<u>جسيم داخل مكعب The particle in box</u>

اذا اعتبرنا نفس الجسيم في الفقرة السابقة عند تحركه في مكعب مضلع ذو ابعاد a, b, c وعند تحرك الجسيم بين $x=0$ و $x=a$ ، وبين $y=0$ و $y=b$ ، وبين $z=0$ و $z=c$ فأن الطاقة الكامنة $U = 0$ ولكنها في حدود المكعب تزداد فجأة الى المالانهاية وتبقى في كل مكان خارج المكعب تمتلك هذه القيمة. ان مجموع المركبات بأتجاه المحاور الثلاثة يكون

$$U = U_x + U_y + U_z \quad \ldots\ldots\ldots.. \quad 40$$

وبنفس الطريقة في الفقرة السابقة ، فأنه من الممكن فصل معادلة شرودنجر الى ثلاثة معادلات تفاضلية وكل منها تشبه المعادلة :

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E_x - U_x) = 0 \quad \ldots\ldots\ldots. \quad 41$$

حل المعادلة 41 بين $x=0$, $x=a$ يقود الى الموجة والطاقة كما في المعادلتين 42 و 43 على التوالي :

$$\psi_x = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \quad \ldots\ldots\ldots. \quad 42$$

$$E_x = \frac{n_x^2 h^2}{8 m a^2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad 43$$

حيث ان n_x يمثل العدد الكمي وبأخذ القيم $(n_x = 1, 2, 3, \ldots\ldots)$ وبنفس طريقة المعادلات التفاضلية الأخرى بالاتجاهين y , z .

$$\psi_y = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \quad \ldots\ldots\ldots. \quad 44$$

$$\psi_z = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right) \quad \ldots\ldots\ldots. \quad 45$$

$$E_y = \frac{n_y^2\, h^2}{8\, m\, b^2} \quad \dots\dots\dots\dots\dots \quad 46$$

$$E_z = \frac{n_z^2\, h^2}{8\, m\, c^2} \quad \dots\dots\dots\dots\dots \quad 47$$

حيث ان n_y , n_z هما اعداد كمية ، تأخذ القيم 1، 2، 3، ..... وبما ان $\psi = \psi_x\, \psi_y\, \psi_z$ وبالتعويض عن المعادلات 42 و 44 و 45 فأن ψ تصبح :

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{abc}}\, sin\left(\frac{n_x\, \pi\, x}{a}\right)\, sin\left(\frac{n_y\, \pi\, y}{b}\right)\, sin\left(\frac{n_z\, \pi\, z}{c}\right) \dots\dots\dots .48$$

وكذلك بما ان $E = E_x + E_y + E_z$ وبالتعويض في المعادلات 43 و 46 و 47 نحصل على الطاقة الكلية E حيث ان :

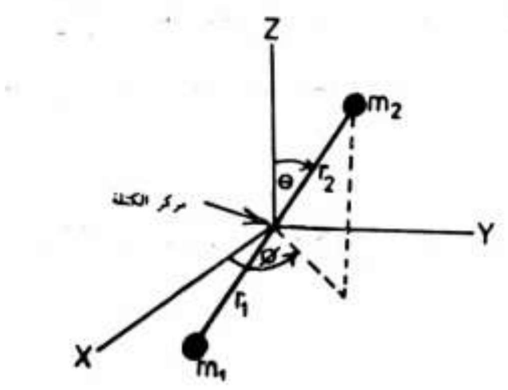
$$E = \frac{h^2}{8\, m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \dots\dots\dots\dots \; 49\, a$$

$$E_n = \frac{n^2\, h^2}{8\, m\, L} \quad \dots\dots\dots\dots\dots \quad 49\, b$$

حيث ان معادلة *49 b* تمثل الطاقة الكلية بشكل عام. مما تقدم نلاحظ بأنه في الوقت الذي تكون فيه طاقة الجسيم الحر متغيرة وبشكل مستمر نجد ان طاقة الجسيم في مكعب تكون طاقته محددة (مكممة). وعلى أي حال فأن الفرق بين طاقة المستويات المختلفة صغير والسبب في صغر الاختلاف يعود الى وجود h^2 في كل طاقة.

الدوار الصلد Solid rotator

نفترض نظام دوار متكون من كتلتين مرتبطتين بأصرة صلدة بحيث تجعل الكتلتين على بعد ثابت عن بعضهما في الفراغ لكي نهمل طاقة الاهتزاز *Vibrational energy* . ولنفترض أيضاً ان هذا النظام يمتلك مركز ثقل يقع في نقطة تلاقي الاحداثيات الثلاثة $x\, y\, z$ لتلافي حساب الطاقة الانتقالية *Translational energy* . ان هذا النظام يشبه في تركيبه الجزيئة المتكونة من ذرتين. ولايجاد حالات الطاقة والدالة الموجية لهذا النظام سوف نستعمل الاحداثيات الكروية المبينة في الشكل ادناه لكونها اكثر ملائمة لهذا النظام.



