الفصل الاول

الأسس الفيزيائية للميكانيك الكمي

ميلاد النظرية الكمية The Dawn of the Quantum Theory

في نهاية القرن التاسع عشر، اعتقد كثير من العلماء أن كل الاكتشافات العلمية قد تم إنجازها وفهمها وأنه لم يبقى إلا بعض المسائل البسيطة التي تحتاج لمزيد من الإيضاح. إن هذه القناعة وكانت ناشئة من التقدم العلمي في مجالات شتى والذي تمثل – على سبيل المثال – في ميكانيكا نيوتن Newton والتي طُورت بواسطة العالمان لاجرانج وهاملتون J. LaGrange and W. Hamilton. حيث تم استخدام هذه النظرية لوصف حركة الكواكب وكذلك فهم كثير من الظواهر المعقدة مثل نظرية المرونة elasticity theory وديناميكا الموائع hydrodynamic إنجازات العالم جول وبيان تكافؤ الشغل والحرارة، أبحاث كارنوت Carnot والتي أدت لفهم الإنتروبي والقانون الثاني للديناميكا الحرارية، وما يتبع هذه الأبحاث من تطوير على يد العالم جبس J. Gibbs لإرساء أسس علم الديناميكا الحرارية.

وشهدت مجالات أخرى من الفيزياء (مثل الضوء والنظرية الكهرومغناطيسية optics and electromagnetic theory) إنجازات ملحوظة. فمثلاً، الاستنتاجات الهامة التي توصل إليها العالم ماكسويل J. Maxwell متمثلة بمعادلاته الشهيرة "والبسيطة" والتي وَحّدت مجالات الضوء والكهربية والمغناطيسية وما يتبع هذه الأبحاث من التجارب المعملية بواسطة العالم هيرتز H. Hertz في عام 1887 والتي أدت إلى إثبات الطبيعة الموجبة للضوء.

كل هذه الإنجازات في المجالات المختلفة للفيزياء كوّنت ما يُعـــرف الآن بالفيزياء التقليدية Classical physics ومع بداية القرن العشرين، وُجدت بعض النتائج التجريبية الجديدة والتي استلزم تفسيرها مفاهيم فيزيائية جديدة تتنـــاقض مع مبادئ الفيزياء الجديدة ولد ما يسمى الآن بالنظرية الكمية quantum theory وسنحاول في هذا الفصل أن نصف خلفية هذه الأزمات لنـــصل مـــن خلالهـــا لمعرفة النظرية الكمية.

ويمكننا تلخيص المفاهيم الفيزيائية الجديـــدة فـــي: الخـــواص الجـــسيمية للإشعاع the particle properties of radiation، الخواص الموجية للمادة the wave properties of matter، وتكميم الكميات الفيزيائية the quantization of physical quantities. وسنقوم في هذا الفصل بمناقشة هذه المفاهيم.

1-1. إشعاع الجسم "الأسود"

1-1 Blackbody Radiation

– الفيزياء التقليدية لم تتمكن من شرح إشعاع الجسم الأسود

- Blackbody Radiation could not be explained by classical physics

من أهم النتائج التجريبية التي أحدثت ثورة في المفاهيم الفيزيائية التقليدية تلك المتعلقة بالإشعاع الصادر من الأجسام عند تسخينها. فمـــن المعلـــوم عنـــد تسخين جسم ما، نجد أن لونه يتغير مع زيادة درجة الحرارة حيث يبدأ بالأحمر ثم الأبيض ثم الأزرق. وبدلالة التردد، نقول أن الإشعاع المنبعث من هذا الجسم يبدأ بترددات منخفضة، وعند ارتفاع درجة الحرارة، تزداد الترددات، حيث أن اللون الأحمر ذو تردد قليل في منطقة طيف الإشعاع وذلـــك مقارنـــة بـــاللون الأزرق. إن طيف التردد للإشعاع المنبعث من جسم ما يعتمد على طبيعة الجسم نفسه، ولكن الجسم المثالي deal body، والذي يمتص أو يبعث كل التـــرددات

يُسمى بالجسم الأسود ويعتبر حالة مثالية لأي مادة تَـصدر إشـعاع. الإشـعاع المنبعث من "جسم أسود" يسمى إشعاع الجسم الأسود.

an ideal body, which absorbs and emits all frequencies, is called a blackbody and serves as an idealization for any radiating material, the radiation emitted by a blackbody is called blackbody radiation.

شكل 1-1 يوضح تغير شدة الإشعاع الصادر من جسم أسود مع التـردد وذلك عند درجات حرارة مختلفة. وقد حاول العديد من الفيزيـائيين اسـتنتاج معادلة رياضية تشرح النتائج التجريبية (في شكل 1-1) ولكن بدون توافق كامل وأولى المحاولات لوصف هذه النتائج قام بها كل من العالمين رالـي وجينـز Rayleigh and Jeans والتي اشتقت بناءاً على قوانين القرن التاسع عشر ويمكن كتابة هذه العلاقة بالصيغة:

$$u(\nu,T)=\frac{8\pi K_B T}{C^3}\nu^2 \qquad (1\text{-}1)$$

حيث $u(\nu,T)$ كثافة الطاقة energy density ووحدتها جـول لكـل متـر مكعب (J/m^3). في المعادلة (1-1)، T درجة الحرارة بالكيلـفن، c سرعة الضوء، K_B ثابت بولتزمان. الخط المتقطع في شكل 1-1 يبين العلاقة حـسب معادلـة رالي– جينز. لاحظ التوافق بين هذه العلاقة والنتائج التجريبية عند التـرددات المنخفضة. عند الترددات العالية، وحسب معادلة رالـي–جينـز، فـإن كثافـة الإشعاع تزداد طبقاً لـ ν^2 وتصل إلى مالا نهاية وذلك عندما تصل التـرددات إلى مالا نهاية وهذا يحدث في منطقة الأشعة فوق البنفسجية ultraviolet وهـذا ما يعرف بالانهيار فوق بنفسجي ultraviolet catastrophe. من المعادلة (1-1) ولكل الترددات من صفر إلى مالا نهاية.

$$\int_0^\infty u(\nu,T)\,d\nu=\int_0^\infty \frac{8\pi k_B T}{C^3}\nu^2\,d\nu \rightarrow \infty$$

وهذه النتيجة تتناقض مع النتائج التجريبية حيث أن شدة الإشعاع تزداد مع زيادة التردد لتصل إلى أقصى قيمة عند تردد معين نرمز له بـــ ν_{max} ثم تقل إلى الصفرة هذا يعني أن قيمة التكامل لا تساوي مالا نهاية. ومن الجـــدير بالـــذكر كذلك ملاحظة أن ν_{max} تتغير مع تغير درجة الحرارة كما هو موضح بالشكل.

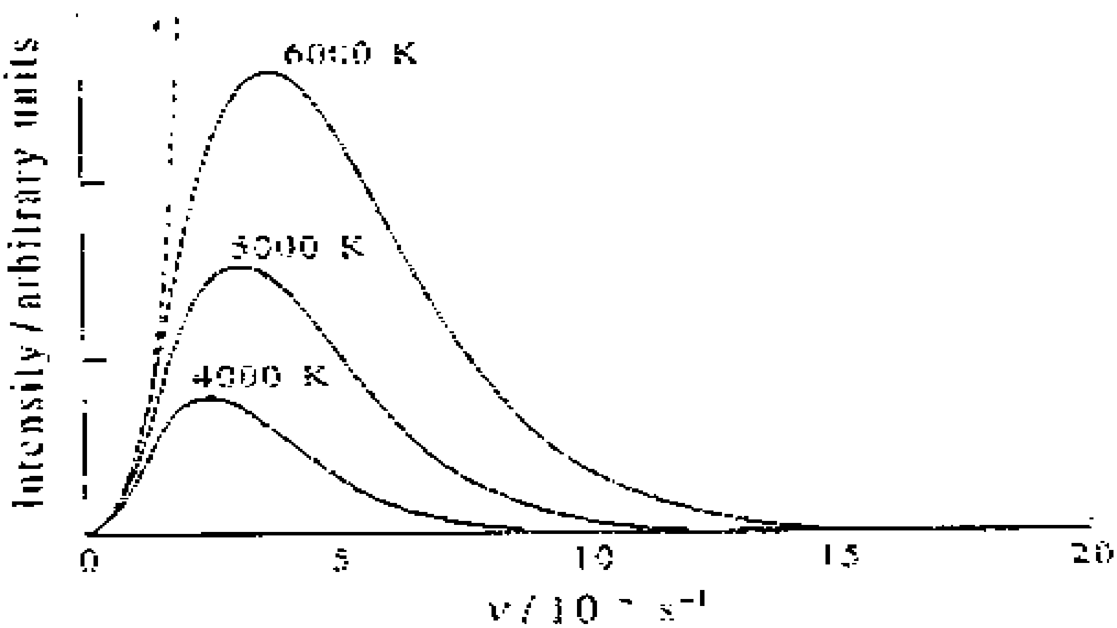


FIGURE 1.1

Spectral distribution of the intensity of blackbody radiation as a function of frequency for several temperatures. The intensity is given in arbitrary units. The dashed line is the prediction of classical physics. As the temperature increases. The maximum shifts to higher frequencies and the total radiated energy (the area under each curve) increases significantly. Note that the horizontal axis is labeled by $\nu/10^{14}$ s^{-1}. This notation means that the dimensionless numbers on that axis re frequencies divided by 10^{14} s^{-1}. We shall use this notation to label columns in tables and axes in figures because of its unambiguous nature and algebraic convenience.

كيف تم حل هذا الإشكال بين النظرية والتجارب العملية؟

1-2 توزيع بلانك وتكميم الطاقة

1-2 The Planck Distribution and the Quantum of Energy

إن أول من قدم تصوير صحيح لإشعاع الجسم الأسود هو العالم الألماني ماكس بلانك Max Planck في عام 1900. وفي نظريته، افترض بلانك أن الإشعاع المنبعث من الجسم الأسود من اهتزاز الإلكترونات المكونة لمادة الجسم. ولكون هذه الاهتزازات ذات ترددات عالية فإننا نجد في طيف الإشعاع المنبعث ترددات في منطقة الضوء المرئي والأشعة تحت الحمراء وفوق البنفسجية بينما لا نجد أي من ترددات الراديو في هذا الطيف. طبقاً لنظرية رالي–جينز، فإنه مفهوم ضمناً أن طاقة الإلكترونات المهتزة، والتي هي سبب انبعاث الإشعاع من المادة– مسموح لها أن تأخذ أي قيمة من الطاقة. وهذه الفرضية هي إحدى الأساسيات الفرضية في الفيزياء التقليدية. في الفيزياء التقليدية، الكميات الفيزيائية المتغيرة والتي تُمثل مشاهدات (مثل الموقع Position، كمية الحركة Momentum والطاقة energy) يمكن تملك قيم متصلة.

In classical physics, the variables that represent observables (such as position, momentum and energy) can take on a continuum of values.

ولقد أدرك العالم بلانك – بعمق تفكيره – بضرورة إحداث تغيير جذري وجوهري في هذا المفهوم الفيزيائي فكانت فرضيته الانقلابية في الفيزياء الحديثة: طاقة الإلكترونات المهتزة مكممة وقيمها غير متصلة وتتناسب برقم كمي صحيح مع التردد وذلك من خلال المعادلة $E=nh\nu$

حيث E هي طاقة المتذبذب، n هو رقم صحيح، h ثابت التناسب ويُعرف بثابت بلانك، و v هو تردد المتذبذب.

وبناءاً على مبدأ تكميم الطاقة ومفاهيم ديناميكا حرارية إحصائية، تمكـــن بلانك من استنتاج العلاقة الرياضية التالية:

$$u(v,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{v^3}{e^{hv/k_BT}-1} \qquad (1\text{-}2)$$

وهذه العلاقة تتفق تماماً مع النتائج التجريبية عند كل الترددات ودرجات الحرارة المعادلة (1-2) تُعرف بتوزيع بلانك لإشعاع الجسم الأسود

Planck distribution lance for black body radiation.

(i) عند الترددات المنخفضة، تؤول معادلة بلانك إلى معادلة رالي–جينز بالنظر إلى النسبة $\frac{hv}{k_BT}$ فعندما تكون v صغيرة فإن $\frac{hv}{k_BT} \ll 1$

من مكنون تايلور للدالة الأسية $e^v=1+v+\frac{v^2}{2!}+\ldots$

إذا كانت v صغيرة، يمكننا إهمال الحدود ذات الأســس العليــا وعليــه $e^v\approx 1+v$ وذلك إذا كانت $v \ll 1$ في هذه الحالة يمكننا كتابة معادلة بلانك

$$u(v,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{v^3}{1+\frac{hv}{vT}-1}=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{v^3}{\frac{hv}{k_BT}}$$

$$u(v,T)=\frac{8\pi}{c^3}K_BTv^2 \qquad (1\text{-}3)$$

وهذه هي معادلة رالي– جينز.

(ii) الطاقة الكلية

$$u(t)=\int_0^\infty u(v,T)\,dv=\frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty dv\frac{v^3}{e^{hv/k_BT}-1}$$

ولإجراء هذا التكامل نعوض عـــن $v=\frac{hv}{k_BT}$، هـــذا يعنـــي أن $dv=\frac{h}{k_BT}dv$

ويمكننا كتابة dv بدلالة dv و $dv=\frac{k_BT}{h}dv$. حدود التكامل لم تتغير، بـــالتعويض عن v بـــ $\frac{k_BT}{h}v$ وكذلك dv بدلالة dv نتحصل على

$$u(v,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty(\frac{kT}{h})^3\frac{v^3}{e^v-1}(\frac{kT}{h})dv$$

$$=\frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty(\frac{kT}{h})^4\frac{v^3}{e^v-1}dv=\frac{8\pi h}{c^3}(\frac{k_BT}{\pi})^4\int_0^\infty\frac{v^3}{e^v-1}dv$$

التكامل $\int_0^\infty\frac{v^3}{e^v-1}dv$ قيمته تساوي $\frac{\pi^4}{15}$

$$\therefore u(T)=\frac{8\pi h}{c^3}(\frac{k_BT}{h})^4\frac{\pi^4}{15}=\frac{8\pi^5}{15c^3}(\frac{k_B}{h})^4T^4$$

$$= aT^4 \ldots\ldots\ldots\ldots \qquad (1-4)$$

حيث: $a=\frac{8\pi^5}{15c^3}(\frac{k_B}{h})^4$

1-3 The Photoelectric Effect   3-1 التأثير الكهروضوئي

في عام 1886 ,1887 وبينما كان يجري تجاربه التي أكدت نظرية ماكسويل الخاصة بالطبيعة الموجية للضوء، لاكتشف الفيزيائي الألماني هينرك هيرتز Heinrich Hertz أن الأشعة الضوئية الفوق بنفسجية ultraviolet light تسبب انطلاق (انبعاث) emission الإلكترونات من سطح معدن بالإشعاع يسمى بالتأثير الكهروضوئي.

