جامعة البصرة

كلية التربية/القرنة

قسم الكيمياء

مادة كيمياء الكم

المرحلة الرابعة

استاذ المادة: م. عمار عبد الجبار كاظم

انواع ميكانيك الكم

ان الميكانيك يعتمد على نوع المعادلة التي يصاغ منها و هناك نوعان من ميكانيك الكم:

1. ميكانيك هايزنبرك (ظهر في عام 1925) و قد تم وضعه من قبل العالم هايزنبرك و هو يعتمد على علم المصفوفات و لذلك يدعى ميكانيك المصفوفات ايضا. و هو اقل استخداما لان علم المصفوفات علم غير شائع نسبيا.
1. ميكانيك شرودينكر (ظهر في عام 1926) و هو يعتمد على معادلة شرودينكر و قد تم وضعه من قبل العالم شرودينكر و قد اخذ بالاعتبار الصفة الازدواجية اي ازدواجية جسيمة-موجة. و قد اعتمد شرودينكر على معادلة الموجة لاشتقاق معادلته. و هو الميكانيك الاكثر استخداما لان مفهوم الموجة شائع لدى الجميع.

ان كل من ميكانيك هايزنبرك و ميكانيك شرودينكر متكافئين و يعطيان نفس النتائج و التفسيرات لكن ميكانيك شرودينكر و بالتالي معادلة شرونكر اكثر استخداما.

معادلة شرودينكر Schrodinger Equation

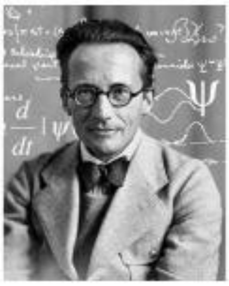
تنبيه: قبل الشروع بحل معادلة شرودينكر يجب ان نذكر بان المعادلات المستخدمة في ميكانيك الكم هي من نوع معادلات القيمة الذاتية و هي المعادلات التي تحقق الصيغة التالية

$$A f = a f \;\ldots\ldots\; (3)$$

ان معادلة شرودينكر سوف تكون بعد الاشتقاق بالصيغة العامة التالية

$$H\Psi = E\Psi \;\ldots\ldots\; (4)$$

يلاحظ من المعادلتين 3 و 4 ان الدالة موجودة على طرفي المعادلة و ان الدالة في الجانب الايسر مضروبة في العامل و في الجانب الايمن مضروبة في ثابت.



وضعت هذه المعادلة من قبل العالم شرودينكر

و هي تستند الى فرضيتين :

1. فرضية بلانك و التي تفترض بان الطاقة مكماة

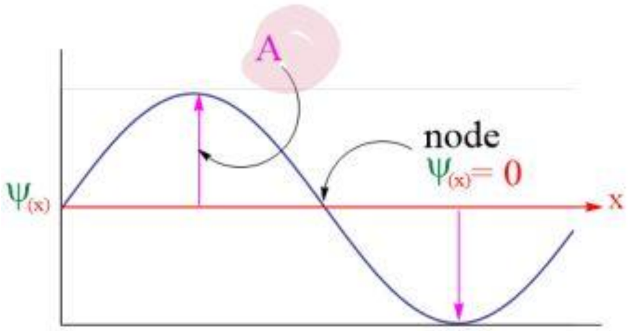
1. فرضية دي برولي و التي تفترض بان الاجسام تمتلك صفة الازدواجية اي ان لها كتلة و موجة في نفس الوقت.

لقد قام شرودينكر بما يلي لاشتقاق معادلته:

1. اخذ معادلة الموجة و التي تتضمن الصفة الموجية.
2. ادخل فيها الكتلة و هي تمثل الصفة الجسيمية
3. ادخل فيها ثابت بلانك لكي يحقق مبدأ الكم.

سوف نبدأ بمقدمة سريعة عن الموجة و معادلة الموجة

تمتلك الموجة الشكل المجاور



ان الموجة في هذا الشكل تنتشر باتجاه المحور x (يمكن ان تكون باتجاه المحور y او المحور z).

ان Ψ_X تمثل سعة الموجة بشكل عام (يمكن ان تكون Ψ_y او Ψ_z).

A تمثل السعة القصوى للموجة اي اعلى قيمة للسعة.

العقدة او node و هي النقطة التي تكون فيها قيمة السعة تساوي صفرا اي $\Psi_x = 0$.

معادلة الموجة

ترتبط كل من سعة الموجة و سرعتها بالعلاقة التالية

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\,\frac{\partial^2 \Psi_{(x,t)}}{\partial t^2} \quad \ldots\ldots 5$$

تسمى المعادلة (5) بمعادلة ماكسويل و هي من المرتبة الثانية و تعتمد فيها السعة Ψ على كل من الازاحة x و الزمن t.

و ان v هي سرعة الموجة.

اشتقاق معادلة شرودينكر من معادلة الموجة

اولا- نشتق المعادلة (5) مرتين بالنسبة الى الزمن و بذلك نتخلص من الزمن.

