## نظام المهتز التوافقي لبعد واحد (Harmonic Oscillator):

المتذبذب او المهتز التوافقي نموذجا لدراسة العديد من الانظمة الكيمياوية:

١- الحركة الاهتزازية للجزيئات ثنائية الذرة لذلك تعتبر الخطوة الاولى لدراسة الاطياف الاهتزازية للجزيئات.

٢- حركة الذرات في الشبكة البلورية .

كما عرفنا من حل النظام سابقا يكون:

$$V_X = 1/2\ CX^2 \qquad \text{--------- 1}$$

$$T_X = 1/2\ P_X^2 / m = (-\ h^2 / 8\pi^2\ m)\ d^2 / dX^2 \qquad \text{---------- 2}$$

$$H = T + V = (-\ h^2 / 8\pi^2\ m)\ d^2 / dX^2 + 1/2\ CX^2 \qquad \text{--------- 3}$$

بالتعويض في معادلة شرودنكر العامة ($\hat{H}\ \Psi = E\ \Psi$) نحصل:

$$[(-\ h^2 / 8\pi^2\ m)\ d^2 / dX^2 + 1/2\ CX^2]\ \Psi_X = E_X\ \Psi_X \qquad \text{----------4}$$

هذه معادلة شرودنكر لنظام المهتز التوافقي . وحلها يتم وفق خطوات رياضية معقدة وطويلة نحصل بعدها على:

$$\Psi_V\ (Y) = (1/\pi)^{1/4}\ (2^V\ V!)^{-1/2}\ H_V(Y)\ e^{-Y2/2} \qquad \text{---------- 5}$$

حيث ان :

$$Y = (\beta)^{1/2}\ X \quad ;\ \beta = (2\pi/h)\ (cm)^{1/2}$$

$$H_V(Y) = (-1)^V\ e^{Y2}\ .\ d^V / dY^V\ e^{-Y2}$$

H = متعدد حدود هيرميت (Hermitc polynominal)

V = عدد كم الاهتزاز (Vibrational quantum number)

المعادلة رقم ٦ تمثل معادلة الدالة الذاتية للمهتز التوافقي.

اما القيمة الذاتية المرافقة للدالة الذاتية ( اي طاقة النظام) فتساوي:

$$E_V = ( V + 1/2) h\upsilon \qquad \text{--------- 6}$$

$\upsilon$ = تردد الاهتزاز. وتمثل المعادلة رقم ٧ القيمة الذاتية لنظام المهتز التوافقي ومنه يتم تقدير قيم مستويات الطاقة الاهتزازية.

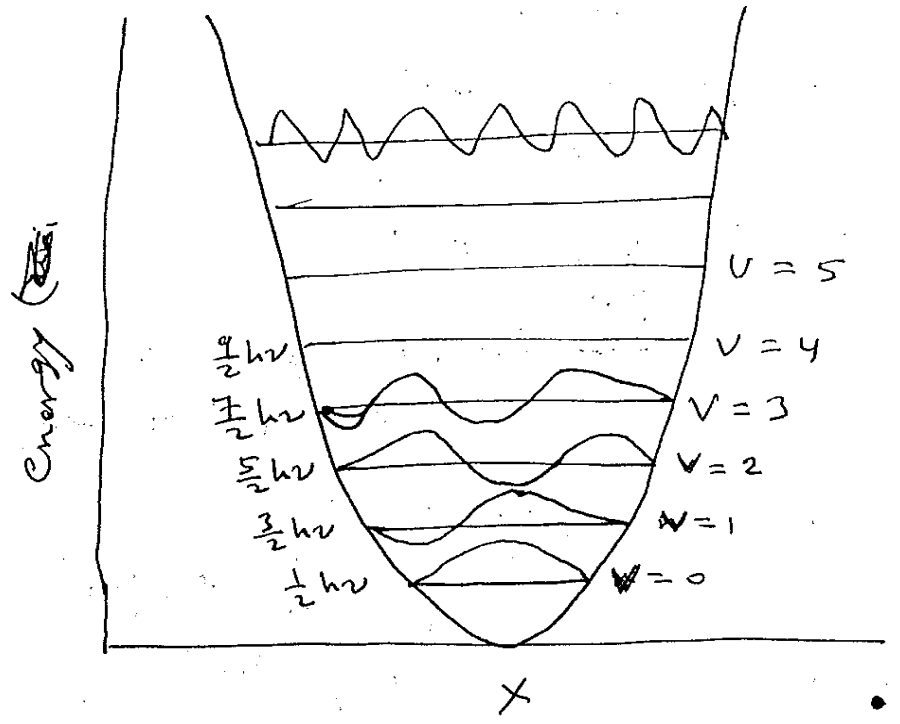
و V = عدد كم الاهتزاز وياخذ القيم ٠ ، ١ ، ٢ ، ٣، -------

وتعد هذه المعادلة اساس علم الطيف في المنطقة تحت الحمراء (Infra-red) وتفسير الاطياف الاهتزازية. وعندما V = 0 تكون:

$$E_0 = 1/2\ h\upsilon \qquad \text{--------- 7}$$

وتدعى بطاقة نقطة الصفر (Zero point energy).