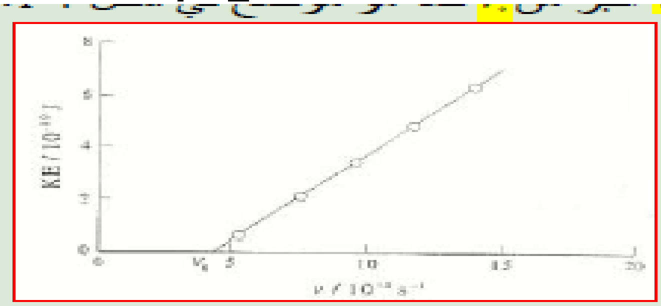
وطبقاً لقوانين الفيزياء التقليدية، فإن الإشعاع الكهرومغناطيسي عبارة من مجال كهربي يتذبذب عمودياً على اتجاه انبعاث الإشعاع (هنا أهملنا المجال المغناطيسي). والذي نريد أن نركز عليه هنا أن شدة الأشعة intensity of the radiation تتناسب مع مربع سعة المجال الكهربي.

The intensity of the radiation is proportioned to the square of the amplitude of the .oscillating electric field.

ويمكن للالكترونات التي على سطح المعدن أن تتذبذب مع المجال الكهربي الساقط عليها، وكلما ازدادت شدته (سعته) تزداد سعة تذبذب الإلكترونات كثيراً مما يؤدي في النهاية إلى كسر ارتباطها بالسطح وانطلاقها بطاقة حركية kinetic energy والتي ستعتمد على سعة (شدة) المجال الكهربي للإشعاع الساقط. إن هذا التفسير الفيزيائي (التقليدي) يتعارض تماماً مع المشاهدات الفيزيائية لهذه الظاهرة والتي تمثلت في:

1- وُجد أن الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة من السطح لا تعتمد على شدة الانبعاث independent of the intensity of incidental.

2- وجد تجريبياً أن الإلكترونات لا تنبعث من السطح إلا إذا كان تردد الإشعاع الساقط أكبر من تردد معين ν_o بغض النظر عن شدة الإشعاع سنسمي هذا التردد ν_o بعتبة التردد threshold frequency وقيمة ν_o تعتمد على نوع المعدن. وكذلك وجد أن الطاقة الحركية للالكترونات المنبعثة تتناسب خطياً مع التردد ν وذلك إذا كانت ν أكبر من ν_o كما هو موضح في شكل 4-1.



شكل 4-1: تغير قيم الطاقة الحركية للإلكترونات مع التردد.

ولتفسير هذه النتائج، طور العالم اينشتاين فرضية بلانك من تكميم الطاقة. وهنا نذكر أن بلانك طبق مفهوم تكميم الطاقة فقط على المتذبذب الذي يمتص أو يبعث الطاقة (فإذا مصدر تردده ν فإنه يملك طاقة $E=nh\nu$) أما إذا ما انبعث الإشعاع من هذا المتذبذب فإنه يسلك (كما اقترح بلانك) كموجة عادية تخضع للمفاهيم الفيزيائية التقليدية. أما العالم اينشتاين فقد ذهب إلى ما هو أبعد من هذا، فقال إن التكميم لا ينطبق فقط على المتذبذب بل إن الإشعاع المنبعث منه ينبعث كمات من الطاقة (أو حزم من الطاقة) منفصلة عن بعضها وطاقة كل كم $E=h\nu$ وأطلق اسم الفوتون photon عليه.

Einstein proposed that the radiation itself existed as smell packers of energy, $E=h\nu$, now known as photons.

وبناءاً على مبدأ حفظ الطاقة Conservation of energy، وضح اينشتاين أن الطاقة الحركية $K.E=\frac{1}{2}mv^2$ (التي ينبعث بها الإلكترون ذو الكتلة m والسرعة v) من سطح المعدن عبارة عن الفرق بين الطاقة الساقطة للفوتون $h\nu$ وأقل طاقة لازمة لنزع الإلكترون (وتحريره) من طاقة ربطة بالمعدن W (ويرمز لها أحياناً بـ φ) والتي تسمى دالة الشغل Work function.

ويمكننا صياغة ما سبق ذكره بالمعادلة التالية:

$$K.E=\frac{1}{2}mv^2=h\nu-\varphi \qquad (1\text{-}5)$$

لاحظ أن قيمة $\frac{1}{2}mv^2$ موجبة وعليه فالفرق $h\nu-\varphi$ لا يمكن أن يكون سالب. أي أنه $h\nu\geq\varphi$. إن أقل قيمة لـ $h\nu$ هي الطاقة اللازمة لتحرير الإلكترون من ربط النواة وهذا يحدث عن عتبة التردد ν_0 أي أن:

$$h\nu_0=\varphi \quad (1\text{-}6)$$

ويمكننا كتابة معادلة (1-5) على الصورة.

$$\frac{1}{2}mc^2 = h\nu - h\nu_0 \qquad (1\text{-}7)$$

وهذه معادلة خط مستقيم (على الصورة y = mx-c) وهو تماماً ما يشاهد من النتائج التجريبية الموضحة في شكل 1-5.

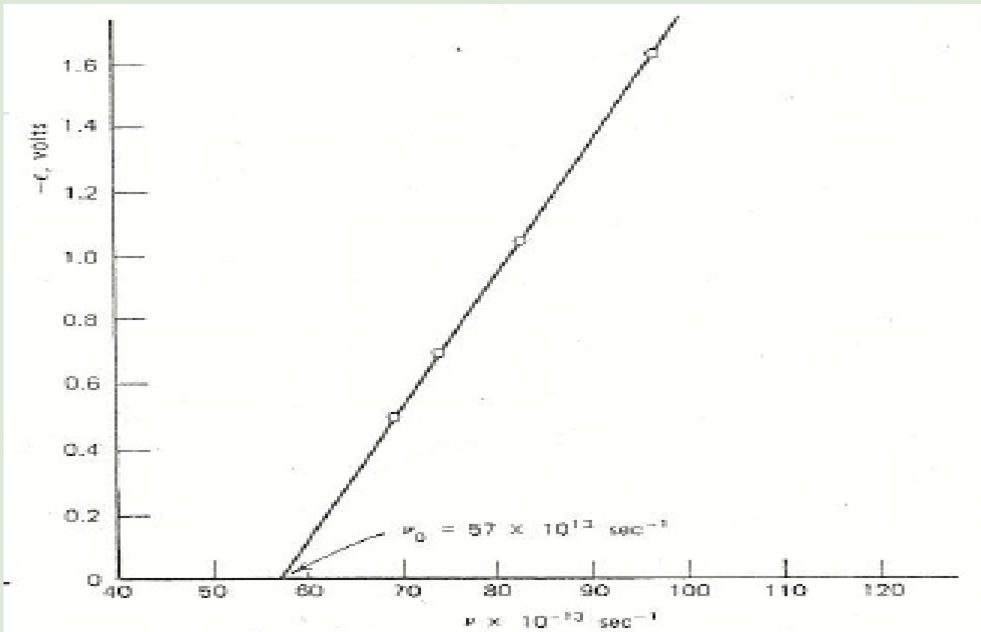


Figure 1-5. Photoelectric effect data showing a plot of retarding potential necessary to stop electron flow from a metal (lithium), or equivalently, electron kinetic energy, as a function of frequency of the incident light, the slope of the line is *h/e*.

1-4 تأثير كومبتون:

1-4 The Compton Effect

التجربة التي تؤكد بوضوح الطبيعة الجسيمية للإشعاع the particle nature of radiation تسمى بتأثير (ظاهرة) كومبتون نسبة للعالم كومبتون Arthur H. Compton لقد اكتشف كومبتون أنه إذا اخترق إشعاع ذو طول موجي (في منطقة الأشعة السينية X-ray) شريحة معدنية فسيتبعثر scattered بطريقة لا يمكن تفسيرها حسب النظرية التقليدية للإشعاع.

الذي تخبرنا به قوانين الفيزياء التقليدية أن شدة الإشعاع I المنبعث من مادة نتيجة تأثرها بإشعاع سقط عليها (مما يؤدي إلى اهتزاز إلكتروناتها والتي بدورها ستبعث إشعاع) عندما تقاس عند زاوية θ (بالنسبة لاتجاه الأشعة الساقطة) فإن I تتغير مع θ حسب العلاقة

$I \approx (1+\cos^2\theta)$ (1-8)

وهذا يعني أن I لا تعتمد على الطول الموجي للأشعة الساقطة، وهذا يتعارض بوضوح مع النتائج التجريبية (شكل 1-6) والتي يتبين بوضوح تغير I بتغير λ.

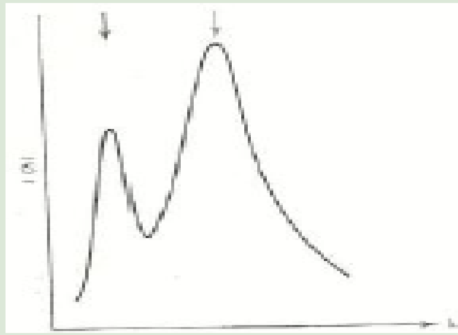


Figure 1-6. The spectrum of radiation scattered by carbon, showing the unmodified line at 0.7078 Å on the left and the shifted line at 0.7314 Å on the right. The former is the wave-length of the primary radiation.

نتائج تجربة كومبتون:

لقد وجد كومبتون أن الإشعاع المتبعثر له مركبتين؛ مركبة طولها الموجي مساوٍ لطول موجة الإشعاع الساقط ومركبة أخرى تختلف في طولها الموجي عن الطول الموجي للإشعاع الساقط وتعتمد على زاوية البعثرة وقد تمكن كومبتون من شرح وجود مركبة الإشعاع المتبعثرة ذات الطول الموجي المختلف عن الطول الموجي الساقط وذلك باعتبار الشعاع الساقط عبارة عن شعاع من الفوتونات بطاقة $h\nu$ حيث يعاني كل فوتون من تبعثر (تشتت) مرن elastic scattering مع كل إلكترون.

وكما هو معلوم، في حالة التشتت المرن فإن كمية الحركة momentum والطاقة energy كميات تخضع لقانون الحفظ (البقاء) momentum and energy must be conserved.

ولتفسير هذه الظاهرة رياضياً، افترض كومبتون أن الفوتون لـــه كميـــة حركة p تعطي بالعلاقة

$$p=\frac{h\nu}{c} \quad (1\text{-}9)$$

حيث تم اعتبار الحركة الديناميكية للفوتون كجسيم يخضع لقوانين النظرية النسبية والتي توضح العلاقة بين الطاقة وكمية الحركة.

$$E=\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2} \quad (1\text{-}10)$$

حيث m_0 هي الكتلة السكونية rest mass للجسيم، وسرعة الجسيم v عند كمية الحركة p تعطى بالعلاقة

$$v=\frac{\partial E}{\partial p}=\frac{d}{dp}\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2}$$

$$=\frac{1}{2}=\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{-\frac{1}{2}}\frac{d}{\partial p}(pc)$$

$$=\frac{1}{2}\frac{1}{\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2}}(pc)c$$

$$\therefore v=\frac{pc^2}{E}=\frac{pc^2}{(m_o^2c^4+p^2C^2)^{1/2}} \quad (1\text{-}11)$$

في حالة الفوتون، نعوض عن $m_o=o$ و $v=c$ في معادلة (1-11)

$$\therefore C=\frac{pc^2}{E}\Rightarrow E=pc \quad (1\text{-}12)$$

من معادلة (1-12) نتحصل على معادلة (1-9) حيث $E=h\nu$

$$p=\frac{E}{C}=\frac{h\nu}{C}$$

دعنا نفترض الآن وجود فوتون بكمية حركة ابتدائيـــة p_o ســـاقط علـــى إلكترون ساكن. وبعد التصادم، نفترض أن كميـــة الحركـــة للفوتـــون p أمـــا

الإلكترون فيحدث له ارتداد recoil بكمية حركة p_e. وبتطبيق قانون بقاء كمية الحركة (انظر شكل 1-7).

$\vec{p}_0=\vec{p}_e+\vec{p}$ (1-13)

بتربيع طرفي المعادلة.

