CH4

Schrödinger Equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

تطبيقات على معادلة شرودنجر

١- مسائل امادية البعد :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad \text{---(1)}$$

هنا $\psi = \psi(x)$ دالة الموجة

$U = U(x)$ الجهد المؤثر على الجسيم

كما انه الجسيمات تتحرك بسرعة بطيئة لتجنب التأثير الذي

الجسيمات
- جسيمات حرة [ذات طاقة موجبة]
- جسيمات مقيدة [تأثير قوى جذب على الجسيمات] [وتكون محصورة في مكان محدد بالفضاء]

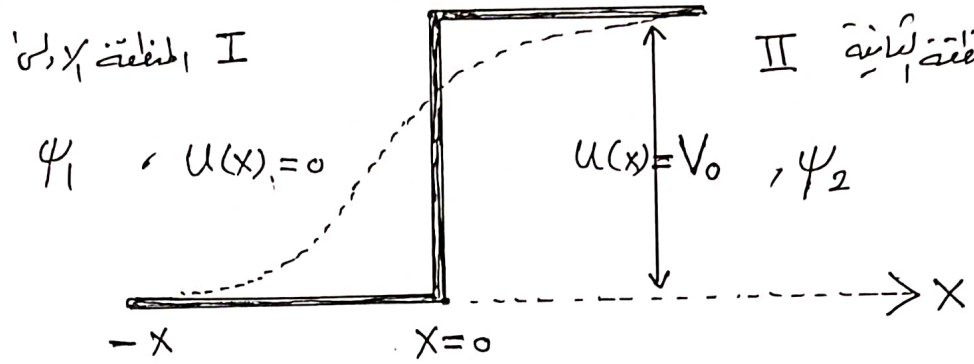
٢- الجسيمات الحرة

مثال (١) : جسيم يسقط على حاجز جهد على شكل عتبة ارتفاعه V_0 الدالة

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

طاقة الجسيم $E > 0$ والسقوط من اليسار الى اليمين .

جد معامل الانعكاس ؟؟



يمكننا تمييز حالتين للطاقة (طاقة الجسيم) $E > 0$ هما

1- $E < V_0$
2- $E > V_0$

الحالة الأولى $E < V_0$:

في المنطقة الأولى (I) تكون معادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 = 0 \qquad \text{——— (2)}$$

في المنطقة الثانية II تكون معادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi_2 = 0$$

وبما أن $E < V_0$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi_2 = 0 \qquad \text{——— (3)}$$

لنفرض أن $\frac{2mE}{\hbar^2} = \alpha^2$ ، $\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = \beta^2$ نعوض في المعادلتين (2) و (3)

(3)

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \alpha^2 \psi_1 = 0 \qquad \text{——(4)}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \beta^2 \psi_2 = 0 \qquad \text{——(5)}$$

الحل الرياضي للمعادلة (4) هو

$$\psi_1 = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} \qquad \text{——⑥}$$

والمعادلة (5) هو

$$\psi_2 = C e^{\beta x} + D e^{-\beta x} \qquad \text{——(7)}$$

علينا ايجاد الثوابت A, B, C, D لكي يكتمل الحل وهذه نجدها من الشروط الحدودية.

١- الدالة الموجية ψ يجب ان تساوي شيء عند قيم $x = \pm\infty$ لتكون دالة مقبولة فيزيائياً.

نلاحظ ان ψ_1 تحقق الشرط مهما كانت قيمة x لانها دالة تذبذبية
أما ψ_2 فانها تذهب للانهاية عند $x = \infty$ ومن أجل
جعلها مقبولة نضع $C = 0$ لنتخلص من الحد الاول فيها

٢- الدالة الموجية ومشتقتها الاولى يجب ان تكون مستمرة في جميع نقاط الفضاء
أي أن

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}$$

$$\therefore \quad A + B = D$$

$$i\alpha(A - B) = -\beta D$$

(4)

نعوض عند نقطة D في العلاقة الثانية باستخدام العلاقة الأولى

$$i\alpha (A-B) = -\beta (A+B)$$

$$\frac{A-B}{A+B} = \frac{i\beta}{\alpha}$$

وحلها نجد بعد التبسيط أن

$$\frac{B}{A} = \frac{\alpha - i\beta}{\alpha + i\beta}$$

النسبة $\frac{B}{A}$ تمثل نسبة الموجة المنعكسة الى الموجة الساقطة

أو ما يسمى كلاسيكيا معامل الانعكاس

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\alpha - i\beta}{\alpha + i\beta} \quad \frac{\alpha + i\beta}{\alpha - i\beta} = 1$$

وهذه النتيجة تبين ان الموجة لا تمتلك طاقة كافية لاجتياز الحاجز .