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\Psi_{(x,t)}}{\partial t^2} \ldots\ldots 5$$

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2\nu^2}{v^2}\Psi_{(x)} \ldots\ldots 6$$

ان ν في البسط يمثل التردد بينما v في المقام يمثل السرعة.

ثانيا- نقوم بادخال الطول الموجي λ في المعادلة (6) و ذلك لان الطول الموجي يساوي حاصل قسمة السرعة v على التردد ν كما في المعادلة (7)

$$\lambda = \frac{v}{\nu} \quad \ldots\ldots (7)$$

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2\nu^2}{v^2}\Psi_{(x)} \ldots\ldots 6$$

لكن في المعادلة (6) نجد ان التردد في يقع في البسط و السرعة في المقام لذلك نحصل على مقلوب الطول الموجي كما في المعادلة (8)

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{v} \ldots\ldots (8)$$

نعوض المعادلة (8) في المعادلة (6) لنحصل على المعادلة (9)

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2}{\lambda^2}\Psi_{(x)} \ldots\ldots(9)$$

الى هذه المرحلة المعادلة لا تتضمن سوى الخصائص الموجية و هي السعة و الطول الموجي.

لكن مبدا الكم يفترض وجود الصفتين الموجية و الجسيمية في المعادلة.

لادخال الصفة الجسيمية في المعادلة (9) يجب ادخال الكتلة m فيها.

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2}{\lambda^2}\Psi_{(x)} \;.....(9)$$

ان ذلك يتم من خلال ادخال الزخم p لانه يساوي حاصل ضرب الكتلة في السرعة.

يمكن ادخال الزخم في المعادلة (9) من خلال الطول الموجي باستخدام علاقة دي برولي

$$\lambda = \frac{h}{p} \;...... (10)$$

و لما كان لطول الموجي في المقام ستكون العلاقة كما يلي

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h} \;...... (11)$$

ان المعادلة (10) تتضمن مربع الطول الموجي اي λ^2 و لذلك نقوم بتربيع المعادلة (11)

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{p^2}{h^2} \;...... (12)$$

ثالثا- نقوم بادخال الزخم في المعادلة (10) و ذلك بتعويض المعادلة (12) فيها

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2 p^2}{h^2}\Psi_{(x)} \;.....(13)$$

معادلة كمية لانها حاوية على ثابت بلانك

تتضمن الخاصية الموجية

الان اصبحت المعادلة (13) تتضمن مايلي

أ- الخاصية الموجية متمثلة بالسعة $\Psi_{(x)}$.

ب-الخاصية الجسيمية متمثلة بالزخم و الذي يتضمن الكتلة.

ت-ثابت بلانك h. (خاصية الكم)

ن هذه المعادلة يمكن ان تصف نظاما يمتلك خاصية الجسم و خاصية الموجة في نفس الوقت مثل الالكترون و يمكن منها ان نحسب زخم هذا الجسيم اذا عرفنا سعة موجته.

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2 p^2}{h^2} \Psi_{(x)} \ldots\ldots (13)$$

لكن الكيميائي يريد عادة معرفة طاقة الجسيم اكثر مما يريد معرفة زخمه لذلك ندخل رمز الطاقة في المعادلة (13).

رابعا- نقوم بادخال الطاقة في المعادلة (13) و كما يلي:

ان الطاقة الكلية تساوي مجموع الطاقتين الحركية و الكامنة

$$E = T + V \ldots\ldots (14)$$

$$T = \frac{1}{2} mv^2 \ldots\ldots (15)$$

نعوض المعادلة (15) في المعادلة (14)

$$E = \frac{1}{2} mv^2 + V \ldots\ldots (16) \quad \text{or} \quad E = \frac{mv^2}{2} + V$$

الان ندخل الزخم في المعادلة (16) و كما يلي:

نضرب المعادلة (16) في m و نقسمها على m في نفس الوقت (مجرد حيلة رياضية)

$$E = \frac{m^2v^2}{2m} + V \ldots\ldots (17)$$

نعوض عن m^2v^2 بما يساويها و هو p^2 في المعادلة (17)

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \ldots\ldots (18)$$

نعيد ترتيب المعادلة (18)

$$p^2 = 2m\,(E - V) \ldots\ldots (19)$$

نعوض المعادلة (19) في المعادلة (13)

$$p^2 = 2m\,(E - V) \;.....(19)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2 p^2}{h^2}\Psi_{(x)} \;.....(13)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{-4\pi^2}{h^2} 2m\,(E - V)\Psi_{(x)} \;.....(20)$$

ان المعادلة (20) تتضمن المقدار $\frac{4\pi^2}{h^2}$ و الذي يمكن تحويله الى $\frac{1}{\hbar^2}$ و السبب هو مايلي

$$\because \frac{h}{2\pi} = \hbar \;..... (21)$$

$$\therefore \frac{h^2}{4\pi^2} = \hbar^2 \;..... (22)$$

$$\therefore \frac{4\pi^2}{h^2} = \frac{1}{\hbar^2} \;..... (23)$$

ان الرمز $\hbar$ يلفظ اج-بار (h-bar)

نعوض المعادلة (23) في المعادلة (20) و نعيد ترتيبها

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V)\Psi_{(x)} = 0 \qquad .....(24)$$

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi_{(x)} = 0 \qquad .....(24)$$

ان المعادلة (24) هي معادلة شرودينكر ببعد واحد هو x و هي تتضمن ما يلي:

أ- الخاصية الجسيمية ممثلة بالكتلة m.