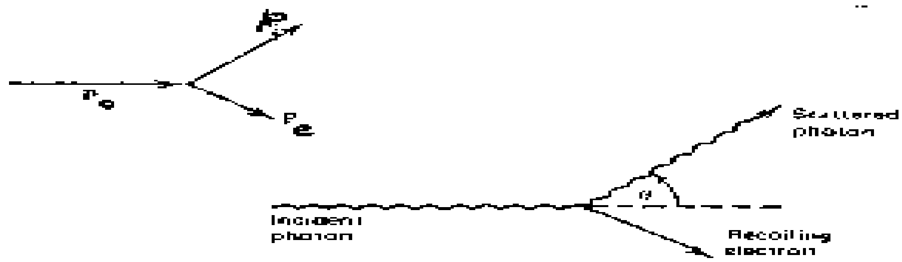


Figure 1-7. Kinematics for Compton effect.

$$\vec{p}_e^{\,2}=\vec{p}_0^{\,2}-\vec{p}^{\,2}-2\vec{p}_0\cdot\vec{p} \qquad (1\text{–}14)$$

نطبق الآن قانون بقاء الطاقة

أولاً، طاقة الإلكترون E قبل التصادم $E=\left[(m_0c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2}$

بالتعويض عن $m_0=0$ لأن الإلكترون ساكن قبل التصادم (لأن P تساوي صفر).

$$\therefore E=m_0c=mc^2 \qquad (1\text{–}15)$$

قانون بقاء الطاقة: طاقة الإلكترون والفوتون الساقط قبل التصادم = طاقة الإلكترون والفوتون بعد التصادم

$$h\nu_0+mc^2=h\nu+(m^2c^4+p_e^2c^2)^{1/2}$$

بنقل hv للطرف الأيسر وتربيع طرفي المعادلة

$$(h\nu_0+mc^2-h\nu)^2=(m^2c^4+p_e^2c^2)$$

or

$$m^2c^4+p_e^2c^2=(h\nu_0-h\nu+mc^2)^2$$
$$=(h\nu_0-h\nu)^2+2mc^2(h\nu_0-h\nu)+m^2c^4$$

(1–16)

من معادلة (1-14)، بالتعويض عن $p=\frac{h\nu}{c},\ p_0=\frac{h\nu_0}{c}$

$$\therefore p_e^2=\left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2+\left(\frac{h\nu}{c}\right)^2-2\left(\frac{h\nu_0}{c}\right)\left(\frac{h\nu}{c}\right)\cos\theta$$

حيث θ هي الزاوية المحصورة بين اتجاه الشعاع المشتت والشعاع الساقط بضرب طرفي المعادلة في C^2

$$p_e^2c^2=(h\nu_0)^2+(h\nu)^2-2(h\nu_0)(h\nu)\cos\theta \qquad (1\text{–}17)$$

وللحصول على مربع كامل، نضيف ونطرح $[2h\nu_0h\nu]$ لمعادلة (1-17)

$$p_e^2c^2\ \underbrace{(h\nu_0)^2+(h\nu)^2-2h\nu_0h\nu}_{(h\nu_0-h\nu)^2}+\underbrace{2(h\nu_0)(h\nu)-2(h\nu_0)(h\nu)\cos\theta}_{2h\nu_0h\nu(1-\cos\theta)}$$

$$\therefore p_e^2c^2=(h\nu_0-h\nu)^2+2h\nu_0h\nu(1-\cos\theta) \qquad (1\text{–}18)$$

بالتعويض عن قيمة $(h\nu_0-h\nu)^2$ من معادلة (1-18) في معادلة (1-18) نتحصل على

$$m^2c^4+p_e^2c^2=p_e^2c^2-2h\nu_0h\nu(1-\cos\theta)+2mc^2(h\nu_0-h\nu)+m^2c^4$$

(1-19).. بحذف الحدود المتشابهة من طرفي المعادلة:

$$2h\nu_0 h\nu(1-\cos\theta) = 2mc^2(h\nu_0 - h\nu) -$$
$$= 2mc^2 h(\nu_0 - \nu)$$
$$= 2mc^2 h\left(\frac{c}{\lambda_0} - \frac{c}{\lambda}\right) 2mc^2 hc\left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda}\right)$$
$$2h\frac{c}{\lambda_0} h\frac{c}{\lambda}(1-\cos\theta) = 2mc^2 h\frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0 \lambda}$$
or
$$2h^2\frac{c^2}{\lambda_0 \lambda}(1-\cos\theta)\, 2mc^2 h\frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0 \lambda}$$
$$h(1-\cos\theta) = mc(\lambda - \lambda_0)$$
$$\text{or } \boxed{\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{cm}(1-\cos\theta)} \qquad \text{---(1-20)}$$

لاحظ أن $\frac{h}{mc}$ في معادلة (1-20) له بُعد الطول وهذا الحد يُسمى طول موجة كومبتون Compton wavelength للالكترون ومقداره

$$\frac{h}{mc} \cong 2.4\times10^{-10}\,\text{cm} \qquad (1\text{-}21)$$

وقد تبين من القياسات العملية أن طول موجة الفوتون والمتشتت λ تتطابق مع القيمة النظرية. أمّا المركبة الثانية لـ λ (انظر شكل والتي يبين مركبتين لـ λ إحداهما تختلف عن λ_0 والأخرى مساوية لـ λ_0) والتي لا تتغير بالنسبة فإن منشأها هو تصادم الفوتون الساقط مع الذرة ككل، فلو عوضنا عن m بكتلة الذرة (بدلاً من كتلة الإلكترون) وحيث أن هذه القيمة في المقام (وهي كبيرة جداً بالنسبة لكتلة الإلكترون) فإن الحد $\frac{h}{mc}$ ستكون قيمته صغيرة جداً قريبة من الصفر، أي أن $\lambda-\lambda_0\cong 0$ وهذا يعني $\lambda\cong\lambda_0$ وأخيراً ما الذي نستنتجه من تأثير كومبتون؟

إن القياسات التي أجريت على الإلكترون المرتد والفوتون المتبعثر منه تؤكد – بما لا يدع مجالاً للشك – بأن هذا التصادم مماثل للتصادم الذي يحدث بين كرتي بليارد، أي أن الفوتون (أو الشعاع الساقط) يجب أن نتعامل معه على أساس أنه جسيم، وهذا يؤكد الطبيعة الجسيمية للإشعاع.

1-5 الخصائص الموجية للمادة وحيود الإلكترون

1-5 Wave Prosperities and Electron Diffraction

واجه العلماء كثيراً من الصعوبات في وصف طبيعة الضوء. بعض التجارب تبين الطبيعة الموجية للضوء (مثل؛ dispersion الضوء الأبيض لمركبات طيفه عند مروره داخل منشور prism) والبعض الآخر من التجارب يثبت الطبيعة الجسيمية للضوء (مثل التأثير الكهروضوئي)..

وهذا ما يُعرف بالطبيعة المزدوجة للضوء ware- particle duality of lights-.

في عام 1924، قدَّم عالم فرنسي يدعى ديبرولي Louis de Broglie – وبناءاً على ما سبق ذكره بالنسبة للضوء– نموذجاً يبين فيه الطبيعة الموجية للمادة؛ فإذا كان الضوء– ذو الطبيعة الموجية – يسلك أحياناً كما لو كان جسيمات، فلماذا لا يكون للمادة طبيعة موجية؟!! وقد صاغ ديبرولي فكرته هذه بصيغة رياضية– اقتبسها من علاقة إينشتاين التي ترتبط بين طول موجة الفوتون λ وكمية حركته P [1] ، فإذا كان جسيم كتلته m وسرعته v فإن كمية حركته p=mv عندئذ فإن الجسيم – وحسب نموذج ديبرولي – سيكون له طول موجي λ يعطى بالعلاقة.

$$\lambda\frac{h}{p} \quad ...(1\text{-}22)$$

1-6 ذرة بور

1-6 The Bohr Atom

"The Bohr Theory of the Hydrogen Atom Can be Used Drive the Rydberg For mole"

في عام 1911، قدم العالم الدنماركي نيلس بور Niels Bohr نظريته الشهيرة لذرة الهيدروجين والتي تشرح وتفسر ببساطة الطيف المنبعث من الذرة.

طبقاً للنموذج النووي للذرة، والذي يقوم على النتائج التجريبية لتطاير جسيمات α، يمكن اعتبار أن كتلة الذرة متركزة في النواة والتي تعتبر ثابتة ويدور حولها إلكترون. القوة F التي يرتبط بها الإلكترون في مدار دائري هي قوة كولوم حسب قانون كولوم.

$$F=\frac{1}{4\pi\varepsilon_\circ}\frac{(Ze)(e)}{r^2} \qquad \text{--- (1-24)}$$

حيث (Ze) هي شحنة النواة (لذرة الهيدروجين Z = 1) و (e) هي شحنة الإلكترون.

$\varepsilon_\circ = 8.85\times10^{-12}\ c^2\ N^{-1}\ m^{-2}$ ، r نصف قطر الذرة. تتوازن قوة كولوم مع القوة الطاردة المركزية.

$$F=\frac{mv^2}{r} \qquad \text{...(1-25)}$$

حيث v هي السرعة الخطية للإلكترون.

بمساواة القوتان نجد:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_\circ}\frac{e^2}{r^2}=\frac{mv^2}{r} \qquad \text{...(1-26)}$$

طبقاً لقوانين الفيزياء الكلاسيكية، فإن الجسم المشحون المتسارع. يُصدر إشعاع مما يؤدي إلى فقدان لطاقته، ولهذا السبب فإن الإلكترون سيفقد طاقته خلال دورانه حول النواة وسيدور في شكل حلزوني ويتلاشى داخل النواة، وعليه فلا يمكن أن يوجد مدار مستقر stable orbit للالكترون. وللخروج من هذا الإشكال اقترح بور فرضياته التي تخالف قوانين الفيزياء التقليدية.

الفرضية الأولى:

المدارات الإلكترونية المستقرة (الثابتة)

Stationary electron orbits

وهذه الفرضية هي تَحدٍ بالمفاهيم التقليدية الفيزياء. ولقد حدد بــور هــذه المدارات باستحداث شرط التكميم quantization condition وافترض أن كمية الحركة الزاوية angular momentum L مكملة حسب العلاقة.

$$L = mvr = n\hbar \quad , n = 1, 2, \ldots\ldots$$

...(1-27)

من هذه العلاقة نجد أن $v = \frac{n\hbar}{mr}$

بالتعويض في (1-26)

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{m}{r}\left(\frac{n\hbar}{mr}\right)^2 \frac{mn^2\hbar^2}{m^2 r^3}$$

وفيها نجد أن.

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} e^2 = \frac{n^2\hbar^2}{mr} \Rightarrow r = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} . n^2 \qquad \ldots(1\text{-}28)$$

ومن هذه العلاقة نجد أن أنصاف أقطار المدارات لها مقادير محــددة أو مكممة. إن أقل نصف قطر للإلكترون يوجد بالتعويض عن n = 1.

الفرضية الثانية: يمكن للالكترونات أن تنتقل (أو تقفــز) مــن مــداراتها بطريقة غير متصلة discontinuous transitions وأن التغير فــي الطاقــة ΔE يؤدي لانبعاث إشعاع له تردد $h\nu$. ولهذا السبب لو انتقل إلكترون مــن المــدار الذي له $n_2 = 1$ إلى المدار ذو $n_1 = 2$ فإن الفرق في الطاقة.

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2}\frac{1}{n_2{}^2} - \left(-\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2}\frac{1}{n_1{}^2}\right)$$

$$\Delta E = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2}\left(\frac{1}{n_1{}^2} - \frac{1}{n_2{}^2}\right) = h\nu \qquad ..$$

مبدأ اللادقة لهايزنبرغ :

يعتبر هذا المبدأ من أساسيات ميكانيكا الكم وهو ترسيخ لفرضية دوبري التي تطرقنا لها في المحاضرات السابقة. ويجب الانتباه جيدا حين التعامل مع هذا المبدأ خصوصا ،وميكانيكا الكم عموما أننا نتعامل مع العالم ألمجهري(الكترونات،بروتونات،نيترونات،كواركات،ذرات،......الخ. وليس العالم ألجهري(الأجسام الكبيرة عموما والتي تخضع لقوانين نيوتن). ومثال ذلك نستطيع جهريا تحديد مكان وسرعة متحرك(سيارة) في نفس اللحظة وبدقة ممتازة،ولكننا لا نستطيع مجهريا أن نحدد مكان وسرعة إلكترون حول نواة الذرة في نفس اللحظة لكل منها وبنفس الدقة دون الشك بقيمة أحدهما،وببساطة إذا أردنا أن نحدد موقع الإلكترون بدقة يجب أن تصبح سرعته مساوية للصفر وهذا أمر غير معقول لان الإلكترون متحرك،وإذا أردنا أن نحدد السرعة بدقة نكون قد أضعنا موضع الإلكترون ،أي لا يمكن وبنفس الدقة أن نحدد موضع وسرعة الإلكترون في آن واحد ،ويحصل هذا أيضا في الفيزياء النووية حيث لانستطيع أن نتنبأ بدقة متى سيحصل انبعاث الجسيمات (الطاقة) من النواة المشعة وهي مسالة تخضع لمبدأ هايزنبرغ وبالتالي إلى قوانين ميكانيكا الكم.

مسارات مبدأ هايزنبرغ:

ندرس هنا إمكانية قياس زوج من المقادير الفيزيائية (المتحولات الديناميكية) في آن واحد، وتتم وفق مسارين أساسين يمكن من خلالهما إظهار المعنى الفيزيائي لمبدأ عدم التعيين.

المسار الأول : يدرس إمكانية قياس كمية الحركة والموضع لجسيم مجهري(الكترون،بروتون ،نيترون،......الخ)،في آن واحد وبنفس الدقة،وهذا غير ممكن تجريبيا.

المسار الثاني: يدرس إمكانية قياس طاقة الفوتون في اللحظة التي يتم بها إصداره من الذرة المثارة .

الوصف الرياضي للمبدأ:

$$\Delta E.\Delta t = \Delta p_x.\Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \propto h$$

تمثل علاقة هايزنبرغ في اللاتحديد أو علاقة عدم التعيين(التاكد). وتؤكد هذه العلاقة انه لا يمكن

الحصول على قيم أدق من تلك التي تحددها تلك العلاقة ،ويجب الانتباه أن مبدأ الشك لا يحدد دقة القياس لكمية الحركة بشكل مفرد ،وكما انه لا يحدد دقة القياس في الموضع بشكل مفرد ، وإنما (مبدأ الشك)يحدد الجداء $\Delta p_x.\Delta x$ ،فالزيادة في دقة قياس أحدهما سيؤدي إلى زيادة الخطأ في قياس الأخر وذلك ليبقي الجداء ثابت ومن مرتبة ثابت بلانك. ونفس الكلام ينطبق على الجداء $\Delta E.\Delta t$.

