psi_\circ = E_\circ\psi_\circ$$

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\underbrace{\hat{a}\ \psi_\circ}_{=0} + \frac{1}{2}\psi_\circ) = E_\circ\psi_\circ$$

$$\therefore \frac{1}{2}\hbar\omega\ \psi_\circ = E_\circ\psi_\circ$$

$$\therefore \quad E_\circ = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\because \quad E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$$

$$E_1 = E_\circ + \hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$E_2 = E_1 + \hbar\omega = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

$$\therefore \quad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})$$

$$\hat{a}\ \psi_\circ = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(y + \frac{d}{dy})\ \psi_\circ = 0$$

$$y\psi_\circ + \frac{d}{dy}\psi_\circ = 0$$

$$\frac{d\psi_\circ}{dy} = -y\psi_\circ$$

$$\int_{\psi_\circ}^{\psi_n} \frac{d\psi_\circ}{\psi_\circ} = -\int_0^y y\ dy$$

$$\ln\frac{\psi_n}{\psi_\circ} = -\frac{y^2}{2}$$

$$\psi_n(y) = \psi_\circ(y)\ e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

يمكن ايجاد $\psi_\circ$ باستخدام شرط المعايرة

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\psi_n\ dy = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_\circ e^{-\frac{1}{2}y^2}\psi_\circ e^{-\frac{1}{2}y^2} dy = 1$$

$$\psi_\circ^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = 1$$

$$\psi_\circ^2\sqrt{\pi} = 1 \quad \Rightarrow \quad \psi = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Q) Consider a simple harmonic oscillator **a)** compute expectation values $<x>$, $<x^2>$, $<p>$, $<p^2>$ **b)** find $\Delta p \Delta x$ **c)** find $<V(x)>$, $<T>$, $<E>$

Solution:

في هذه المسالة سوف نستخدم المؤثرات $\hat{a}$ ، $\hat{a}^+$

اولا ايجاد $<x>$

باستخدام المعادلة $$\hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

القيمة المتوقعة للموضع $$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \ \hat{x} \ \psi_n \ dx$$

وبما ان للمتذبذب التوافقي $\psi_n^* = \psi_n$

$$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \ (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \ \psi_n \ dx$$

$$< x >= (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \ \hat{a} \ \psi_n \ dx + (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \ \hat{a}^+ \psi_n \ dx$$

وباستخدام المعادلات

$$\hat{a}\psi_n(y) = \sqrt{n} \ \psi_{n-1}(y)$$

$$\hat{a}^+\psi_n(y) = \sqrt{n+1} \ \psi_{n+1}(y)$$

$$= (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \sqrt{n} \ \psi_{n-1} \ dx + (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \sqrt{n+1} \ \psi_{n+1} \ dx$$

$$= (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} \sqrt{n} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \ \psi_{n-1} \ dx + (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}} \sqrt{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \ \psi_{n+1} \ dx$$

وبما ان دوال الموجة للمتذبذب التوافقي هي دوال متعامدة وعيارية

$$\therefore \ < \hat{x} >= 0 \quad \Rightarrow \quad < \hat{x} >^2 = 0$$

ثانيا ايجاد $< x^2 >$

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

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}\ \hat{a} + \hat{a}\ \hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+)$$

$$< \hat{x}^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(\hat{a}\,\hat{a} + \hat{a}\,\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+)\psi_n dx$$

$$< \hat{x}^2 > = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \hat{a}\ \hat{a}\ \psi_n dx + \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \hat{a}\ \hat{a}^+ \psi_n dx$$

$$+ \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \hat{a}^+\hat{a}\ \psi_n\ dx + \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\ \hat{a}^+\hat{a}^+ \psi_n dx$$

$$\hat{a}\ \hat{a}\ \psi_n = \hat{a}(\hat{a}\ \psi_n) = \hat{a}\ \sqrt{n}\ \psi_{n-1}$$

$$= \sqrt{n}\ \hat{a}\ \psi_{n-1}$$

$$= \sqrt{n}\ \sqrt{n-1}\ \psi_{n-2} \qquad \text{(i)}$$

$$\hat{a}\ \hat{a}^+\psi_n = \hat{a}(\hat{a}^+\psi_n) = \hat{a}\ \sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}$$

$$= \sqrt{n+1}\ \hat{a}\ \psi_{n+1}$$

$$= \sqrt{n+1}\ \sqrt{n+1}\ \psi_n$$

$$= (n+1)\ \psi_n \qquad \text{(ii)}$$

$$\hat{a}^+\hat{a}\ \psi_n = \hat{a}^+(\hat{a}\ \psi_n) = \hat{a}^+\sqrt{n}\ \psi_{n-1}$$

