المحاضرة العاشرة

تطبيقات الميكانيك الكمي

هناك ٣ انواع من الحركة بصورة عامة هي الحركة الانتقالية والحركة الأهتزازية والحركة الدورانية وحسب طرق الميكانيك الكمي يتم تكميم كل نمط حركة لوحده

١ـ الحركة الانتقالية

أ-الجسيم الحر

في البداية نضع صيغة القيمة الذاتية لمؤثر الطاقة الكلية للنظام حسب عدد المحاور التي يتحرك بها الجسيم حسب معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

$$\hat{H}\Psi_{(x,y,z)} = E * \Psi_{(x,y,z,)} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (1)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right]\Psi_{(x,y,z,)} = E * \Psi_{(x,y,z,)} \dots\dots\dots\dots\dots\dots (2)$$

وبما ان الجسيم حر فأن الجهد الذي يتحرك به يكون صفر يعني الطاقة الكامنة صفر

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E * \Psi \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (3)$$

هذه المعادلة بثلاث متغيرات لحلها يتم تجزئة حد الطاقة الكلية للنظام حيث تكون الطاقة الكلية هي مجموع الطاقة الكلية على المحاور الثلاثة كما ان دالة الموجة على ثلاث محاور تمثل حاصل ضرب دالة الموجة على كل محور

$$\left\{\begin{matrix} E = E_x + E_y + E_z \\ \Psi_{(x,y,z)} = \psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} \end{matrix}\right\} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (4)$$

نعوض(٤)في المعادلة (٣)

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} = \left(E_x + E_y + E_z\right) * \psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} \dots\dots (5)$$

وهنا فأن المؤثر $\frac{\partial^2}{\partial qi^2}$ سوف يؤثر على كل دالة خاصة به ويترك باقي الدوال فنحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\psi_{(y)} * \psi_{(z)}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + \psi_{(x)} * \psi_{(z)}\frac{\partial^2\psi_{(y)}}{\partial y^2} + \psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \frac{\partial^2\psi_{(z)}}{\partial z^2}\right]$$

$$= \left(E_x + E_y + E_z\right)\psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)} \dots\dots\dots (6)$$

وكما مر سابقا في معادلة شرودنكر الزمنية نفصل كل متغير لوحدة بقسمة المعادلة على حاصل ضرب الدوال $\psi_{(x)} * \psi_{(y)} * \psi_{(z)}$ فيكون

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi_{(y)}}\frac{\partial^2\psi_{(y)}}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi_{(z)}}\frac{\partial^2\psi_{(z)}}{\partial z^2}\right] = E_x + E_y + E_z \dots\dots (7)$$

بعد فصل المتغيرات نستطيع ان نحول التفاضلات الجزئية الى تفاضلات تامة

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} + \frac{1}{\psi_{(y)}}\frac{d^2\psi_{(y)}}{dy^2} + \frac{1}{\psi_{(z)}}\frac{d^2\psi_{(z)}}{dz^2}\right] = E_x + E_y + E_z \dots\dots (8)$$

والان يتم حل معادلة كل متغير لوحدها فتجز أالمعادلة (٨) الى ثلاث معادلات واحدة لكل متغير فنأخذ حالة المتغير x على سبيل المثال

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} = E_x \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (9)$$

$$\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2}\psi_{(x)} = 0 \dots\dots\dots\dots (10)$$

نحول الكمية $\frac{2mE_x}{\hbar^2}$ الثابتة الى مربع كمية ثابتة اخرى نفرضها α^2 فتكون المعادلة

$$\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} + \alpha^2\psi_{(x)} = 0 \dots\dots\dots\dots (11)$$

نرمز لمؤثر التفاضل على المحور $\left(\frac{d}{dx}\right)$ بالرمز المؤثري $\widehat{D_x}$ فتصبح المعادلة

$$\widehat{D_x^2}\,\psi_{(x)} + \alpha^2\psi_{(x)} = 0 \dots\dots\dots\dots\dots\dots (12)$$

$$\left(\widehat{D_x^2} + \alpha^2\right)\psi_{(x)} = 0 \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (13)$$

نلاحظ ان قوس التأثير يمكن تجزئته بتحويله الى قوس فرق بين مربعين

$$(D_x^2 + \alpha^2)\psi_{(x)} = (D_x^2 - i^2\alpha^2)\psi_{(x)} = (D_x - i\alpha)(D_x + i\alpha)\psi_{(x)} = 0 (14)$$

يمكن حل المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية اعلاه بواسطة الحل العام

$$\psi_{(x)} = C_1 e^{i\propto x} + C_2 e^{-i\propto x} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (15)$$

نلاحظ ان الأس في الحد الأول يمثل حل القوس الأول وكذلك الأس في الحد الثاني يمثل حل القوس الثاني بينما تكون C_1 و C_2 هي ثوابت التكامل للمعادلة من الدرجة الثانية وبأعادة α الى صيغته الأصلية

$$\psi_{(x)} = C_1 e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + C_2 e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (16)$$

عند حساب ثوابت التكامل C_1 و C_2 يجب ان تعرف على سلوك الدالة في المناطق الحدودية وحيث ان الجسيم حر لذلك فهو حر الحركة في المنطقة من $-\infty \leq x \leq +\infty$ حيث اذا عوضنا $-\infty$ في المعادلة (١٦) يكون الحد الأول صفر والثاني لانهائي وكذلك اذا عوضنا $+\infty$ يكون الحد الثاني =صفر والاول لانهائي وبذلك فأن قيمة التكامل

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{(x)}{}^{*}\, \psi_{(x)} dx = \infty \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (17)$$

اي ان المعادلة غير مقبولة فيزيائيا و لا يمكن تعين ثابت معايرة للدالة الموجية ان النتيجة اعلاه تقرر ان حالة الجسيم الحر حالة غير واقعية اذ لا يمكن ان يوجد جسيم لا يتداخل مع الجسيمات الأخرى او مع محيطه.