ويبين الشكل ادناه طاقة المستويات الاهتزازية للمهتز التوافقي والدوال الذاتية:




من الملاحظات المهمة حول معالجة نظرية الكم للمهتز التوافقي هو:

١- ان اوطأ طاقة للمهتز التوافقي غير مساوية للصفر ، خلاف المعالجة التقليدية وطريقة سومرفيلد، بل توجد طاقة تسمى طاقة نقطة الصفر وهي مساوية الى $1/2\ h\upsilon$ .

٢- اي ان الجسم لا يستقر ساكنا في المركز بدون حركة بل انه يهتز ولو بحدود ضيقة جدا. اي اننا لا يمكن ان نجعل الجسيم يتوقف عن الاهتزاز التوافقي.

٣- ان طاقة نقطة الصفر التي تتنبأ بها نظرية الكم هي ليست نتيجة رياضية فحسب وانما هي حقيقة فيزيائية اثبتتها العديد من التجارب والملاحظات العملية والتي لم يكن بالامكان تفسيرها حسب قوانين الفيزياء التقليدية.

## نظام الصلد الدوار (Rigid rotator):

كما نعرف في نظام الصلد الدوار ان الطاقة الكامنة تساوي صفر اي $V = 0$

وبذلك يكون عامل هاملتون لهذا النظام كالاتي:

$$\hat{H} = - \hbar^2 / 2m\nabla^2 \qquad \text{----- 1}$$

ان اختيار نظام الاحداثيات المناسبة لحل معادلة شرودنكر يعتمد على طبيعة النظام المدروس وتماثله، وبالنسبة لهذا النظام تكون المحاور او الاحداثيات القطبية اكثر ملائمة.

يكتب عامل لابلاس بدلالة المحاور القطبية كالاتي:

$$\nabla^2 =( 1/r^2 ) d / dr ( r^2. d/dr) + (1/r^2 \sin\theta ) d/d\theta ( \sin\theta . d/d\theta) + 1/r^2 \sin 2\theta) d^2/d\phi^2$$

ويمكن كتابة المعادلة بالشكل:

وبهذا يكون:

$$\nabla^2 = (1/r^2) d/dr (r^2. d/dr) + 1/r^2 \Lambda^2 \qquad \text{------- 2}$$

حيث ان $\Lambda^2$ يعرف بعامل ليجندر (Legendrian operator) ويمثل المكونة الزاوية لعامل لابلاس .

وفي نظام الصلد الدوار فان r تبقى ثابتة اثناء الحركة الدورانية لذلك فان المكونة القطرية (radial part) (الحد الاول من المعادلة ٢) لعامل لابلاس يساوي صفرا. وبذلك يمكن كتابة عامل هاملتون لنظام الصلد الدوار كالاتي وذلك بتعويض المعادلة ٢ في المعادلة ١:

$$\hat{H} = - \hbar^2 / 2mr^2 . \Lambda^2 \qquad \text{------- 3}$$

تعرف الكمية $mr^2$ بعزم القصور الذاتي ويرمز لها بالرمز I :

$$I = mr^2 \qquad \text{------- 4}$$

وبذلك يكتب عامل هاملتون بالشكل:

$$\hat{H} = - \hbar^2 / 2I . \Lambda^2 \qquad \text{-------- 5}$$

وبذلك يمكن كتابة معادلة شرودنكر لهذا النظام كالاتي:

$$- \hbar^2 / 2I . \Lambda^2 Y_{(\theta,\phi)} = E Y_{(\theta,\phi)} \qquad \text{------ 6}$$

اذ ان الدوال $Y(\theta,\phi)$ تعتمد على $\theta$ و $\phi$ وتعرف بالدوال الكروية او القطبية .

ويمكن كتابة المعادلة ٦ بالشكل الاتي:

$$\Lambda^2 Y(\theta,\phi) + 2IE / \hbar^2 . Y(\theta,\phi) = 0 \qquad \text{------ 7}$$

اي ان:

وبحل هذه المعادلة بطريقة فصل الدوال نحصل على:

$$E_l = \hbar^2 / 2I . l (l + 1) \quad ; l = 0, 1, 2, 3, \text{----} \qquad \text{------ 8}$$

اي ان الطاقة مكممةاذ تحددها مستويات الطاقة بدلالة عدد الكم l .