مبدأ التقابل :

في الفيزياء ينص مبدا التقابل على ان نتائج الميكانيك الكمي تختزل الى نتائج الفيزياء الكلاسيكية في الغايه التي يكون فيها العدد الكمي الاساسي $n\to\infty$ كبير جدا او بمعنى اخر عندام يكون العدد الكمي كبير جدا والطاقه كبيره فان النتائج الكمية تتطابق مع النتائج الكلاسيكيه ، وهذا التطابق يعني ان ثابت بلانك يقترب من الصفر $\hbar \to 0$. وللتحقق من هذا المبدأ :

ان الزخم الزاوي الكلاسيكي يعطى بالعلاقه :

$$L = \sqrt{l(l+1)\hbar}$$

وبما ان العدد الكمي المداري يساوي $l = n - 1$ حيث n يمثل العدد الكمي الاساسي ، وبالتعويض عن قيمه l في المعادله اعلاه ينتج :

$$L = \sqrt{(n-1)(n-1+1)}\ \hbar = \sqrt{n(n-1)}\ \hbar$$

$$L^2 = (n^2 - n)\hbar^2$$

وبما ان n كبير جدا فيمكن اهمال n مقارنة ب n^2 وبهذا تصبح المعادله اعلاه كالاتي :

$$L^2 = n^2\hbar^2 \ \to L = n\hbar$$

وهذا يمثل الزخم الزاوي في الميكانيك الكمي .

أمثله محلوله

أولاً: من تعريف الإلكترون فولت

(1 coulomb) (1 volt) = 1 Joule

والشحنة الأولية للبروتون تساوي

والشحنة الأولية للبروتون تساوي $1.6\times10^{-19}\,C$ عندئذ

$$1\,eV=(1.6\times10^{-19}\,C)(1\,V)$$
$$=1.6\times10^{-19}\,J$$

(J ترمز للجول)

مثال2: دالة الشغل للصوديوم تساوي en 1.82، احسب عتبة التـــردد $\nu_\circ$ للصوديوم؟

الحل: أولاً: يلزم تحويل ϕ من eV إلى جول:

$$\varphi=1.82\,eV$$
$$=(1.82\,eV)(1.6\times10^{-19}\,\frac{J}{eV})$$
$$=2.92\times10^{-19}\,J$$

ومن معادلة (6-1) $[h\nu_\circ=\varphi]$ يمكننا حساب $\nu_\circ$

$$\nu_\circ=\frac{\varphi}{h}=\frac{(2.92\times10^{-19}\,J)}{(6.63\times10^{-34}\,J.S)}$$
$$=4.40\times10^{14}\,\frac{1}{5}=4.40\times10^{14}\,H_z$$

حيث Hz ترمز للهرتز وهو $\frac{1}{sec}$

مثال3:

أشعة فوق بنفسجية طولها الموجي Å 3500 تسقط على سطح بوتاسيوم. أقصى طاقة للإلكترونات الضوئية تساوي 1.6 eV.

احسب دالة الشغل للبوتاسيوم؟

الحل:

من معادلة (5-1)

$$K.E = h\nu - \phi$$

$$\therefore \varphi = h\nu - k.E$$

نحسب أولاً قيمة $h\nu$

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6.63\times10^{-34}\ J.s)(3\times10^{8}\ m/s)}{(3500\times10^{-10}\ m)}$$

ولتحويل هذه القيمة من الجول للإلكترون فولت

$$\therefore \varphi = 3.eV - 1.6\,eV = 1.95\,eV$$

مثال: عند تعرض سطح مادة الليثيوم للإشعاع، فإن الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة $2.935\times10^{-19}\ J$ وذلك إذا كانت $\lambda = 300.0mm$.

إما إذا كانت λ = فإن الطاقة الحركية تساوي $1.28\times10^{-19}\ J$

احسب (a) ثابت بلانك؟

(b) عتبة التردد؟

(c) الشغل؟

الحل: من معادلة (5-1) في حالة الطول الموجي الأول والطول الموجي الثاني نتحصل على $(K.E)_1 - (K.E)_2 = h(\nu_1 - \nu_2) = hc\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right)$

بالتعويض: $2.935\times10^{-19}\ J - 1.280\times10^{-19}\ J = h\,(3\times10^{8}\ m/s)\left[\frac{1}{3\times10^{-9}\ m} - \frac{1}{400\times10^{-9}\ m}\right]$

$$\therefore h \frac{1.655\times10^{-19}\ J}{2.498\times10^{14}\ s^{-1}} = 6.625\times10^{-34}\ J.S$$

(b) لحساب عتبة التردد، نأخذ الطول الموجي (مثلاً) $\lambda = 300\,nm$

$$\therefore\ \ = h\nu - h\nu_\circ$$

$$\therefore\ 2.935\times10^{-19}\ J = \frac{hc}{300\times10^{-9}\ m} - h\nu_\circ$$

وبالتعويض عن قيم c,h نجد أن قيمة $\nu_\circ$

$$\nu_\circ = 5.564\times10^{14}\ Hz$$

(٢) دالة الشغل تحسب مباشرة من العلاقة $\phi = h\nu_\circ$

$$= 3.687\times10^{-19}\ J$$

$$= \frac{3.687\times10^{-19}\ J}{1.6\pm\times10^{-19}\ \frac{J}{eV}} = 2.30/eV$$

مثال 5:

احسب الطول الموجي لكرة كتلتها 0.14 kg وسرعتها 40 m/s وقارن هذا الطول الموجي مع طول موجة إلكترون سرعته 1.00% من سرعة الضوء؟

الحل:

نوجد أولاً كمية الحركة للكرة

$$p = m\upsilon = (0.14\,kg)(40\,m/s) = 5.6\,kg.m.s^{-1}$$

الطول الموجي λ حسب معادلة ديبرولي

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times10^{-34}\,J.s}{5.6\,kg\,ms^{-1}} = 1.2\times10^{-34}\,m \quad !!!$$

لاحظ أن هذا الطول الموجي متناهي في الصغر

نوجد الآن كمية حركة الإلكترون

$$p = m_e v = (9.1\times10^{-31}\,kg)(2.998\times10^{6}\,ms^{-1})$$

(لاحظ أن السرعة v للإلكترون هي 1% من سرعة الضوء كما هو معطى في السؤال).

$$\therefore p = 2.73\times10^{-24}\,kg.m.s^{-1}$$

طول موجة دبيرولي للإلكترون.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times10^{-34}\,J.s}{2.73\times10^{-24}\,kg.m.s^{-1}} = 2.43\times10^{-10}\,m = 243\,pm$$

(حيث pm يساوي $10^{-12}\,m$).. وهذه القيمة 243 مقارنة للأبعاد الذرية..

من خلال هذه القيم، يتضح لنا أن طول موجة دبيرولي للإلكترون مقاربة لطول موجة الأشعة السينية. وهذا يعني أن الإلكترون سيسلك كما لو كان أشعة سينية!!.

أما بالنسبة للكرة فإن طول موجة دبيرولي لها قصير جداً مقارنة بالأبعاد الذرية...

Q1) إذا علمت أن كثافة الإشعاع تعطى بالمعادلة $u(\nu,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1}$

(a) احسب كثافة الطاقة في مدى طول موجي $\Delta\lambda$، أي $u(\lambda,T)d\lambda$؟

(b) استخدم النتيجة في جزء (a) لإيجاد قيمة $\lambda=\lambda_{max}$ والتي عندها تكون كثافة الإشعاع أقصى ما يمكن؟

(c) وضح أن λ_{max} يمكننا كتابتها على الصيغة $\lambda_{max}\frac{b}{T}$، ولحسب قيمة b في حالة سطح الشمس علماً بأن درجة حرارة سطح الشمس تساوي 5620k؟

(تنبيه: حل المعادلة $s-x=se^{-x}$ بالرسم البياني).

(d) ينبعث من أشد النجوم حرارة (نجم الشِّعري Sirius) طيف إشعاع الجسم الأسود والذي له $\lambda_{max}=260nm$. احسب درجة حرارة سطح هذا النجم؟

(e) إذا علمت أن متوسط درجة حرارة سطح الأرض 288 k. اسحب الطول الموجي لأقصى كثافة إشعاع للجسم الأسود للأرض. حدد لأي جزئ من الطيف يقابل هذا الطول الموجي؟

Q2) أقصى طاقة حركية لإلكترونات منبعثة من سطح ألومنيوم تساوي 2.3 eV وذلك عند تعرض هذا السطح لأشعة ذات طول موجي 2000Å. أما عند تعرض السطح لأشعة طولها الموجي 2580 Å فإن الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة تساوي 0.9 eV. احسب قيمة ثابت بلانك ودالة الشغل للألمونيوم؟

Q3) احسب (a) الطول الموجي والطاقة الحركية لإلكترون مُعَجَّل تحت تأثير فرق جهد 100 V و (b) طاقة الحركة الإلكترون له طول موجي ديبرولي 200 pm (حيث $1\ pm = 10^{-12}\ m$)؟

Q4) أشعة X استطارت بإلكترون ساكن. احسب طاقة أشعة X الساقطة إذا علمت أن طول موجة الأشعة المستطارة عند زاوية 60° تساوي $0.035\ \mathring{A}$؟

Q5) المسافة بين مستويين متجاورين من المستويات البلورية يراد قياسها باستخدام أشعة X طولها الموجي 0.5 Å والتي تم قياسها عند زاوية 5°. احسب قيمة المسافة بين هذين المستويين؟ عند أي زاوية يمكننا قياس القيمة الثانية؟

إجابات الأسئلة: الإجابة الأخيرة من كل سؤال:

Q1) (a) $u(\lambda,T)=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}(e^{hc/\lambda kT}-1)^{-1}$

(b) نظري $\lambda_{max}=b/T$ المطلوب إثبات القانون

(c) $\lambda_{max}=5160\,\mathring{A}$

(d) $T=1.12\times10^{4}\,k_{1}$

(e) $\lambda=1.01\times10^{-5}\,m$

(Q2) $W=3.92\ eV$

(Q3) $K.E=6.02\times10^{-18}\ J$

(Q4) $E=5.4\times10^{5}\ eV$

(Q5) $\theta=10^{\circ}$

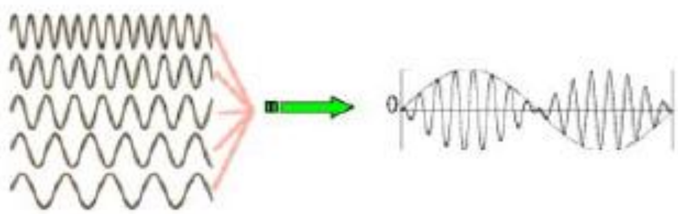
الفصل الثاني

الصفات الاولية للميكانيك الكمي

1. مقدمة:

يبدو من خلال دراسة سرعة المجموعة أن الموجة المرافقة للجسيم ليست جيبية بل تراكب عدة موجات جيبية متقاربة التردد(حزمة أمواج) لتعطي دالة مركبة ، يمكن تحليل حزمة الأمواج تلك وفقا لتحليل فورييه حيث يمكن تحليل أي دالة دورية إلى مجموع دوال جيبية وفق آلية رياضية (راجع الرياضيات للفيزيائيين) يمكن من خلالها التعرف على الدوال الجيبية التي شكلت الدالة الدورية ،أي أن الدالة الموجية التي سنتعامل معها مستقبلا هي حزمة الأمواج (مجموعة الأمواج المتراكبة) ،يمكن كتابة ذلك بالشكل:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \ldots\ldots\psi_n \qquad (1)$$



الشكل (1): تراكب عدة موجات تعطي نبضة مغلفها يمثل سعة الدالة الموجية

مثال تراكب موجتين متقاربين في التردد والعدد ألموجي:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)\\ \Psi_1(x,t) &= \sin(kx - \omega t)\\ \Psi_2(x,t) &= \sin((k+\Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t)\end{aligned} \qquad (2)$$

وجمع الدالتين يعطي:

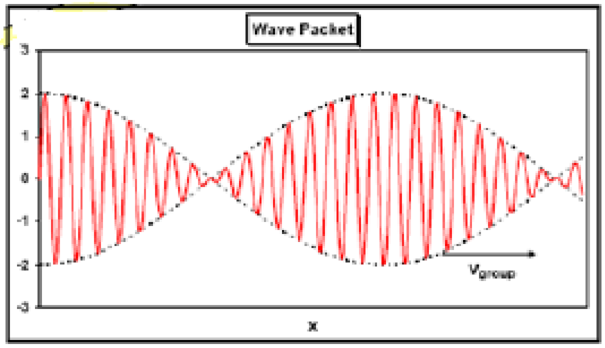
$$\Psi(x,t) = 2\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\sin\left(\frac{2k+\Delta k}{2}x - \frac{2\omega + \Delta\omega}{2}t\right) \qquad (3)$$

$$\sin A + \sin B = 2\cos(\tfrac{1}{2}(A-B))\sin(\tfrac{1}{2}(A+B)) \qquad (4)$$

Now suppose that $\Delta k << 2k$ and $\Delta\omega << 2\omega$ so that

$$\Psi(x,t) \approx 2\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\sin(kx - \omega t) = P(x,t)\sin(kx - \omega t). \qquad (5)$$

العلاقة (5) تمثل الدالة الموجية الجديدة حيث P(x,t) يمثل سعة الموجة ويلاحظ أنها تمثل موجة جيبية تغلف حزمة الأمواج المتراكبة(الشكل 2).