ب-الخاصية الموجية ممثلة بالسعة Ψ.

ت-الطاقة الكلية E و الطاقة الكامنه V و ثابت بلانك h.

ث-حد الطاقة الحركية $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ و يسمى عامل الطاقة الحركية.

ان المعادلة (24) تتضمن جميع شروط الكم و لذلك فهي المعادلة التي سوف تمثل ميكانيك الكم.

يمكن من خلال هذه المعادلة حساب الطاقة الكلية لجسيم كتلته m و يتحرك باتجاه المحور x.

يمكن التعبير عن المعادلة بدلالة الاحداثيات y و z من خلال الاستعاضة عن العامل $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ بواسطة $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ او $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

ان معادلة شرودينكر التي تصف الحركة ببعدين x و y هي

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x,y)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_{(x,y)}}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi_{(x,y)} = 0 \qquad .....(25)$$

كما ان معادلة شرودينكر التي تصف الحركة بثلاثة ابعاد هي

$$\frac{\partial^2\Psi_{(x,y,z)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_{(x,y,z)}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi_{(x,y,z)}}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi_{(xy,z)} = 0 \qquad .....(26)$$

خامسا- نحول المعادلة (24) الى صيغة معادلة القيمة الذاتية:

خامسا- نحول المعادلة (24) الى صيغة معادلة القيمة الذاتية:

ان صيغة معادلة القيمة الذاتية تمتلك الصيغة المبينة في المعادلة (27)

A*f*=a*f* ..... (27)

اي انها تتكون من عامل مضروب في دالة يساوي ثابت مضروب في نفس الدالة.

نضرب المعادلة (24) بالمقدار $\frac{-\hbar^2}{2m}$ و نعيد ترتيبها

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2}-(E-V)\Psi_{(x)}=0 \qquad \ldots..(28)$$

نفتح الاقواس و نعيد ترتيب المعادلة

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2}-E\Psi_{(x)}+V\Psi_{(x)}=0 \qquad \ldots..(29)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{(x)}}{\partial x^2}+V\Psi_{(x)}=E\Psi_{(x)} \qquad \ldots..(30)$$

و لكون الدالة $\Psi_{(x)}$ مشتركة بين الحدين في الجانب الايسر من المعادلة (30) يمكن اعادة ترتيب المعادلة

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)\Psi_{(x)}=E\Psi_{(x)} \qquad \ldots..(31)$$

ان المعادلة (32) هي معادلة شرودينكر بصيغة معادلة القيمة الذاتية.

ان الحد $\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)$ في المعادلة (31) يمثل العامل او المؤثر و يدعى العامل الهاملتوني

و هو مؤثر الطاقة الكلية اي المؤثر الذي يحسب الطاقة الكلية عندما يؤثر على الدالة.

يرمز للعامل الهاملتوني بالرمز $\hat{H}$

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right) = \hat{H} \ldots\ldots (32)$$

و ان $\Psi_{(x)}$ تمثل الدالة الذاتية

و E تمثل القيمة الذاتية و هي طاقة النظام الكلية.

و لذلك يمكن كتابة معادلة شرودينكر بالصيغة العامة التالية

و هي صيغة معادلة القيمة الذاتية

$$\hat{H}\Psi_{(x)} = E\Psi_{(x)} \ldots\ldots (33)$$

تفسير الدالة Ψ

تفسير الدالة بساي

و الحلول الدقيقة لمعادلة شرودنكر

تمتلك معادلة شرودنكر الصيغة التالية

$$\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi_{(x)} = 0$$

و يمكن كتابتها بالصيغة التالية

$$\hat{H}\Psi_{(x)} = E\Psi_{(x)}$$

و هي الصيغة التي تدعى معادلة القيمة الذاتية.

ان اهم ما يميز معادلة شرودنكر هي الدالة Ψ التي تصف حالة النظام و لذلك يطلق عليها دالة الحالة.

ما هو تفسير الدالة بساي؟

تفسير الدالة بساي

هناك تفسيران للدالة Ψ

اولا- تفسير شرودنكر الذي يفترض بان الدالة بساي تمثل سعة الموجة المصاحبة لحركة النظام.

و قد تم رفض هذا التفسير من قبل العلماء.

ثانيا- تفسير ماكس بورن و الذي يفسرها كما يلي:

أ- ان Ψ هي دالة لاحتمالية اي انها تعبر عن احتمالية وجود الجسيم.

ب- أن Ψ^2 تمثل كثافة الاحتمالية.

الحلول الدقيقة لمعادلة شرودنكر

يمكن ان نحل معادلة شرودنكر حلا دقيقا لاربعة انظمة بسيطة فقط و هي

اولا- جسيم في صندوق.

ثانيا- المهتز التوافقي.

ثالثا- الدوار الصلد.

رابعا- ذرة الهايدروجين.