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

$$= \sqrt{n}\ \sqrt{n}\ \psi_n$$

$$= n\ \psi_n \qquad \text{(iii)}$$

$$\hat{a}^+\hat{a}^+\psi_n = \hat{a}^+(\hat{a}^+\psi_n) = \hat{a}^+\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1}$$

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

$$= \sqrt{n+1}\ \sqrt{n+2}\ \psi_{n+2} \qquad \text{(iv)}$$

بتعويض كل من i ، ii ، iii ، iv في المعادلة اعلاه ينتج

$$< \hat{x}^2 >= (\frac{\hbar}{2m\omega})\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \sqrt{n}\sqrt{n-1}\ \psi_{n-2}\ dx + (\frac{\hbar}{2m\omega})\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n (n+1)\ \psi_n\ dx$$

$$+ (\frac{\hbar}{2m\omega})\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n n\ \psi_n dx + (\frac{\hbar}{2m\omega})\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\ \psi_{n+2}\ dx$$

$$< \hat{x}^2 >= (\frac{\hbar}{2m\omega})(n+1) + (\frac{\hbar}{2m\omega})\ n$$

$$< \hat{x}^2 >= (\frac{\hbar}{2m\omega})(n+1+n)$$

$$< \hat{x}^2 >= (\frac{\hbar}{2m\omega})(2n+1)$$

$$< \hat{x}^2 >= \frac{\hbar}{m\omega}\ (n+\frac{1}{2})$$

ثالثا ايجاد $< p >$ (القيمة المتوقعة للزخم)

باستخدام العلاقة

$$\hat{p} = -i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^{+})$$

$$< \hat{p} >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\ (-i\,(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}}\ (\hat{a} - \hat{a}^{+}))\,\psi_n\ dx$$

$$= -i\,(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\ \hat{a}\,\psi_n\ dx + i(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\ \hat{a}^{+}\psi_n\ dx$$

$$= -i\,(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \sqrt{n}\,\psi_{n-1}\ dx + i\,(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}\ dx$$

$$= -i\,(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}} \sqrt{n} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\,\psi_{n-1}\ dx + i\,(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}} \sqrt{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\,\psi_{n+1}\ dx$$

$$\therefore \quad <\hat{p}>=0 \quad \Rightarrow \quad <\hat{p}>^2=0$$

رابعا ايجاد $<\hat{p}^2>$

$$\hat{p}=-i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^+)$$

$$\hat{p}^2=-(\frac{m\omega\hbar}{2})(\hat{a}\,\hat{a}+\hat{a}\,\hat{a}^+ +\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}^+\hat{a}^+)$$

$$<\hat{p}^2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\ \hat{p}^2\psi_n\ dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,(-\frac{m\omega\hbar}{2})(\hat{a}\,\hat{a}-\hat{a}\,\hat{a}^+ -\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}^+\hat{a}^+)\psi_n\,dx$$

$$<\hat{p}^2>=-\,(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\hat{a}\,\hat{a}\psi_n\,dx+(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\hat{a}\,\hat{a}^+\psi_n\,dx$$

$$+(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,\hat{a}^+\hat{a}\psi_n\,dx-(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,\hat{a}^+\hat{a}^+\psi_n\,dx$$