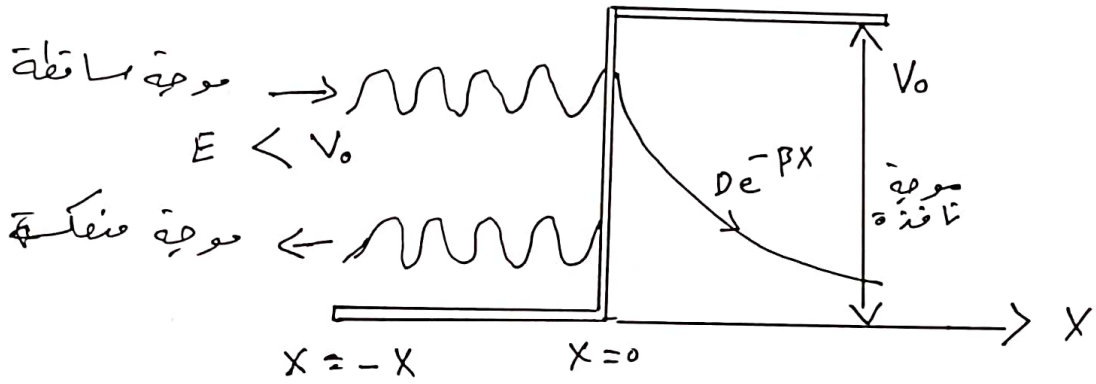
يمكننا الوصول الى نفس النتيجة باستخدام علاقة كثافة التيار للموجة الساقطة وكثافة التيار للموجة المنعكسة ونسبة تيار الانعكاس الى تيار السقوط أيضاً يساوي واحد. $\frac{Jr(x)}{Ji(x)} = 1$

[واجب]

هذه النتيجة تتفق مع النظرية الكلاسيكية ولكننا نجد انه هناك موجة بعين الحاجز $\psi_2 = D e^{-\beta x}$ ولاتساوي صفر وهذا معناه وجود احتمالية للجسيم انه يتواجد بعين الحاجز وهذا يتعارض مع الفرض الكلاسيكي ولكننا نلاحظ ان الدالة ψ_2 تتناقص بعين الحاجز وهذا التناقص يزداد كلما كانت β كبيرة اي انه طاقة الجسيم تكون صغيرة .

السؤال المطروح الآن: ما سبب أنّ تيار الاحتمال خلف الحاجز يساوي صفراً بينما كثافة الاحتمال لا تساوي صفراً؟

الجواب هنا: إنّ الجسيم تمثله الحزمة الموجية بينما الدالة هي أحد مركبات الحزمة أي أنه جزء من الحزمة يخترق الحاجز



جسيم ساقط على عتبة جهد طاقته أقل من ارتفاع الحاجز

الحالة الثانية $E > V_0$:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi_1 = 0 \qquad \text{——— (8} \qquad x < 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_2 = 0 \qquad \text{——— (9} \qquad x \geq 0$$

ليكن $\frac{2mE}{\hbar^2} = \alpha^2$ ، $\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = \beta^2$

نعوض في 8 ، 9 كما يلي

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \alpha^2 \psi_1 = 0 \qquad \text{——— (10)}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \beta^2 \psi_2 = 0 \qquad \text{——— (11)}$$

والحل لهاتين المعادلتين هو حل تذبذبي

$$\psi_1 = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} \qquad \text{——— (12)}$$

$$\psi_2 = C e^{i\beta x} + D e^{-i\beta x} \qquad \text{——— (13)}$$

في المعادلة (13) فإن D تساوي صفر لأنه لا يوجد موجة منعكسة لكونه الضوء من اليسار أي اليمين ولا يوجد سبب للانعكاس

وبتطبيق شرط الاستمرار على المعادلتين 12 ، 13 نحصل على

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}$$

$$A + B = C$$

$$i\alpha (A - B) = -i\beta C$$

$$\frac{B}{A} = \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta}$$

(7)

