Quantum Mechanics ميكانيك الكم

References المراجع

1- الميكانيك الكمي تأليف د. جاسم محمد الحسيني ...
2- أساسيات ميكانيك الكم تأليف د. سالم حسن الشاكر ...
3- Quantum Mechanics, A self-Teaching Guide
4- Introduction to Quantum Mechanics, David J. Griffiths

الميكانيك الكمي Q.M.

هو طريقة حساب جميع الظواهر الفيزيائية في كلا المقياسين الذري (المجهري) microscopic والعياني macroscopic ويتم فيه طرح الكثير انتقاداً من الفيزياء الكلاسيكية.

وكذلك فإن الميكانيك الكمي يحل التناقض القائم في الازدواجية المادية الموجية وترتبط فيما بينها بواسطة ثابت بلانك h فعند وضع $h=0$ في قوانين الميكانيك الكمي نحصل بصورة عامة على نتائج الفيزياء الكلاسيكية.

ويقسم الميكانيك الكمي الى غير النسبي Non-Relativistic Q. M. وهو صالح لطاقات واطئة تكون فيها سرع الجسيمات صغيرة نسبة الى سرعة الضوء، والميكانيك الكمي النسبي Relativistic Q. M. ويستخدم عندما تقترب سرعة الجسيم من سرعة الضوء.

The wave function and its Interpretation دالة الموجة وتفسيرها

تعتبر معادلة الموجة في الميكانيك الكمي اساساً للموضوع وقد طورت هذه المعادلة في العام ١٩٢٥ من قبل العالم شرودنكر واستناداً الى فرضية دي-برولي فإن العلاقة بين طول الموجة المصاحب للجسيم λ وزخم الجسيم p

$$\lambda = h/p$$

وهذه العلاقة صحيحة لكلا الفوتونات والجسيمات فاذا كان الضوء يسلك بعض الأحيان كموجة وبعض الاحيان كجسيم كذلك فإن الجسيمات

المادية يجب أن تتصرف بطريقة مماثلة أي يجب أن ترافقها خاصية موجية.

وبناءاً على النظرية الكلاسيكية لوصف الحركة الموجية فإن شدة الضوء I تتغير بتغير سعة الموجة والذي يتمثل بالمجال الكهربائي E_0

$$\therefore I \propto E_0$$

بينما في الوصف الجسيمي فإن الشدة تتغير بعدد الفوتونات التي تمر خلال وحدة المساحة في وحدة الزمن. فعند وصف الجسيمات المادية مثل الإلكترون في الذرة. أن الإلكترون لا يتحرك بعيداً عن النواة ويكون مستقراً في الحيز الذي يبعد حوالي 10^{-8} m عن النواة، ويمكن التعبير عن أرتباط مجال المادة بدالة الموجات المستقرة (أو الواقفة) والتي تكون موجودة في هذا الحيز بسبب تنقيد من تنظم الى اخرى ضمن هذا الحيز وتكون صفراً خارجه.

أي أن مجال المادة يصف حركة الجسيم ويطلق على سعة مجال المادة بالدالة الموجية ψ وأن شدة مجال المادة (كثافة الاحتمالية Probability density) تتناسب مع مربع سعة الموجة، أي أن شدة مجال المادة تعطى بالعلاقة:

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x)$$

حيث $\psi^*(x)$ تمثل الدالة المتممة المرافقة للدالة $\psi(x)$

حيث تم تفسير هذه العلاقة من قبل العالم الألماني ماكس بورن Max Born

أذا كان الجسيم يتحرك على أتجاه محور x فإن احتمالية Probability وجود الجسيم في المنطقة $x, x+dx$ هي $\psi^*(x)\,\psi(x)\,dx$

أما احتمالية وجود الجسيم على محور x

$$\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = \int |\psi(x)|^2 dx = 1$$

وأن قيمة التكامل تساوي 1 وذلك لأننا فرضنا وجود الجسيم على محور x حيث يشير 1 الى حتمية وجود الجسيم

وفي الحالة العامة يمكن التعبير عن الحركة الموجية للجسيم في الفضاء بدلالة الاحداثيات المتعامدة (x, y, z)، فإذا أردنا احتمالية تواجد الجسيم في عنصر الحجم dV فيمكن التعبير عن الاحتمالية بالشكل التالي

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,y,z)|^2 dx\,dy\,dz = 1$$

وهذا يعني أن الجسيم موجود بالتأكيد في هذا الفضاء ويعبر على الحالة الاخيرة بالشرط الذي يسمى Normalization Condition ويعبر على الدالة التي تعتبر هذا الشرط بالدالة الفيزيائية