الشكل (2): تراكب (تداخل) موجتين

2. <u>المعلومات التي تحويها الدالة الموجية المرافقة للجسيم المادي وفق المنظور الجديد:</u>

نستفيد هنا من الدالة الموجية للموجة الكهرومغناطيسية باعتبار أن الفوتون يمثل الجانب المادي للموجة والتي نحصل عليها من حل المعادلة التفاضلية الموجية للفوتون (راجع الفيزياء النظرية والمعادلات التفاضلية الجزئية) وتكتب بالشكل:

$$\nabla^2 \phi(r,t) = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi(r,t)}{\partial^2 t}$$

$$\phi(r,t) = \mathrm{A}\, e^{i(\vec{K}.\vec{r} - \omega t)} \qquad (6)$$

المعادلة (6) دالة مركبة (عقدية)تحوي وصفا موجيا لأنها تحوي متجهة الموجة والتردد الزاوي (لاحظ أن **A** تمثل سعة الموجة الموصوفة أعلاه)،ويمكننا استخدام العلاقات التي تربط الخواص الموجية مع الخواص المادية من العلاقتين :

$$\vec{P} = \hbar \vec{k} \quad \Rightarrow \vec{k} = \frac{\vec{P}}{\hbar}$$

$$E = \hbar \omega \quad \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \qquad (7)$$

وبتعويض (7) في (6) نحصل على دالة موجية تحوي في طياتها وصفا ماديا وهو ما نريده هنا بتمثيل دالة موجية تعبر عن حركة جسيم مادي وستعطيها العلاقة التالية:

$$\psi(r,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r} - Et)} \qquad (8)$$

العلاقة (8) هي حل لمعادلة شرودينجر ،أي يجب أن نحصل عليها من حلول معادلة شرودينجر لاحقا ، ولكننا هنا نبحث عن أهميتها وماذا تقدم لنا من معلومات عن الجسيم الذي ترافقه وتتحرك معه وبسرعته؟؟؟؟؟

يفترض بالدالة الموجية أن تعطينا كافة المعلومات الفيزيائية المتعلقة بطاقة الجسم وكمية حركته وهذه أول ميزة لهذه الدالة الموجية. والفقرات اللاحقة تعطي الميزات الأخرى.

3. احتمال وجود الجسيم في مكان ما:

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

$$dp = \left|\psi^2(r,t)\right| dv = \psi(r,t)\psi^*(r,t)dv \qquad (9)$$

حيث dp احتمال تواجد الجسيم بالحجم dv ويأخذ دوما قيما حقيقية.

في العلاقة (9) عند تقسيم الطرفين على عنصر الحجم نحصل على أبعاد كثافة نسميها كثافة الاحتمال (probability density)كما في العلاقة التالية:

$$\rho(r,t) = \frac{dp}{dv} = \left|\psi^2(r,t)\right| \qquad (10)$$

أما احتمال تواجد الجسيم في الفضاء كله فإننا نكامل العلاقة (9) على الفضاء كله الممتد من اللانهاية والذي يعبر عن مجموع احتمالات تواجد الجسيم في كل عناصر الحجم المتراصة حول بعضها البعض مكونة الفضاء اللانهائي ، وهنا نحن متأكدون من تواجد الجسيم في هذا الفضاء المفروض وبالتالي فان احتمال تواجد الجسيم سيكون(100%=1)،ونكتب ذلك بالعلاقة الرياضية التالية:

$$\int_0^1 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi^2(r,t)\right| dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(r,t)\psi^*(r,t)\,dv = 1 \qquad (11)$$

إن العلاقة التي تحقق الشرط في العلاقة (11) تسمى دالتها الموجية بالدالة المعايرة أو المنظمة وتسمى العلاقة بعلاقة المعايرة أو شرط لتنظيم (normalization condition)،وإذا كانت الدالة ليست معايرة فإننا نضربها بثابت بحيث تتحقق العلاقة (11) كما يلي:

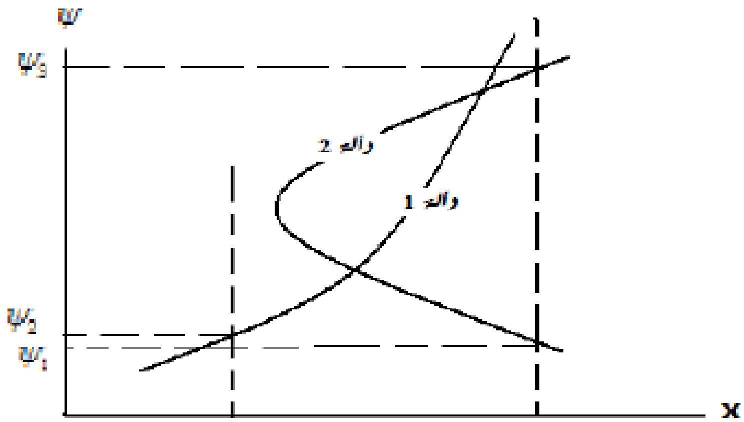
$$\int_0^1 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(r,t)\right|^2 dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(r,t)\psi^*(r,t).dv = N \neq 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(r,t)\psi^*(r,t).dv = N \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\left|\psi(r,t)\right|^2}{N}.dv = 1$$

$$\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(r,t)\right|^2 .dv = 1 \qquad (12)$$

يشترط بالدالة الموجية التي تحقق شرط المعايرة مايلي :

- أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة أي أن كل قيمة محددة للموضع يقابلها قيمة وحيدة للدالة الموجية فقط وليس أكثر، وهذا شرط أساسي لان الدالة أحادية القيمة تعطي احتمال واحد لتواجد الجسيم بينما المتعددة القيمة تعطي أكثر من احتمال لتواجد الجسيم وهذا مرفوض لان الجسيم لايمكن أن يتواجد في أكثر من مكان في نفس اللحظة والعكس أيضا لايمكن لجسيم أن يكون له دالتان مختلفتان في نفس المكان ، انظر الشكل (3) يمثل دالتين أحداهما أحادية القيمة والثانية متعددة القيمة.



الشكل (3) يمثل دالتين أحداهما أحادية القيمة والثانية متعددة القيمة

- أن تكون الدالة الموجية متصلة (continuous) وكذلك مشتقاتها متصلة ، لأن كون الدالة غير متصلة (عندها انقطاع في الدالة في مكان ما) يصبح الجسيم غير في معرف في منطقة الانقطاع .

- يجب على الدالة أن تكون معرفة في كل نقطة ولا يجوز ان تكون قيمتها مالانهاية لان احتمال تواجد الجسيم يصبح مالانهاية وهو أمر غير مقبل فيزيائيا.

4.الدوال المميزة (الخاصة)(eigenfunction) والقيم المميزة(الخاصة)(eigenvalue):

تصف الدالة الموجية في ميكانيكا الكم الحالة الكمومية إما لأحد الجسيمات الأولية أو لمجموعة من الجسيمات الأولية في الفراغ ،وتعين احتمال تواجده أو تواجدها في مكان معين. والدالة الموجية في ميكانيكا الكم تكون عادة حل لمعادلة مأخوذة عن معادلة شرودينجر.ويمكن للمعادلة الموجية أن تصف الحالة الكمومية لجسيم أولى ، واقع تحت تأثير خارجي (مثل حركة الإلكترون حول النواة في الذرة) أو حالة الإلكترون الحر ، كما يمكن صياغة المعادلة الموجية لمجموعة من الجسيمات لدراسة حركتها أو تفاعلاتها طبقا لميكانيكا الكم .

وفي حال الإلكترون في ذرة الهيدروجين مثلا نحن بحاجة لمعرفة وضع الإلكترون بالنسبة للنواة ،وبما أن الإلكترون يتوضع في مستويات طاقة منفصلة (نظرية بور مثلا) فكل مستوي طاقة يوصف بقيمة محددة للطاقة وفق علاقة بور :

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}$$
$$n = 1, 2, 3, 4........ \quad (13)$$

العلاقة (13) تعطينا قيما محددة للطاقة نسميها القيم الخاصة ، والذي يحدد احتمالية تواجد الإلكترون على تلك القيم الخاصة هو الدالة الموجية التي تخص ذلك الإلكترون في ذلك المكان ولذلك تسمى بالدالة الخاصة(المميزة) لأنها تخص الإلكترون الموجود على مستوي الطاقة المحدد بالرقم n.

وحلول معادلة شرودينجر (ستعالج لاحقا)لا تقبل أي قيمة للطاقة بل بعض القيم $E_1, E_2, E_3......E_n$ والتي من أجل كل قيمة منها يتحقق شرط المعايرة والتي تسمى بالقيم الخاصة(المميزة) والدالة الموجية الموافقة لتلك القيمة تسمى القيمة الخاصة كما ذكرنا أعلاه،أي:

$$E_1, E_2, E_3, ...E_n$$
$$\psi_1, \psi_2, \psi_3, ...\psi_n \qquad (14)$$

(راجع حل معادلة شرودينجر في بئر جهد)

5. شرط التعامد (orthogonality condition):

عندما يكون لدين قيمتين خاصتين يعودان إلى دالتين خاصتين فان تكامل جداء أحد هاتين الدالتين في مرافق الدالة الأخرى ممدا في المكان كله يساوي الصفر ، وإذا تحقق هذا الشرط فإننا نسميه شرط التعامد ، ويكتب رياضيا بالشكل:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \psi_m^* \, dv = 0$$
$$n \neq m \qquad (15)$$

وشرط العلاقة (15) أن يكون لكل دالة مميزة قيمة مميزة تختلف عن الأخرى،وهذا يعطينا تصور أخر لأهمية الدالة الموجية في ميكانيكا الكم وتأكيد آخر على القيم المميزة والدوال المميزة المرافقة لها .

يمكننا دمج شرط المعايرة وشرط التعامد في علاقة رياضية واحدة كما يلي :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \psi_m^* dv = \delta_{nm}$$

$$when \quad n = m \Rightarrow \delta_{nn} = 1 \Rightarrow normalization\ condition$$

$$when \quad n \neq m \Rightarrow \delta_{nm} = 0 \Rightarrow orthogonality\ condition \qquad (16)$$

الرمز **δ_{nm}** يسمى دلتا كرونيكر (Kronecker) وهو يساوي الواحد عندما (n=m) وهو شرط المعايرة، ويساوي الصفر عندما(n ≠ m) وهو شرط التعامد.

بهذه المحاضرات الأربع نكون قد أعطينا مقدمة ممتازة لنبدأ بعدها باستنتاج معادلة شرودينجر وحل بعض الأمثلة عليها.ولا ننسى أن معادلة شرودينجر وحلوها يجب أن لا تخالف محتوى المحاضرات السابقة التي تدعمها بشكل مباشر.

معادلة شرودينجر

Schrödinger's Equation

1. مقدمة:

تعرف معادلة شرودينجر بأنها المعادلة التفاضلية الموجية(من المرتبة الثانية) التي يعطي حلها الدالة الموجية التي تصف سلوك الجسيمات المادية(الواقعة في مجال جهد ما) اعتمادا على طبيعتها المادية.ويشترط بالدارس أن يكون على معرفة بالمعادلات التفاضلية الجزئية وبمبادئ التفاضل والتكامل والمؤثرات بالرياضيات ،وفي البداية سيعتقد الدارس أننا ندرس مواضيع رياضيات معقدة جدا لأنك بحاجة إلى كل الرياضيات ،ومع التعامل المستمر مع ميكانيكا الكم ستشعر أنك بحاجة إليه دوما بل ربما سيصبح صديقك المخلص الذي يلبي لك كل ما تحتاج إليه في الفيزياء المعاصرة.

2. معادلة شرودينجر العامة(التابعة للزمن والموضع):

للحصول على معادلة شرودينجر يتم الاعتماد على عدة طرق وسوف أذكر البعض منها وعلى الطالب أن يجتهد في الاستنتاج لأكثر من طريقة لكي يتمكن من التعامل مع هذه المعادلة التي سترافقنا في ميكانيكا الكم بشكل دائم فهي الهواء الذي يستنشقه هذا الفرع الحساس من فروع الفيزياء، من هذه الطرق:

A. من الهاملتوني الكلاسيكي للطاقة :

يعرف الهاملتوني في الفيزياء الكلاسيكية بأنه الطاقة الكلية وكلاسيكيا تعرف الطاقة الكلية بأنها مجموع الطاقة الحركية وطاقة الوضع ، وتعطى بالعلاقة التالية :

$$E = T + U(r) = \frac{1}{2}mv^2 + U(r) = \frac{m^2v^2}{2m} + U(r)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(r) \qquad (1)$$

نحتاج من المعادلة (1) قيمة الطاقة الكلية E وكمية الحركة p ، للجسم المادي الموصوف بفرضية دوبري ، وهذه المعلومات من المفترض أن نجدها بالدالة الموجية التي تصف الجسيم (راجع المعنى الفيزيائي للدالة الموجية)، والتي أعطيت سابقا بالعلاقة التالية :

$$\psi(r,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r} - Et)} \qquad (2)$$

والمهم جدا جدا أن نفتش عن طريقة رياضية مناسبة نطبقها على العلاقة (2) نحصل من خلالها على قيمتي الطاقة وكمية الحركة، ويلاحظ أن الطريقة المناسبة هي تفاضل العلاقة (2) بالنسبة للموضع للحصول على كمية الحركة وللسهولة نأخذ حالة البعد الواحد(x) وبعد ذلك نعمم على الأبعاد الثلاثة ،كما يلي:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = A\,\frac{ip}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p.x-Et)} = \frac{ip}{\hbar}\psi(x,t) \qquad (3)$$

نشتق العلاقة (3) مرة ثانية للحصول على مربع كمية الحركة p في العلاقة (1) وليس تربيع العلاقة (3) كما يلي:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = A\,\frac{ip}{\hbar}.\frac{ip}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p.x-Et)} = \frac{-p^2}{\hbar^2}\psi(x,t)$$

$$p^2 = \frac{-\hbar^2}{\psi(x,t)}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad (4)$$

ونشتق العلاقة (2) بالنسبة للزمن للحصول على الطاقة E ،كما يلي:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = A\,\frac{-iE}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p.x-Et)} = \frac{-iE}{\hbar}\psi(x,t) \Rightarrow$$

$$E = \frac{-\hbar}{i\,\psi(x,t)}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \qquad (5)$$

نعوض العلاقتين (4) و (5) في العلاقة (1) فنجد:

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

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

$$\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x,t) \qquad (6)$$

وبكتابة العلاقة (6) بالأبعاد الثلاثة ، ووضعها كما نجدها بالكتب (بتبديل أوضاع الحدود ،الحد اليميني يصبح يساري والعكس):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(r,t)}{\partial r^2} + U(r)\psi(r,t) = \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} \qquad (6)$$

تمثل العلاقة (6) معادلة شرودينجر العامة ،وهي كما تبدو معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية ،اشتقت من معالجة الدالة الموجية للجسيم المادي ،ومن المفترض أن حلها يعطي الدالة الموجية المتمثلة بالعلاقة(2)، ويفترض بهذه المعادلة أن تعطي وصفا كاملا للجسيم المادي (المجهري)بشكل صحيح .