واذا استخدمنا علاقات التيار لايجاد $j_r(x)$ ، $j_i(x)$ ، $j_T(x)$

الموجة الساقطة $\psi_1 = Ae^{i\alpha x}$

الموجة المنعكسة $\psi_1 = Be^{-i\alpha x}$

الموجة النافذة $\psi_2 = Ce^{i\beta x}$

نحصل على

$$j_i(x) = \frac{\hbar\alpha}{m}|A|^2$$

$$j_r(x) = \frac{\hbar\alpha}{m}|B|^2$$

$$j_T(x) = \frac{\hbar\beta}{m}|C|^2$$

معامل الانعكاس R ،

$$R = \frac{j_r(x)}{j_i(x)} = \left(\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)^2$$

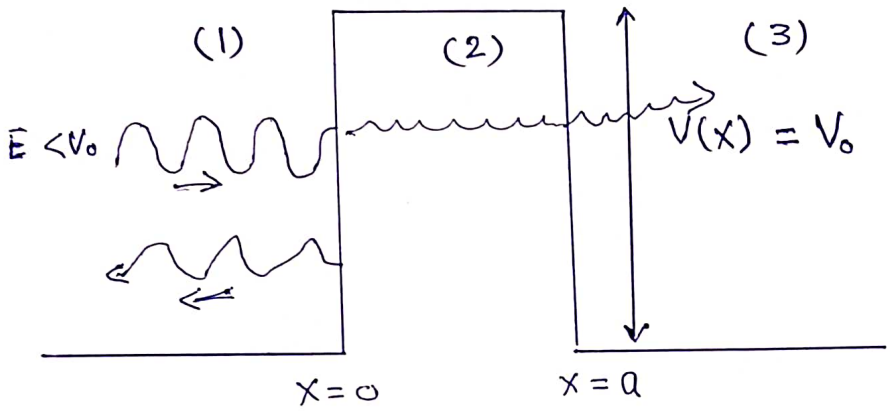
ومعامل النفوذ T ،

$$T = \frac{j_T(x)}{j_i(x)} = \frac{4\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2}$$

ب: أثبت ان $R+T=1$ ؟

(1) Talib

مثال (2) حركة جسيم عبر عائقة جهد محدود العرض وله ارتفاع ثابت V_0 باتجاه المحور $-X$ كما في الشكل.



$$V(x) = 0 \qquad x < 0$$
$$V(x) = V_0 \qquad 0 \leq x \leq a$$
$$V(x) = 0 \qquad x > a$$

سنناقش حالة الجسيم عندما تكون طاقة الجسيم الساقط E أكبر من V_0،

(1) $E > V_0$

حل معادلة شرودنكر لهذا النوع من الجهد هي

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\,\psi_1(x) = 0 \qquad \text{في المنطقة الأولى}$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\psi_2(x) = 0 \qquad \text{في المنطقة الثانية}$$

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\,\psi_3(x) = 0 \qquad \text{في المنطقة الثالثة}$$

هذه المعادلات لها الحلول التالية عندما $E > V_0$

$$\psi_1(x) = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} \qquad \text{with} \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\psi_2(x) = F e^{i\beta x} + G e^{-i\beta x} \qquad \text{with} \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$$

$$\psi_3(x) = C e^{i\alpha x} \qquad [\text{لا توجد موجة منعكسة}]$$

(2) Talib

نطبق شروط استمرارية الدالة

$$\text{at} \quad x = 0 \quad ; \quad \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$A + B = F + G \qquad \text{——— (1)}$$

$$\text{at} \quad x = a \quad ; \quad \psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$F e^{i\beta a} + G e^{-i\beta a} = C e^{i\alpha a} \qquad \text{——— (2)}$$

$$\text{at} \quad x = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2}{\partial x}$$

$$i\alpha A - i\alpha B = i\beta F - i\beta G \qquad \text{——— (3)}$$

$$\text{at} \quad x = a \quad ; \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial x} = \frac{\partial \psi_3}{\partial x}$$

$$i\beta F e^{i\beta a} - G i\beta e^{-i\beta a} = C i\alpha e^{i\alpha a} \qquad \text{——— (4)}$$

سنحاول إيجاد معامل النفوذ $T = \left|\frac{C}{A}\right|^2$ ومنه نجد معامل الانعكاس $R = 1 - T$ وذلك بحل المعادلات من (1) إلى (4).