وأن المتغير الفيزيائي للدالة الموجية ψ يأخذ تعبيراً رياضياً كاملاً لحالة الجسيم وليست مثل الاحتمالية.

$$\therefore \psi(x,t) = A_0 e^{i\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t\right)}$$

$$\therefore E = h\upsilon = \hbar\omega$$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{and} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\therefore \frac{2\pi x}{\lambda} = \frac{2\pi x}{h} p = \frac{xp}{\hbar} \quad \text{and} \quad \omega t = \frac{Et}{\hbar}$$

$$\therefore \psi(x,t) = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن.

Time dependent schrodinger Equation (TDSE) ـــ

$$\therefore \psi(x,t) = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

$$\therefore \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \cdot \frac{i}{\hbar} p \qquad * -i\hbar \Rightarrow$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = p\,\psi(x,t) \quad \cdots \textcircled{1}$$

$$\text{and} \quad -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = p^2 \psi(x,t) \quad \cdots \textcircled{2}$$

$$\therefore \psi(x,t) = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

$$\therefore \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \cdot \frac{i}{\hbar}(-E)$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = E\psi \quad \cdots (3)$$

$$\because E = T + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad * \psi$$

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V(x)\psi \quad \cdots (4) \qquad (2) \text{ and } (3) \text{ in } (4) \Rightarrow$$

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

In three dimen

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

TDSE

$\hat{p}^2$ $\hat{H}$

TDSE هذه المعادلة الحتمية في معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن

معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

Time Independent schrodinger Equation TISE

$$\because \psi(x,t) = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

Let $\psi(x,t) = \phi(t)\psi(x)$

$$\therefore \psi(x,t) = e^{(-i/\hbar)Et}\psi(x) \quad \cdots (1)$$

$$\because i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \quad \text{TDSE}$$

(1) in TDSE $\Rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i/\hbar Et}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-i/\hbar Et}\psi(x) + V(x) e^{-i/\hbar Et}\psi(x)$$

$$i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\psi(x) e^{-i/\hbar Et} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} e^{-i/\hbar Et} + V(x)\psi(x) e^{-i/\hbar Et}$$

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

In three dimen $\nabla^2\psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))\psi(r) = 0$ TISE

Solution of TDSE

$$\because -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + V(r)\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} \quad \text{---(1) TDSE}$$

Let $\psi(r,t) = \psi(r)\,\psi(t)$ seperation of variables

$$\therefore \frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} = \psi(r)\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \quad \text{and} \quad \nabla^2\psi(r,t) = \psi(t)\nabla^2\psi(r) \quad \text{---(2)}$$

(2) in (1) $\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(t)\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r)\psi(t) = i\hbar\,\psi(r)\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \quad \div \psi(r)\psi(t) \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\psi(r)}{\psi(r)} + V(r) = i\hbar\frac{1}{\psi(t)}\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \quad \text{---(4)}$$

نلاحظ أن الطرف الأيسر دالة في r فقط والطرف الأيمن دالة في t فقط إذاً المعادلة (4) تساوي ثابت

$$\therefore i\hbar\frac{1}{\psi(t)}\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = E$$

أي

$$\int_0^t \frac{\partial\psi(t)}{\psi(t)} = -\frac{i}{\hbar}E\int_0^t dt$$

$$\therefore \ln\psi(t)\Big|_0^t = -\frac{i}{\hbar}Et \Rightarrow \ln\frac{\psi(t)}{\psi(0)} = -\frac{i}{\hbar}Et$$

$$\therefore \psi(t) = \psi(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\because \psi(r,t) = \psi(r)\,\psi(t) \Rightarrow \psi(r,t) = \psi(r)\left(\psi(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right)$$

If $\psi(0) = 1$

$$\psi(r,t) = \psi(r)\,e^{(-i/\hbar)Et} \quad \text{The solution of TDSE}$$

Q/ If $\psi(r,t) = \psi(r)\,e^{(-i/\hbar)Et}$ prove that the probability independent of time?

Sol

$$\rho = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)$$

$$= \psi^*(x)\,e^{iEt/\hbar}\,\psi(x)\,e^{-iEt/\hbar}$$

$$= \psi^*(x)\,\psi(x)\,e^{iEt/\hbar - iEt/\hbar} = \psi^*(x)\,\psi(x)\,e^{0}$$

$$= |\psi(x)|^2 \quad \text{Independent of time.}$$