بتعويض كل من i ، ii ، iii ، iv في المعادلة اعلاه ينتج

$$<\hat{p}^2>=-\,(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\sqrt{n}\sqrt{n-1}\psi_{n-2}\ dx+(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,(n+1)\psi_n\ dx$$

$$+(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\,n\ \psi_n\,dx-(\frac{m\omega\hbar}{2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\ \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,\psi_{n+2}\ dx$$

$$<\hat{p}^2>=(\frac{m\omega\hbar}{2})(n+1)+(\frac{m\omega\hbar}{2})n$$

$$=(\frac{m\omega\hbar}{2})(n+1+n)$$

$$=(\frac{m\omega\hbar}{2})(2n+1)$$

$$\therefore \quad <\hat{p}^2>=m\omega\hbar(n+\frac{1}{2})$$ وهو المطلوب

b) $\Delta p\,\Delta x$

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2$$

$$(\Delta x)^2 = <x^2> - 0$$

$$<x^2> = \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \quad \Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\ (n+\frac{1}{2})}$$

$$(\Delta p)^2 = <p^2> - <p>^2$$

$$(\Delta p)^2 = <p^2> - 0$$

$$= <\hat{p}^2> = m\omega\hbar(n+\frac{1}{2})$$

$$\therefore \quad \Delta p = \sqrt{m\omega\hbar(n+\frac{1}{2})}$$

$$\Delta p \Delta x = \sqrt{m\omega\hbar(n+\frac{1}{2})} \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\ (n+\frac{1}{2})}$$

$$\therefore \quad \Delta p\,\Delta x = (n+\frac{1}{2})\hbar$$

c) ايجاد القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة $<V(x)>$ (راجع ص 21)

$$<V(x)> = \frac{1}{2}m\omega^2 <x^2>$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot \frac{\hbar}{m\omega}\ (n+\frac{1}{2})$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\ (n+\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}E_n$$

ايجاد القيمة المتوقعة للطاقة الحركية

$$<T> = \frac{<p^2>}{2m} = \frac{m\omega\hbar(n+\frac{1}{2})}{2m}$$

$$=\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$=\frac{1}{2}E_n$$

$$<E>=<T>+<V>=\frac{1}{2}E_n+\frac{1}{2}E_n=E_n=(n+\frac{1}{2})\ \hbar\omega$$

Q) By using operator treatment procedure, derive the energy levels for the harmonic oscillator. **Hint**: start from the formula $\{\hbar\omega\ (\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2})\ \psi_n(y)=E_n\psi_n(y)\}$.

Solution:

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2})\ \psi_n=E_n\psi_n \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(a)}$$

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{a}^+)\ \psi_n=E_n\,\hat{a}^+\psi_n$$

$$\because\ [\hat{a}\ ,\ \hat{a}^+]=1 \qquad \Rightarrow \qquad \hat{a}^+\hat{a}=\hat{a}\hat{a}^+-1$$

$$\therefore\ \hbar\omega\,\{\hat{a}^+(\hat{a}\hat{a}^+-1)+\frac{1}{2}\hat{a}^+\}\psi_n=E_n\,\hat{a}^+\psi_n$$

$$\hbar\omega\,\{\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+-\hat{a}^++\frac{1}{2}\hat{a}^+\}\psi_n=E_n\,\hat{a}^+\psi_n$$

$$\hbar\omega\,\{\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{a}^+\}(\hat{a}^+\psi_n)=(E_n+\hbar\omega)(\hat{a}^+\psi_n)$$

$$\hat{H}(\hat{a}^+\psi_n)=(E_n+\hbar\omega)(\hat{a}^+\psi_n)$$

$$\because\ \hat{a}^+\psi_n=\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1} \qquad \text{and} \qquad E_n+\hbar\omega=E_{n+1}$$

$$\therefore\ \hat{H}\psi_{n+1}=E_{n+1}\psi_{n+1}$$

By multiplying equation (a) by $\hat{a}$ instead $\hat{a}^+$ and using a similar procedure one may gate

$$\hat{H}\psi_{n-1}=E_{n-1}\psi_{n-1}$$

So $\hat{H}\,\hat{a}\psi_\circ = (E_\circ - \hbar\omega)\,\hat{a}\psi_\circ$

$\therefore \quad \hat{a}\psi_\circ = 0$

Then $\hat{H}\psi_\circ = E_\circ\psi_\circ$

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})\,\psi_\circ = E_\circ\psi_\circ$$

$$\frac{\hbar\omega}{2}\,\psi_\circ = E_\circ\psi_\circ$$

$$\therefore \quad \frac{\hbar\omega}{2} = E_\circ$$

$$\because \quad E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$$

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega,\; E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega,\quad E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega\,, ...$$

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