نضرب المعادلة (1) بـ $i\alpha$ لنجد

$$i\alpha B = i\alpha [F + G] - i\alpha A$$

نعوض في المعادلة (3)

$$i\alpha A - [i\alpha (F + G) - i\alpha A] = i\beta [F - G]$$

$$2\alpha A = (\alpha + \beta) F + (\alpha - \beta) G$$

$$2A = \left(\frac{\alpha + \beta}{\alpha}\right) F + \left(\frac{\alpha - \beta}{\alpha}\right) G \qquad \text{——— (5)}$$

(3). Talib

نضرب المعادلة (2) بـ $i\beta$ لنجد

$$i\beta G e^{-i\beta a} = i\beta C e^{i\alpha a} - i\beta F e^{i\beta a}$$

نعوض في المعادلة (4)

$$i\beta F e^{i\beta a} - (i\beta C e^{i\alpha a} - i\beta F e^{i\beta a}) = C i\alpha e^{i\alpha a}$$

$$2\beta F e^{i\beta a} = (\alpha+\beta) C e^{i\alpha a}$$

$$F = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha+\beta}{\beta}\right) C e^{i\alpha a} e^{-i\beta a} \quad \text{——(6)}$$

نضرب (2) بـ $i\beta$ لنجد

$$i\beta F e^{i\beta a} + i\beta G e^{-i\beta a} = i\beta C e^{i\alpha a}$$

$$i\beta F e^{i\beta a} = i\beta C e^{i\alpha a} - i\beta G e^{-i\beta a}$$

نعوض في العلاقة (4)

$$i\beta C e^{i\alpha a} - i\beta G e^{-i\beta a} - i\beta G e^{-i\beta a} = C i\alpha e^{i\alpha a}$$

$$2\beta G e^{-i\beta a} = -(\alpha-\beta) C e^{i\alpha a}$$

$$G = -\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha-\beta}{\beta}\right) C e^{i\alpha a} e^{i\beta a} \quad \text{——(7)}$$

نعوض على كل من F ، G من العلاقتين (6) ، (7) في العلاقة (5)

(4) Talib

$$2A = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha+\beta}{\alpha}\right)\left(\frac{\alpha+\beta}{\beta}\right) C\, e^{i\alpha a}\, e^{-i\beta a} - \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha-\beta}{\alpha}\right)\left(\frac{\alpha-\beta}{\beta}\right) C\, e^{i\alpha a}\, e^{i\beta a}$$

$$2A = \frac{C}{2} e^{i\alpha a}\left(\frac{\alpha^2+2\alpha\beta+\beta^2}{\alpha\beta}\right) e^{-i\beta a} - \frac{C}{2} e^{i\alpha a}\left(\frac{\alpha^2-2\alpha\beta+\beta^2}{\alpha\beta}\right) e^{i\beta a}$$

$$2A = \frac{C}{2\alpha\beta} e^{i\alpha a}\left[\alpha^2 e^{-i\beta a} + 2\alpha\beta e^{-i\beta a} + \beta^2 e^{-i\beta a} - \alpha^2 e^{i\beta a} + 2\alpha\beta e^{i\beta a} - \beta^2 e^{i\beta a}\right]$$

$$2A = \frac{C}{2\alpha\beta} e^{i\alpha a}\left[-\alpha^2\left(e^{i\beta a} - e^{-i\beta a}\right) + 2\alpha\beta\left(e^{i\beta a} + e^{-i\beta a}\right) - \beta^2\left(e^{i\beta a} - e^{-i\beta a}\right)\right]$$

$$2A = \frac{C}{2\alpha\beta} e^{i\alpha a}\left[-2i\alpha^2 \sin(\beta a) + 4\alpha\beta\cos(\beta a) - 2i\beta^2 \sin(\beta a)\right]$$

$$2A = C\, e^{i\alpha a}\left[2\cos(\beta a) - i\,\frac{(\alpha^2+\beta^2)}{\alpha\beta}\sin(\beta a)\right]$$

$$\frac{A}{C} = \frac{1}{2} e^{i\alpha a}\left[2\cos(\beta a) - i\,\frac{(\alpha^2+\beta^2)}{\alpha\beta}\sin(\beta a)\right]$$

$$\left|\frac{A}{C}\right|^2 = \left(\frac{A}{C}\right)\left(\frac{A}{C}\right)^*$$