ويمكن كتابة العلاقة (6) بلغة الطاقة في ميكانيكا الكم كما يلي:

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

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

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

$$\hat{E}=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{H}\psi(r,t)=\hat{E}\psi(r,t) \qquad (7)$$

تمثل العلاقة (7) معادلة شرودينجر العامة بلغة ما يسمى بالمؤثرات ،يسمى المقدار $\hat{H}$ هاملتوني الطاقة بلغة ميكانيكا الكم أو مؤثر الهاملتوني بلغة المؤثرات(راجع المؤثرات) ويسمى المقدار $\hat{E}$ مؤثر الطاقة الكلية،أي أن الطاقة الكلية بلغة المؤثرات تساوي مؤثر الهاملتوني.

B. من المعادلة التفاضلية الموجية للفوتونات:

من المعلوم أن المعادلة التفاضلية الجزئية للفوتونات (الأمواج الكهرومغناطيسية)لها الشكل التالي :

$$\nabla^2\varphi(r,t)=\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi(r,t)}{\partial t^2} \qquad (8)$$

ويعطي حل هذه المعادلة التفاضلية الدالة الموجية التالية:

$$\varphi(r,t)=B\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-Et)} \qquad (9)$$

العلاقة (9) معادلة موجة تعطي وصفا ماديا للفوتون ، وبما أن الفوتون يمثل الشكل المادي من المثنوية(موجة-جسيم) وفق فرضية دوبري،إذن يمكن اعتبار العلاقة (8) معادلة تفاضلية تعطي الوصف المزدوج للجسيم المادي بعد استبدال سرعة الضوء c بالسرعات المعممة للجسيم المادي v والتي لايمكن لسرعاتها أن تصل لسرعة الضوء(نظرية اينشتاين) ، وبالتالي يمكن ببعض المعالجات الرياضية البسيطة الحصول على معادلة شرودينجر بالمفهوم اللانسبيوي (سرعة الجسيمات اقل من سرعة الضوء) كما يلي :

$$\nabla^2\psi(r,t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \qquad (10)$$

يفترض بالمعادلة التفاضلية (10)أن تعطينا حلا يتمثل بالدالة الموجية للجسيم المدروس الذي سرعته أصغر من سرعة الضوء ولها الشكل:

$$\psi(r,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-Et)} \qquad (11)$$

ولا نستغرب أن العلاقة (10) تمثل معادلة شرودينجر العامة ويمكن إرجاعها للعلاقة (6) أو (7) وذلك من خلال العمليات الرياضية التالية:

- نشتق العلاقة (11) مرتين بالنسبة للزمن فنجد:

$$\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} = A\,\frac{-iE}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(p.r-Et)} = \frac{-iE}{\hbar}\psi(x,t) \Rightarrow$$
$$\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial t^2} = A\,\frac{-iE}{\hbar}.\frac{-iE}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(p.r-Et)} = \frac{-E^2}{\hbar^2}\psi(r,t) \qquad (12)$$

- نعوض العلاقة (12) في العلاقة (10) فنجد :

$$\nabla^2\psi(r,t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$
$$\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial t^2} = \frac{-E^2}{\hbar^2}\psi(r,t) \Rightarrow$$
$$\nabla^2\psi(r,t) = \frac{1}{v^2}\frac{-E^2}{\hbar^2}\psi(r,t) \qquad (13)$$

- في العلاقة (13) لدينا:

$$E = \hbar\omega \Rightarrow \frac{E^2}{\hbar^2} = \omega^2$$
$$\frac{1}{v^2}\frac{E^2}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{\omega^2}{v^2} = k^2 \qquad (14)$$

- نربط العلاقة (14) (حيث kالعدد ألموجي راجع سرعة الطور)بعلاقة الطاقة الكلية كما يلي:

$$E = T + U(r) = \frac{1}{2}mv^2 + U(r) = \frac{m^2v^2}{2m} + U(r)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(r) \Rightarrow$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right] \qquad (15)$$

- نعوض (14) في (13) وبعد ذلك نعوض (15) في (13) فنجد :

$$\nabla^2\psi(r,t) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]\psi(r,t) \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + U(r)\psi(r,t) = E\psi(r,t) \qquad (16)$$

العلاقة (16) عين العلاقة (6) بعد استبدال الجانب الأيمن بما يساويه في العلاقة (5) أي:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + U(r)\psi(r,t) = \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} = E\psi(r,t) \qquad (17)$$

العلاقة (17) تمثل معادلة شرودينجر العامة وتصف سلوك الجسيمات المادية بشكل صحيح والتي تكتب بصورة المؤثرات :

$$\hat{H}\psi(r,t) = \hat{E}\psi(r,t) = E\psi(r,t) \qquad (18)$$

3. معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن:

في كثير من الحالات لانحتاج الزمن في معادلة شرودينجر ،فعند دراسة مستويات الطاقة للإلكترون المرتبط بنواة الذرة فان تلك الطاقة تتحدد ببعد الإلكترون عن النواة ولا تتعلق بالزمن ،وان أمواج الجسيم المادي المرتبط (واقع في بئر جهد) تشكل ما يشبه الأمواج المستقرة والتي تتعلق طاقتها بالموضع فقط.

في هذه الحالة ووفقا لقواعد فصل المتغيرات المستخدمة في حل المعادلات التفاضلية التي تحوي أكثر من متغير(الجزئية) فإننا نستطع كتابة الدالة الموجية كجداء دالتين أحداهما تتعلق بالموضع والأخرى تتعلق بالزمن ، وبالاستفادة من هذه الخاصة نستطع أن نستنتج المعادلة التفاضلية المستقلة عن الزمن كما في المعالجة الرياضية التالية:

- في النظام الآسي يمكن كتابة أي دالة كجداء دالتين بالشكل:

$$e^{y+x}=e^{y}.e^{x}=Y(y).X(x) \qquad (19)$$

- بالاستفادة من العلاقة (19) يمكن كتابة الدالة الموجية بالشكل التالي :

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

$$\psi(r,t)=A\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r})}.e^{\frac{i}{\hbar}(-Et)}\Rightarrow$$

$$\psi(r)=A\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r})}$$

$$\phi(t)=e^{\frac{i}{\hbar}(-Et)}$$

$$\psi(r,t)=\psi(r).\phi(t) \qquad (20)$$

- نعوض العلاقة (20) في العلاقة (16) فنجد

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r).\phi(t)+U(r)\psi(r).\phi(t)=E\,\psi(r).\phi(t)$$

$$-\phi(t)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+U(r)\psi(r).\phi(t)=E\,\psi(r).\phi(t) \qquad (21)$$

- بالاختزال من الطرفين على الدالة المتعلقة بالزمن $\phi(t)$ في العلاقة(21) ، لان عملية التفاضل لاتخص الزمن بل الموضع نحصل على معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن بالشكل التالي :

$$-\phi(t)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+U(r)\psi(r).\phi(t)=E\,\psi(r).\phi(t)\Rightarrow$$

العلاقة (22) تمثل معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن وسوف نتعامل مع هذه المعادلة في ميكانيكا الكم 1 بالكامل والكثير من المواضيع في ميكانيكا الكم 2.

4. كيف نتعامل مع معادلة شرودينجر ونجهزها للحل؟ (بعض الأوضاع الخاصة):

لكي نحل معادلة شرودينجر لابد من البحث وإيجاد المقادير الفيزيائية التالية:

أ- أول عمل نقوم به هو إيجاد طاقة الوضع **U(r)**، وسنجد من خلال الأمثلة أدناه كيفية إيجادها.

ب- حل المعادلة التفاضلية وإيجاد الدالة الموجية $\psi(r)$ التي تحقق الشروط الحدية (راجع الفيزياء النظرية- المعادلات التفاضلية الجزئية).

ت- ايجاد قيم الطاقة E المتوافقة مع الشروط الحدية.

مثال 1: معادلة شرودينجر لجسيم حر.

في الجسيم الحر مجموع القوى الخارجية الموثرة علية تساوي الصفر وهذا يعني أن طاقة الوضع تساوي الصفر أي:

$$\sum_i F_i = 0$$

$$U(r) = -\int \sum_i F_i \, dr = 0 \qquad (23)$$

ومنه نكتب ونجهز معادلة شرودينجر للحل كما يلي:

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

$$U(r) = 0 \Rightarrow$$

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

$$\nabla^2\psi(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(r) = 0 \qquad (24)$$

العلاقة (24) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية نحلها وفق قواعد حل المعادلات التفاضلية ونجد من خلالها الدالة الموجية والطاقة بحيث تحقق الشروط الحدية (الشروط المفروضة على الحل والتي يفرضها وضع الجسيم فيما اذا كان حرا او مقيدا).

مثال 2: معادلة شرودينجر لجزيئة(ذرة) تهتز (تتذبذب) بحركة توافقية على المحور x:

كل الجزيئات أو الذرات في المواد تهتز حول وضع التوازن ، وبفرض جزيئة كتلتها m تهتز على المحور x حول وضع توازنها الذي نعتبره مبدأ الإحداثيات ،وللسهولة نفرض أن الحركة اهتزازية توافقية ومن خلال هذا الوضع نستطيع إيجاد مستويات الطاقة التي يمكن ان تتواجد بها الجزيئة باستخدام معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن على المحور x للتبسيط.

أولا نوجد قيمة طاقة الوضع للمذبذب التوافقي على المحور xكما يلي:

$$U(x) = -\int_0^x F\,dx = -\int_0^x -kx\,dx = k\int_0^x x\,dx$$

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 \qquad (25)$$

ثانيا نعوض العلاقة (25) في معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن في حال البعد الواحد x كما يلي:

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

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x) \qquad (26)$$

المعادلة (26) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية والمطلوب حلها لإيجاد الدالة الموجية والطاقة كما ذكرنا أعلاه.

مثال 3 : معادلة شرودينجر لإلكترون ذرة الهيدروجين:

تتألف ذرة الهيدروجين من بروتون حوله إلكترون ومعلوم أن طاقة الوضع للإلكترون حول النواة تعطى من خلال قانون كولوم بالعلاقة التالية :

$$U(r) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (27)$$

حيث r بعد الإلكترون عن النواة مع العلم أننا يجب أن نستخدم الأبعاد الثلاثة r(x.y.z) ، نعوض العلاقة (27) في معادلة شرودينجر كما يلي:

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

$$U(r) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Rightarrow$$

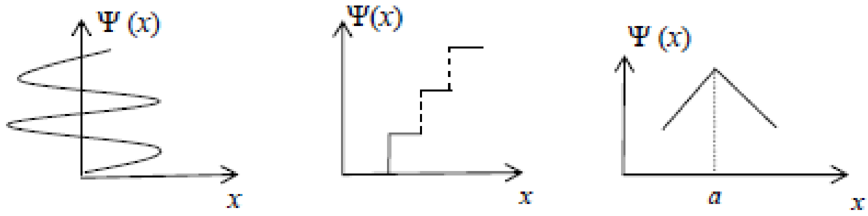
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (28)$$

المعادلة (28) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية والمطلوب إيجاد الدالة الموجية والطاقة التي تتفق مع الشروط الحدية،والحل ليس سهلا وستجدون صعوبة بالغة التعقيد في الوصول إلى الحل .

وفي الفصل الثالث سوف نناقش التطبيقات اعلاه بشكل مفصل.

امثله محلوله :

مثال: وضح، لماذا لا تحقق الأشكال الآتية شروط ميكانيكا الكم؟



(c) (b) (a)

الحل: الأشكال السابقة لا تحقق شروط ميكانيكا الكم للأسباب التالية:

(a) الميل (المشتقة الأولى) للدالة $\Psi(x)$ غير متصل عند النقطة $x=a$.

(b) الدالة $\Psi(x)$ غير متصلة.

(c) الدالة $\Psi(x)$ متعددة القيم حيث إن لكل قيمة x يوجد عدد لا نهائي من الدوال.

مثال: في المدى المحدد بين قوسين، وضح لماذا لا تحقق الدوال الموجية الآتية شروط ميكانيكا الكم؟

$$(a) \quad \psi_1 = e^{-x} \quad (-\infty, 0),$$

$$(b) \quad \psi_2 = e^{-|x|} \quad (-\infty, \infty),$$

$$(c) \quad \psi_3 = \frac{1}{x-4} \quad (0,5).$$

الحل:

(a) عندما $x \to -\infty$ فإن الدالة $\psi_1 \to \infty$ وتصبح غير محددة.

(b) الميل للدالة ψ_2 غير متصل عند النقطة $x=0$.

(c) عندما $x \to 4$ فإن الدالة $\psi_3 \to \infty$ وتصبح غير محددة.

مثال: لموجة عيارية (مصاحبة لجسيم) معرفة في المدى $(0,L)$ بالعلاقة:

$$\psi(x) = c\sin(bx)$$

حيث $b = \pi / L$، احسب:

أ- ثابت العيارية c ،

ب- احتمالية وجود الجسيم في المدى $0 \to 0.5L$ ،

ت- احتمالية وجود الجسيم في المدى $0.25L \to 0.75L$.