ولايجاد معادلة شرودنكر لهذا النظام يجب ان نعرف دالة هاملتون اولاً والتي تتطلب إيجاد الطاقة الحركية والطاقة الكامنة. وبعدئذ يمكن تحويل دالة هاملتون الى عامل هاملتون لحل معادلة شرودنكر. فالطاقة الحركية T_1 للكتلة m_1 حسب الاحداثيات الديكارتية تكون بالشكل الاتي:

$$T_1 = \frac{m_1}{2} \left(X_1^2 + Y_1^2 + Z_1^2 \right) \quad \ldots\ldots.. \; 66$$

ولتحويل هذه المعادلة الى الاحداثيات الكروية يتطلب اجراء عمليات رياضية مطولة. وبذلك سوف نعطي النتيجة بدون تفصيل.

$$T_1 = \frac{m_1 \, r_1^2}{2} \left(\theta^2 + \phi^2 \sin^2 \theta \right) \quad \ldots\ldots\ldots. \; 67$$

كذلك الطاقة الحركية T_2 للكتلة m_2 يمكن ان تكتب بالشكل الاتي :

$$T_2 = \frac{m_2 \, r_2^2}{2} \left(\theta^2 + \phi^2 \sin^2 \theta \right) \quad \ldots\ldots\ldots. \; 68$$

وبجمع هاتين المعادلتين نحصل على الطاقة الحركية الكلية T

$$T = T_1 + T_2 = \frac{m_1 \, r_1^2 + m_2 \, r_2^2}{2} \left(\theta^2 + \phi^2 \sin^2 \theta \right) \quad \ldots\ldots\ldots. 69$$

ان عزم القصور الذاتي (زخم الاستمرارية) I لهذا النظام يساوي:

$$I = m_1 \, r_1^2 + m_2 \, r_2^2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. \; 70$$

واذا عوضنا هذه المعادلة في المعادلة 69 نحصل على المعادلة الاتية:

$$T = \frac{I}{2}\ (\theta^2 + \ \phi^2\ sin^2\ \theta)\ \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ \ 71$$

الان نحول هذه المعادلة بدلالة الزخم P_θ , P_ϕ . و هذا يكون بأستخدام دالة لاكرانج L بالشكل الاتي:

$$P_i = \frac{\partial\ L}{\partial\ q_i}\ \ \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..\ \ 72$$

ان دالة لاكرانج بدلالة الاحداثيات العامة يمثل

$$L_{(q,q)} = T_{(q)} + \ V_{(q)}\ \ \ \ \ \ldots\ldots\ldots\ \ \ \ 73$$

والان نستخدم المعادلتين 72 و 73 للحصول على P_θ , $P_\emptyset$ بألاستعانة بالمعادلة 65 على النحو الاتي:

$$P_\theta = \frac{\partial\ L}{\partial\ \theta} = \frac{\partial L}{\partial\ \theta} = I\theta\ \ \ldots\ \ 74$$

$$P_\phi = \frac{\partial\ L}{\partial\ \emptyset} = \frac{\partial\ T}{\partial\ \emptyset} = I\ \emptyset\ sin^2\ \theta\ \ \ \ \ \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ \ \ 75$$

والان نجد قيمتي θ , ϕ من هاتين المعادلتين ونعوضهما في المعادلة 71 لنحصل على المعادلة الاتية:

$$T = \frac{1}{2\ I}\left(P_\theta^2 + \frac{P_\phi^2}{sin^2\ \theta}\right)\ \ \ldots\ldots\ldots\ldots.\ 76$$

ولتحويل T في هذه المعادلة الى عامل ميكانيك الكم نعوض عن P_θ بواسطة $\frac{\partial}{\partial\ \theta}\ \frac{h}{i}$ وعن P_ϕ بواسطة $\frac{\partial}{\partial\ \emptyset}\ \frac{h}{i}$.

ولكن في هذه الحالة لا نحصل على عامل هيرميتي. وللتغلب على هذه الصعوبة يضرب الحد الأول الذي داخل القوس من اليسار بالمقدار $\frac{\sin\theta}{\sin\theta}$ قبل اجراء التعويض على الزخمين $P_\phi \,, P_\theta$ لنحصل على المعادلة الاتية:

$$T = \frac{1}{2\,I}\left[\frac{1}{\sin\theta} P_\theta\,(\sin\theta)\,P_\theta + \frac{P_\theta^2}{sin^2\,\theta}\right] \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad 77$$

اذا افترضنا انه لاتوجد قوى خارجية مؤثرة على النظام. فتكون الطاقة الكامنة V تساوي صفراً. والان نجري عملية التعويض للحصول على عامل هاملتون $\bar{H}$ بحيث يكون هيرميتي الشكل الاتي:

$$\bar{H} = \bar{T} + \bar{V}$$

$$\bar{H} = \frac{-h^2}{2\,I}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\,\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\,\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\,\theta^2}\right] + 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad 78$$

وبذلك تكون معادلة شرودنكر لمسألة الدوار الصلد على النحو الاتي:

$$\frac{-h^2}{2\,I}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\,\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\,\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\,\theta^2}\right]\psi_{(\theta,\phi)} = E\,\psi_{(\theta,\phi)} \ldots 79$$