(5) Talib

:

$$\left|\frac{A}{C}\right|^2 = \left\{\frac{1}{2}e^{i\alpha a}\left[2\cos(\beta a) - i\frac{(\alpha^2+\beta^2)}{\alpha\beta}\sin(\beta a)\right]\right\} *$$

$$\left\{\frac{1}{2}e^{-i\alpha a}\left[2\cos(\beta a) + i\frac{(\alpha^2+\beta^2)}{\alpha\beta}\sin(\beta a)\right]\right\}$$

$$\left|\frac{A}{C}\right|^2 = \cos^2(\beta a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2+\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2 \sin^2(\beta a)$$

$[\sin^2(\beta a) - \sin^2(\beta a)]$ نضيف للطرف الايمن القيمة صفر ،

$$\left|\frac{A}{C}\right|^2 = \cos^2(\beta a) + [\sin^2(\beta a) - \sin^2(\beta a)] + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2+\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2 \sin^2(\beta a)$$

$$\left|\frac{A}{C}\right|^2 = 1 + \left[\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2+\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2 - 1\right]\sin^2(\beta a)$$

نبسط المقدار داخل القوس الكبير

$$\left[\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2+\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2 - 1\right] = \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2-\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2$$

$$\therefore \left|\frac{A}{C}\right|^2 = 1 + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2-\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2 \sin^2(\beta a)$$

$$\text{or} \quad \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha^2-\beta^2}{\alpha\beta}\right)^2 \sin^2(\beta a)\right]^{-1}$$

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|^2$$

وهو يمثل معامل النفوذ

$$R = 1 - T = \left[1 + \frac{4\alpha^2\beta^2}{(\alpha^2-\beta^2)^2 \sin^2(\beta a)}\right]^{-1}$$

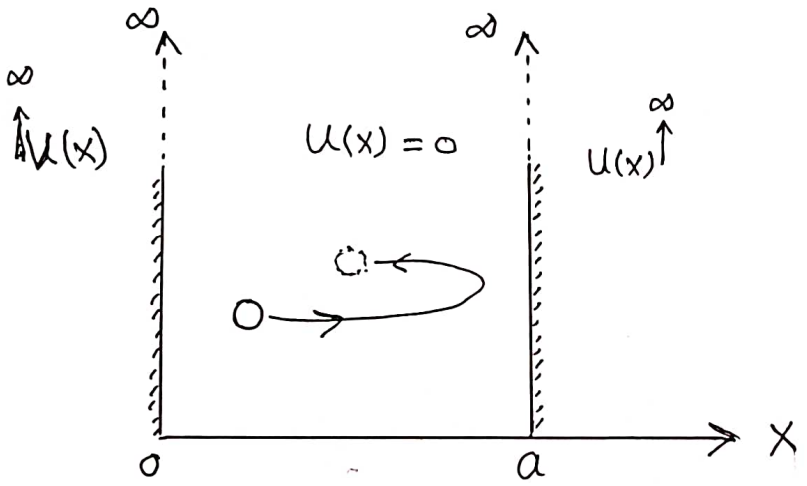
(I) (H)

الجسيمات المقيدة :

[1]- بئر جهد لا نهائي الارتفاع [جسيم في صندوق]

الجسيم داخل هذا الجهد يكون $U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$

حراً ما عدا في النهايتين $x = 0$ و $x = a$ أي توجد قوة تمنعه من الهروب .



خارج البئر
$\psi(x) = 0$
داخل البئر
$U(x) = 0$

بئر جهد لانهائي الارتفاع

: $E > 0$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \quad \text{——— (1)}$$

أو

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \quad \text{——— (2)}$$

with $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

المعادلة (2) هي معادلة متذبذب توافقي كلاسيكي حلها هو

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad \text{——} (3)$$

نستخدم حالات الحدود والاستمرارية لإيجاد الثوابت

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad \text{——} (4)$$

$$\psi(0) = A\sin(0) + B\cos(0)$$

$$\psi(0) = B$$

لذلك يجب أن تكون $B = 0$ لتحقيق الحدود خارج البئر

$$\psi(x) = A\sin(kx) \quad \text{——} (5)$$

$$\psi(a) = 0 = A\sin(ka)$$

أما $A = 0$ وهذا حل غير مقبول معناه أنه لا توجد دالة موجية لأن $B = 0$ أيضاً لذلك

$$\sin(ka) = 0$$

$$ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \ldots, \pm n\pi$$

نحن نعرف أن $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ لذلك القيم السالبة لا معنى لها ولذلك فإن $k = 0$ لا تعطي شيئاً فقط

$$\therefore ka = \pi, 2\pi, \ldots, n\pi$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$\therefore \quad \psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \qquad \text{——(6)}$$