الحل:

أ- ثابت العيارية يحسب من التكامل:

$$I = \int_0^L \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)dx = c^2\int_0^L \sin(bx)\sin(bx)dx$$

$$= c^2\int_0^L \sin^2(bx)dx = \frac{c^2}{2}\underbrace{\left| x - \frac{\sin(2bx)}{(2b)}\right|_0^L}_{=L}$$

$$= \frac{c^2}{2}(L)$$

وباستخدام شرط العيارية " $I = 1$ " نجد أن:

$$c^2(\frac{L}{2}) = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{c = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

لحساب احتمالية وجود الجسيم في مدى محدد نستخدم التعريف:

$$\text{Prob. }\{a \le x \le b\} = \int_a^b \psi^*_n(x)\,\psi_n(x)dx = \int_a^b \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$= \frac{2}{L}\int_a^b \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = \left|\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n}\sin(\frac{2n\pi x}{L})\right|_a^b$$

ب- و في المدى $0 \to 0.5L$ ، نحصل على:

$$\text{Prob.}\{0 \le x \le L/2\} = \left|\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n}\sin(\frac{2n\pi x}{L})\right|_0^{L/2}$$

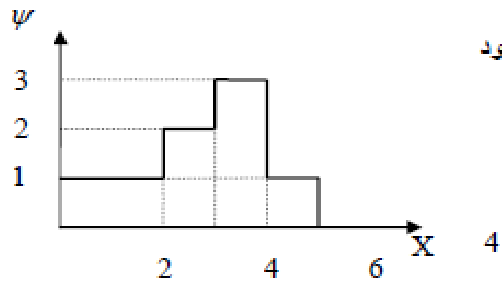
$$= \frac{1}{2} \qquad\qquad \text{(for all } n)$$

ت- و في المدى $0.25L \to 0.75L$ ، نحصل على:

$$\text{Prob. }\{0.25L \le x \le 0.75L\} = \left|\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi}\sin(\frac{2\pi x}{L})\right|_{0.25L}^{0.75L}$$

$$= 0.818$$

مثال: للدالة الموجية المرسومة، احسب احتمالية وجود جسيم في المدى $X=\{2,4\}$.



الحل: بحساب احتمالية وجود جسيم في المدى $X=\{2,4\}$:

$$I=\sum_{i=2}^{4}\psi_i^2=9+4=13$$

ومقارنتها احتمالية وجود جسيم في المدى $X=\{0,5\}$:

$$II=\sum_{i=1}^{5}\psi_i^2=1+1+4+9+1=16,$$

نجد أن:

$$\text{Prob. }\{2\le X\le 4\}=\frac{I}{II}=\frac{\sum_{i=2}^{4}\psi_i^2}{\sum_{i=0}^{5}\psi_i^2}=\underline{\frac{13}{16}}$$

الفصل الثالث

تطبيقات معادلة شرودنجر

I. دراسة حركة جسيم حر (بمعنى أن $V=0$)

معادلة شرودنجر لجسيم حر، في بعد واحد، تكتب على الصورة:

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

$$\Rightarrow\quad \frac{d^2\psi}{dx^2}=-k^2\psi,$$

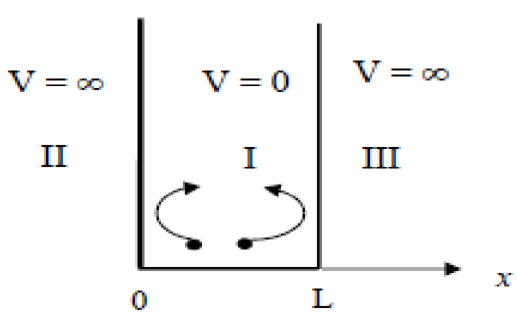
وحلها هو $\psi(x)=A\,e^{\pm ikx/\hbar}$ حيث إن A هو ثابت التكامل و $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$. نلاحظ هنا أن k تأخذ قيماً حقيقية حيث إنها مرتبطة بطاقة الحركة فقط.

II دراسة حركة جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

في هذا المثال سوف ندرس حركة جسيم في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0\le x\le L\\ \infty, & \text{otherwise}\end{cases}\qquad (1)$$

وهذا المثال ينطبق عملياً على حركة إلكترون حر بداخل قطعة معدنية، لها طاقة توتر سطحي يفوق الطاقـة الحركية للإلكترون، وبالتالي فإن الإلكترون يتحرك داخل المعدن ولا يتمكن من الهروب منـه، إلا بإعطائـه طاقة خارجية. ولحل هذه المسألة نلاحظ من شكل (6) أن حركة الجسيم حرة ولكنها مقيدة في المدى $0\le x\le L$ حيث إن الجهد $V=\infty$ خارج هذا المدى هو المسئول عن انعكاس الجسيم من حائل الجهد.



شكل(6) جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

والطريقة المثلى لحل هذه النوعية من المسائل هو اتباع التالي:

أولاً : كتابة معادلة شرودنجر في المنطقة التي يمكن أن يتواجد فيها الجسيم.

من الشكل (6) نجد أن الجسيم يتواجد في المنطقة (I) فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر تأخذ الصورة:

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= E\psi_I \\ \Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= -k^2\psi_I , \end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و m هو كتلة الجسيم و E هي الطاقة الكلية. المنطقتان $(II), (III)$ غير مسموح للجسيم بالانتقال أو بالتواجد فيهما نتيجة الجهد $V = \infty$ بالتالي فإن دالة الموجة تتلاشى عند $x = 0$ و $x = L$، بمعنى أن:

$$\psi_{II}(x = 0) = \psi_{III}(x = L) = 0 .$$

ثانياً: نقترح حلاً للمعادلة (المعادلات) المعطاة في الفقرة الأولى. نلاحظ هنا أن المعادلة(2) تمثل معادلة حركة توافقية بسيطة وحلها إما:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \qquad (3)$$

أو

$$\psi_I(x) = a\,e^{ikx} + b\,e^{-ikx} \qquad (4)$$

حيث $i = \sqrt{-1}$ و a, b, A, B ثوابت تعين بواسطة الشروط الحدودية أو الشروط العيارية.

ثالثاً : اختر أحد الحلول وليكن الحل المعرف بالمعادلة (3).

رابعاً : استخدم الشروط الحدودية للتخلص من الثوابت غير المنطقية. مثلاً الشرط:

$$\psi_I(0) = 0 \qquad (5)$$

يتيح لنا التخلص من الثابت B وتؤول المعادلة (3) إلى الدالة المميزة:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) \qquad (6)$$

خامساً : نبدأ في حساب الثوابت A, k

أ- لحساب الثابت k استخدم الشرط الحدي $\psi_I(x = L) = 0$، بمعنى:

$$\left.\begin{aligned} \because \quad \psi_I(x = L) &= 0 \\ \therefore \quad A\sin(kL) &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (7)$$

حيث n يعرف بأنه العدد الكمي.

ب- لحساب الثابت A استخدم شرط العيارية كالتالي:

$$\left.\begin{aligned} \because \quad \int_0^L |\psi_I|^2\,dx &= 1 \\ \therefore A^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2(k_n x)\,dx}_{\frac{L}{2}} &= 1 \end{aligned}\right\} \Rightarrow A = \sqrt{2/L} \qquad (8)$$

وتصبح الدالة المميزة على الصورة:

$$\psi_I(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x), \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{9}$$

ملاحظات:

1- بمعلومية k_n نستطيع أن نحسب الطاقة الكلية E_n وهي:

$$E_n=\frac{p^2}{2m}=\frac{(\hbar k_n)^2}{2m}=n^2\underbrace{\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)}_{E_1}=n^2E_1, \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{10}$$

وهي قيم مكماة (غير متصلة). وتعتبر القيمة $E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ هي طاقة المستوى الأرضي للجسيم.

2- القيمة $n=0$ أهملت لأنها تعطي حلاً صفرياً للطاقة ومعناه أن الجسيم لا يتحرك. وأيضاً تعطي حلاً صفرياً للدالة ومربعها، أي $|\psi_I(0<x<L)|^2=0$ ، وهو حل غير فيزيائي لأننا نعرف أن الجسيم موجود وله طاقة حركة.

3- القيم السالبة تعطي نمطاً متماثلاً للقيم الموجبة.

4- قيم الطاقة تتناسب مع n^2.

5- المسافة بين مستويات الطاقة "ΔE" تزداد مع زيادة n تبعاً للعلاقة:

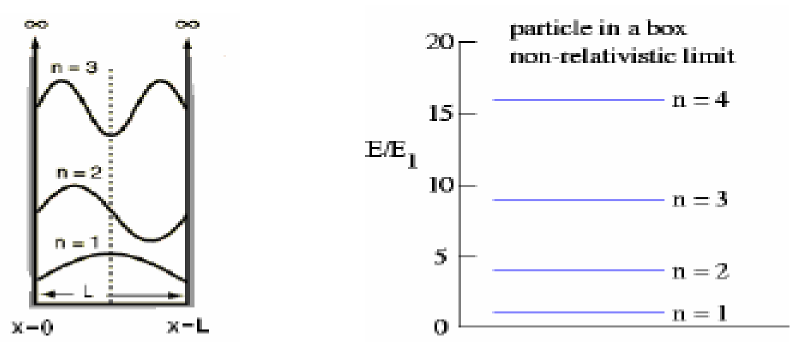
$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=(n+1)^2E_1-n^2E_1=(2n+1)E_1$$

(انظر الشكل $7\!-\!a$)

6- عند حساب متوسط الإزاحة $<x>$ نجد أن:

$$\langle x\rangle=\int_0^L x\,|\psi_I|^2\,dx=\frac{2}{L}\int_0^L x\sin^2(k_nx)dx=\frac{2}{L}\left(\frac{L^2}{4}\right)=\frac{L}{2} \tag{11}$$

ويفسر هذا فيزيائياً بأن كثافة الاحتمال (وأيضاً الدالة) متماثلتان حول مركز الصندوق، أي عند $\frac{L}{2}$. ولهذا فإن احتمالية وجود الجسيم في النصف الأيمن من الصندوق يكون مساوياً لاحتمالية وجوده في النصف الأيسر. (انظر الشكل $7-b$)



(b) (a)

b- الدوال المسموح بها

شكل (7) لجهد الشكل (6) a- الطاقات المسموح بها

7- متوسط كمية الحركة الخطية $\langle \hat{p} \rangle$ تحسب كالتالي:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \psi_I^* \hat{p}\, \psi_I \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(k_n x)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\sin(k_n x)\right)dx = 0 \qquad \textbf{(12)}$$

ويفسر المعادلة (12) فيزيائياً بأن انعدام متوسط كمية الحركة الخطية لا تعني أن الجسيمات لا تتحرك، ولكن تعني أن عدد الجسيمات التي تتحرك للشمال يكون مساوياً لعدد الجسيمات التي تتحرك لليمين. وذلك لأن كمية الحركة الخطية هي كمية متجهة وليست قياسية.

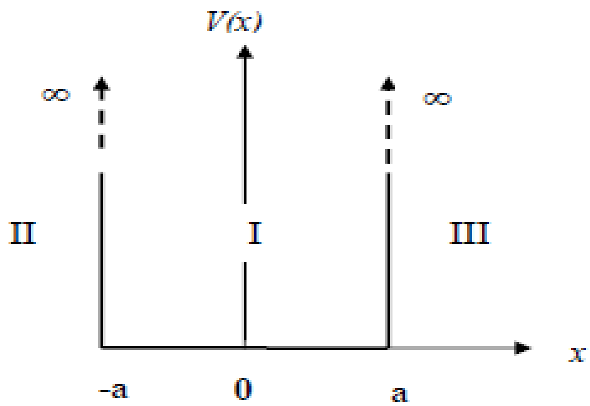
مثال: ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل كما بالشكل ويوصف بالتالي:

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

وأثبت أن

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

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad A = B = \sqrt{\frac{1}{a}}$$



نتيجة لقيم الجهد اللانهائية خارج المنطقة (I)، لذلك ينعدم تواجد الجسيم بالمنطقتين (II)، (III). بالمنطقة (I) نجد أن معادلة شرودنجر غير الزمنية تأخذ الشكل:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I, \qquad \textbf{(1)}$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. الحل العام للمعادلة (1) هو:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \qquad (2)$$

حيث A و B ثوابت تعين من خلال الشروط الفيزيائية. من شروط انعدام الدالة عند الحدود (a) و $(-a)$ نجد أن:

$$\psi_I(a)=0 \quad \Rightarrow \quad A\cos(ka)+B\sin(ka)=0, \tag{3}$$

$$\psi_I(-a)=0 \quad \Rightarrow \quad A\cos(ka)-B\sin(ka)=0 \tag{4}$$

بجمع المعادلتين (3) و (4) ينتج أن:

$$\begin{aligned} &2A\cos(ka)=0 \\ &\Rightarrow \quad A=0 \ \text{ or } \ \cos(ka)=0 \end{aligned} \tag{5}$$

بطرح المعادلتين (3) و (4) ينتج أن:

$$\begin{aligned} &2B\sin(ka)=0 \\ &\Rightarrow \quad B=0 \ \text{ or } \ \sin(ka)=0 \end{aligned} \tag{6}$$

ونحن هنا لا نبغي أن نساوي الثوابت A و B بالصفر، حيث أننا سنحصل على دالة $\psi_I(x)$ غير ذات فائدة فيزيائياً. وأيضاً نحن لا نود وضع الدوال $\sin(ka)$ و $\cos(ka)$ مساوية للصفر لبعض قيم k و E. ولهذا نجد أنه يوجد نوعان من الحلول وهما:

$$A=0 \quad B\neq 0 \quad \Rightarrow \quad \sin(ka)=0, \tag{i}$$

$$B=0 \quad A\neq 0 \quad \Rightarrow \quad \cos(ka)=0 \tag{ii}$$

في النوع الأول نجد أن:

$$\sin(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\pi, 2\pi, 3\pi, \cdots = n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح زوجي. في النوع الثاني نجد أن:

$$\cos(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\frac{\pi}{2}, 3\frac{\pi}{2}, 5\frac{\pi}{2}, \cdots = n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح فردي.