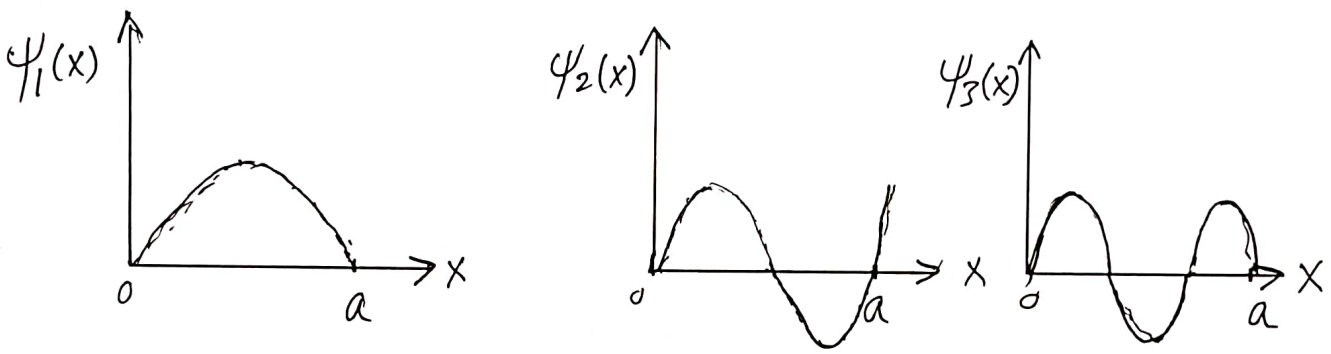
يمكن ايجاد الثابت A من خلال المعايرة

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx)\, dx = 1$$

$$|A|^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \qquad \text{——(7)}$$



أول ثلاث حالات مستقرة لبئر جهد لانهائي الارتفاع

* الدالة $\psi(x)$ تتناوب بين ان تكون دالة زوجية وفردية مرة أخرى نسبة الى مركز البئر
* بزيادة قيمة n تتقاطع الدالة مع المحور x (عقد) وعدد العقد يساوي $(n-1)$.
* الدوال تكون متعامدة $\int \psi_m^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = 0$

(4)

$$\int \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

$$= \frac{1}{a}\int_0^a \cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)dx$$

$$= \left\{\frac{1}{(m-n)\pi}\sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi}\sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right\}\Bigg|_0^a$$

$$= \left\{\frac{\sin[(m-n)\pi]}{(m-n)\pi} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{(m+n)\pi}\right\}$$

$$= 0$$

or $$\int \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \delta_{mn} \qquad \text{——— (8)}$$

تسمى δ_{mn} كرونكر دلتا ولها التعريف التالي

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{if } m \neq n \\ 1 & \text{if } m = n \end{cases}$$

* تعتبر الدوال متكاملة أي يمكنه توصيف اي دالة $f(x)$ بدلالة تلك الدوال .

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad \text{—(9)}$$

يمكن إيجاد الثابت C_n بطريقة فورير

نضرب طرفي المعادلة (9) في $\psi_m^*(x)$ ثم نجري التكامل.

$$\int \psi_m^*(x) f(x)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \int \psi_m^*(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} C_n \delta_{mn} = C_m$$

$$\therefore C_n = \int \psi_n(x) f(x)\, dx \qquad \text{——— (10)}$$

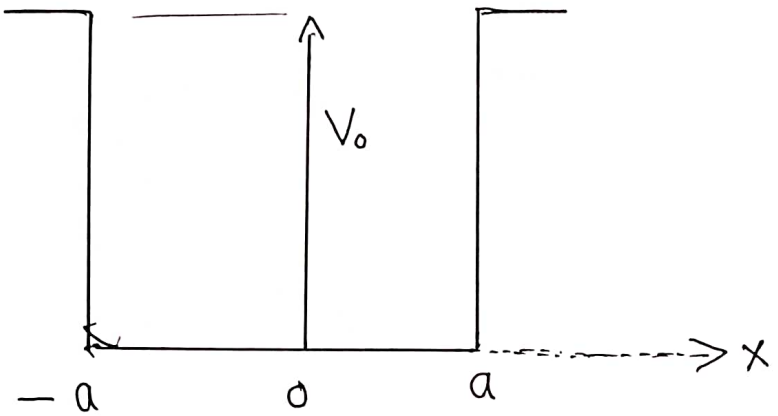
أما الطاقة نتحسب منه $K_n = \frac{n\pi}{a}$ والعلاقة

$$E_n = \frac{\hbar^2 K_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2} \qquad \text{——— (11)}$$

أما $E < 0$ فلا يمكن أن تحصل في هذا المثال.