ومنه نصل إلى الخلاصة أن:

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

$$k_n^2=\frac{2mE_n}{\hbar^2}, \qquad \Rightarrow \qquad E_n=\frac{k_n^2\hbar^2}{2m}=n^2\underbrace{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}_{E_1}=n^2E_1$$

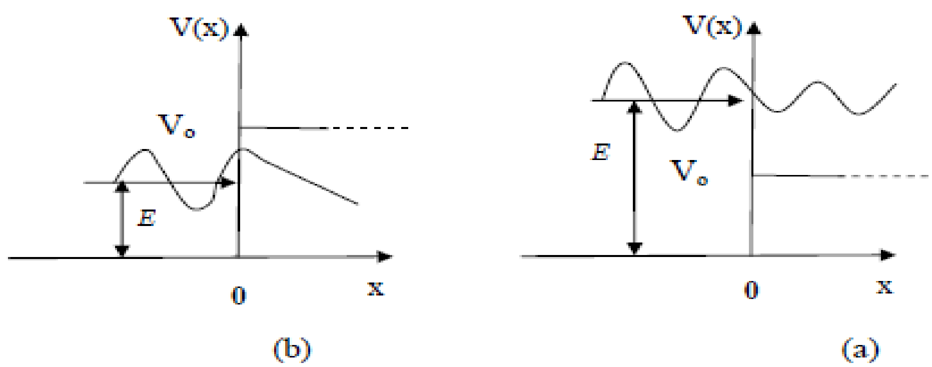
$$A=B=\sqrt{\frac{1}{a}}$$

III. الجهد الدرجي

دراسة حزمة متجانسة من الإلكترونات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V_o, & x\geq 0\end{cases}$$

في كلتا الحالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل 2.III.1). ومنها سنوجد معادلات ا- التيار الساقط ب- التيار المنعكس ت - التيار النافذ ح- معامل الانعكاس د- معامل النفاذية.



شكل 2.III.1 (a) الحالة الأولى $E>V_o$ (b) الحالة الثانية $E<V_o$

الحالة الأولى $E>V_o$

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم $x=0$ تعرف:

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

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2}=-k^2\psi_I, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (1)$$

والحل العام لها هو:

$$\psi_I(x)=A\underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}}+B\underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (2)$$

الدالة e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني وتسمى دالة ساقطة (Incident wave)، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني وتسمى دالة منعكسة (Reflected wave). A هي سعة الموجة الساقطة و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من الحائل ($x = 0$) تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+V_o\psi_{II}=E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}=-\alpha^2\psi_{II},\quad \alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o) \qquad (3)$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x)=C\,e^{i\alpha x}+D\,e^{-i\alpha x} \qquad (4)$$

$e^{i\alpha x}$ هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave) وحيث إنه لا يوجد حائط جهد في المنطقة اليمنى لكي ترتد منه الأشعة، فلهذا نضع $D=0$. والآن عند الحد $x=0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because\ \psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)$$
$$\therefore\quad A+B=C \qquad (5)$$

ولمشتقتها:

$$\because\ \psi'_I(x=0)=\psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore\ ik(A-B)=i\alpha C \qquad (6)$$

حل المعادلتين (5) و(6) يعطي:

$$B=\left(\frac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)A,\qquad C=\left(\frac{2k}{k+\alpha}\right)A \qquad (7)$$

بالإمكان تعريف:

كثافة التيار الساقط = $v_1|A|^2=\frac{q}{m}|A|^2$ ،

وكثافة التيار المنعكس = $v_1|B|^2=\frac{q}{m}|B|^2$ ،

وكثافة التيار النافذ = $v_2|C|^2=\frac{\alpha}{m}|C|^2$

حيث $v_i=\hbar k_i/m$. وبالتالي فإن:

معامل الانعكاس (R) =	$\dfrac{\text{كثافة التيار المنعكس}}{\text{كثافة التيار الساقط}}$	$=\left(\dfrac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)^2$

معامل النفاذية (T) =	$\dfrac{\text{كثافة التيار النافذ}}{\text{كثافة التيار الساقط}}$	$=\dfrac{4k\alpha}{(k+\alpha)^2}$

1- من العلاقتين السابقتين نجد أن $T+R=1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.

2- الفيزياء التقليدية تمنع أي انعكاس عندما $E>V_o$ وهذا غير منطبق في قوانين ميكانيكا الكم وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.

الحالة الثانية $E < V_o$

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم $x = 0$ لن تتغير، وبالتالي سوف نستخدم المعادلتين (1) و(2). معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من المستقيم $x = 0$ هي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \beta^2\psi_{II}, \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E) \qquad (8)$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x) = C\,e^{-\beta x} + D\,e^{\beta x} \qquad (9)$$

الدالة $e^{\beta x}$ هي دالة موجية تزايدية في المدى $\{0,\infty\}$ بمعنى أن $\lim\limits_{x\to\infty} e^{\beta x} = \infty$ وبالتالي لا تحقق شروط ميكانيكا الكم، لهذا نضع $D = 0$. الآن عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$$
$$\therefore A + B = C \qquad (10)$$

ولمشتقتها:

$$\because \psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore k(A - B) = -\beta C \qquad (11)$$

بحل المعادلتين (10) و(11) نحصل على:

$$B = \left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A = \left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A,$$
$$C = \left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A = \left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A \qquad (12)$$

مثال: استخدم التحويلات القطبية التالية:

$$k = r\cos\delta, \qquad \beta = r\sin\delta,$$
$$r = \sqrt{k^2+\beta^2}, \qquad \delta = \tan^{-1}\left(\frac{\beta}{k}\right) = \sqrt{\frac{V_o - E}{E}} \qquad (13)$$

لتبسيط المعادلة (12)

الحل: الثابت B يبسط كالتالي:

$$B = \left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A = \left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A = \left(\frac{\cos\delta - i\sin\delta}{\cos\delta + i\sin\delta}\right)A$$
$$= \frac{re^{-i\delta}}{re^{i\delta}}A \qquad (14)$$
$$= e^{-2i\delta}A$$

الثابت C يبسط كالتالي:

$$C = \left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A = \left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A = \left(\frac{2k}{k+i\beta} - 1 + 1\right)A$$
$$= \left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta} + 1\right)A \qquad (15)$$
$$= \left(e^{-2i\delta} + 1\right)A$$

ولنا هنا بعض الملاحظات:

1- الشعاع الساقط والمنعكس لهما نفس الشدة، بمعنى أن:

$$|B|^2 = B^*B = \left(\frac{k - i\beta}{k + i\beta}\right) \times \left(\frac{k + i\beta}{k - i\beta}\right) |A|^2$$
$$= |A|^2$$

وهذا يعني أن جميع الجسيمات الساقطة بطاقة $E < V_o$ سوف تنعكس كلياً عندما تصل إلى الحائل، ويتساوى معامل الانعكاس بالوحدة (بمعني أن $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$). وبالتالي سوف ينعدم معامل النفاذية، أي أن "$T = 0$".

2- باستخدام المعادلات (13) و(14) يمكننا وضع الدوال الموجية بالصورة:

$$\psi_I(x) = 2Ae^{-i\delta}\cos(kx + \delta), \qquad (16)$$

$$\psi_{II}(x) = \left(2A\cos\delta\, e^{-i\delta}\right)e^{-\beta x} \qquad (17)$$

3- كلاسيكياً تعتبر المنطقة (II) منطقة غير مسموح تواجد الجسيمات بها، وذلك لأن طاقة الحركة $(T = E - V_o)$ سوف تصبح كمية سالبة نظراً لأن $E < V_o$.

4- من المعادلة (17) نستنتج أن:

أ- كثافة التيار في المنطقة (II) منعدمة لأن الدالة حقيقية.

ب- احتمالية وجود الجسيمات في المنطقة (II) تعطى بالمعادلة:

$$P_{II}(x) = |\psi_{II}|^2 = \left(2A\cos\delta\right)^2 e^{-2\beta x} \qquad (15)$$

وهذه تعطى قيماً مقبولة عند $x = 0$ وتقل تدريجيا (أسياً) مع زيادة المسافة. انظر الشكل 2.III.1 b.

5- تنعدم الدالة $\psi_{II}(x)$ تماماً عندما $V_o \to \infty$، وتأخذ الدالة $\psi_I(x)$ بالشكل:

$$\psi_I(x) = A\sin kx$$

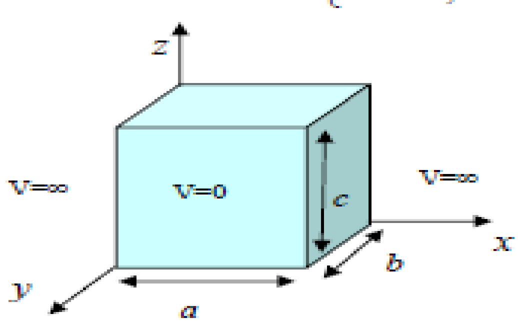
حيث إنها يجب أن تنعدم عندما $x = 0$.

6- باستطاعتنا استنتاج المعادلة (12) مباشرةً وذلك بتغيير $i\alpha \to -\beta$ في المعادلة (7).

IV تطبيق معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد

مثال: ادرس حركة جسيم داخل صندوق مقفل ذي ثلاثة أبعاد في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a,\ 0 < y < b,\ 0 < z < c \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$



شكل2.4 جسيم داخل صندوق (ذي ثلاثة أبعاد) طاقة الوضع (V) متناهية في الكبر إلا داخل الصندوق قيمتها صفر.

الحل: يتواجد الجسيم في المنطقة $(a,b,c) \rangle (x,y,z) \rangle (0,0,0)$ فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد تأخذ الصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \qquad (1)$$

و بذلك ψ سوف تعتمد على الإحداثيات الثلاث (x,y,z). لحل المعادلة (1) نستخدم طريقة فصل المتغيرات، و هي كالتالي:

1- نفترض أن

$$\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z) \qquad (2)$$

2- بالتعويض من (2) في (1) واستخدام $E=E_x+E_y+E_z$، والشروط الحدودية

$$\begin{aligned} &\psi(0,y,z)=\psi(a,y,z) \quad \text{for all } y,\ \text{and } z\\ &\psi(x,0,z)=\psi(x,b,z) \quad \text{for all } x,\ \text{and } z\\ &\psi(x,y,0)=\psi(x,y,c) \quad \text{for all } x,\ \text{and } y \end{aligned} \qquad (3)$$

بالإمكان الحصول على المعادلات التالية:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2X(x)}{dx^2}+k_x^2X(x)=0, \quad k_x^2=\frac{2mE_x}{\hbar^2},\\ &\frac{d^2Y(y)}{dy^2}+k_y^2Y(y)=0, \quad k_y^2=\frac{2mE_y}{\hbar^2},\\ &\frac{d^2Z(z)}{dz^2}+k_z^2Z(z)=0, \quad k_z^2=\frac{2mE_z}{\hbar^2}. \end{aligned} \qquad (4)$$

بالتالي فنحن غيرنا من معادلة تفاضلية في ثلاثة متغيرات إلى ثلاث معادلات تفاضلية كل واحدة تعتمد على متغير واحد فقط. كل معادلة مشابهة لمعادلة جسيم في صندوق ذي بعد واحد $(2.II.9)$، ولذلك نحصل على الحلول التالية:

$$\begin{aligned} &X(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_x x, \quad k_x=\frac{n_x\pi}{a}, \quad n_x=1,2,\cdots\\ &Y(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin k_y y, \quad k_y=\frac{n_y\pi}{b}, \quad n_y=1,2,\cdots\\ &Z(z)=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin k_z Z \quad k_z=\frac{n_z\pi}{c}, \quad n_z=1,2,\cdots \end{aligned} \qquad (5)$$

وأيضاً

$$E=E_x+E_y+E_z=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x{}^2}{a^2}+\frac{n_y{}^2}{b^2}+\frac{n_z{}^2}{c^2}\right) \qquad (6)$$

والدالة المميزة تصبح:

$$\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{a}z\right), \qquad \begin{aligned} n_x&=1,2,\cdots\\ n_y&=1,2,\cdots\\ n_z&=1,2,\cdots \end{aligned} \qquad (7)$$

تعليقات:

1- من المعادلة (6) نرى أن قيم الطاقة غير متصلة (مكماة).

2- الأعداد (n_x, n_y, n_z) هي أعداد الكم في الاتجاهات الثلاثة. وهذه الأعداد مستقلة، أي لا يعتمد بعضها البعض الآخر.

3- شرط المعايرة يتطلب:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx\,dy\,dz = \int_0^a |X(x)|^2 dx \int_0^b |Y(y)|^2 dy \int_0^c |Z(z)|^2 dz = 1 \qquad (8)$$

4- في حالة المكعب $(a = b = c = L)$ فإن:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\underbrace{\left(n_x{}^2 + n_y{}^2 + n_z{}^2\right)}_{n^2} = n^2 E_1, \qquad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \qquad (9)$$

5- من المعادلة (9) سنعرف درجة الانتماء (أو التحلل) بأنها عدد الدوال التي لها (تنتمي إلى) نفس الطاقة. هذا الانتماء ناتج من تماثل المكعب ويزول تماماً بتغير أطوال الصندوق. والجدول التالي يصف درجات الانتماء الخاصة بالمكعب.

درجة الانتماء	n^2	n_x	n_y	n_z	ψ_{n_x,n_y,n_z}
1	3	1	1	1	$\psi_{1,1,1}$
3	6	1	1	2	$\psi_{1,1,2}$
	6	1	2	1	$\psi_{1,2,1}$
	6	2	1	1	$\psi_{2,1,1}$
3	9	1	2	2	$\psi_{1,2,2}$
	9	2	1	2	$\psi_{2,1,2}$
	9	2	2	1	$\psi_{2,2,1}$
3	11	1	1	3	$\psi_{1,1,3}$
	11	1	3	1	$\psi_{1,3,1}$
	11	3	1	1	$\psi_{3,1,1}$
1	12	2	2	2	$\psi_{2,2,2}$

H.W

س: اوجد حلول معادلة شرودينجر الغير المعتمده على الزمن لمتذبذب توافقي بسيط ؟