Finite Potential well

[2] - بئر جهد محدود الارتفاع



$$U(x)=\begin{cases}0 & -a<x<a\\ V_0 & |x|>a\end{cases}$$

بئر جهد ارتفاعه V_0 وعرضه $2a$

$E<V_0$ الجسيم مقيد داخل البئر لذلك نعادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\,\psi_1(x)=0 \qquad -a<x<a$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\,\psi_2(x)=0 \qquad |x|>a$$

ليكن $\frac{2m}{\hbar^2}E=\alpha^2$ و $\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)=\beta^2$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\alpha^2\psi_1(x)=0 \qquad -a<x<a$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-\beta^2\psi_2(x)=0 \qquad |x|>a$$

يمكن وضع الحلول التالية للمعادلتين اعلاه

$$\psi_1(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x) \quad \text{——— (1)}$$

$$\psi_2(x) = C e^{-\beta x} + D e^{\beta x} \quad \text{——— (2)}$$

في المعادلة (2) تكون $D = 0$ اذا كانت $\psi_2(x)$ تمثل جسيماً في المنطقة $x > a$.

كذلك $C = 0$ اذا كانت $\psi_2(x)$ تمثل جسيماً في منطقة $x < -a$ وذلك لكي لا تذهب الدالة الموجية للمالا نهاية خارج حدود البئر.

ومن شرط الاستمرارية عند الحدود الفاصلة نجد أن

$$\psi_1(x) = \psi_2(x) \quad at \quad x = \pm a$$

$$\frac{d\psi_1(x)}{dx} = \frac{d\psi_2(x)}{dx} \quad at \quad x = \pm a$$

وبتطبيق هذه الشروط على المعادلتين (1) و (2) نحصل على

$$A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a) = C e^{-\beta a} \quad \text{——— (3)} \quad x = a$$

$$\alpha A \cos(\alpha a) - \alpha B \sin(\alpha a) = -\beta C e^{-\beta a} \quad \text{——— (4)} \quad x = a$$

$$-A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a) = D e^{-\beta a} \quad \text{——— (5)} \quad x = -a$$

$$\alpha A \cos(\alpha a) + \alpha B \sin(\alpha a) = \beta D e^{-\beta a} \quad \text{——— (6)} \quad x = -a$$

(8)

نطرح المعادلتين (3) ، (5) [(3) − (5)] ونجمعها مرة ثانية

[(3)+(5)] نحصل على المعادلة التالية

$$2A \sin(\alpha a) = (C-D)\, e^{-\beta a} \quad \text{——— (7)}$$ ناتج الطرح

$$2B \cos(\alpha a) = (C+D)\, e^{-\beta a} \quad \text{——— (8)}$$ ناتج الجمع

كذلك نطرح المعادلة (4) من (6) [(6) − (4)] ونجمعها مرة اخرى

[(6)+(4)] نحصل على المعادلة التالية

$$2\alpha B \sin(\alpha a) = \beta(C+D)\, e^{-\beta a} \quad \text{——— (9)}$$ ناتج الطرح

$$2\alpha A \cos(\alpha a) = -\beta(C-D)\, e^{-\beta a} \quad \text{——— (10)}$$ ناتج الجمع

وعلى فرض انه الثوابت $A \neq 0$ و $C \neq D$

بقسمة (10) على (7) نحصل على

$$\alpha \cot(\alpha a) = -\beta \quad \text{——— (11)}$$

وعلى فرض انه $B \neq 0$ و $C \neq D$

بقسمة (9) على (8)

$$\alpha \tan(\alpha a) = \beta \quad \text{——— (12)}$$

لا يمكن أن تصح المعادلتين (11) و (12) في آن واحد فبقسمة (12) على (11) نحصل على $\tan^2(\alpha a) = -1$ وهذا معناه أن α كمية خيالية أو أن β كمية سالبة وهذا يناقض حقيقة الكميتين لذلك سوف نميز لدينا حالتان متميزتان :-

الحالة الأولى : $A=0$ وأن $C=D$ ومنها نحصل على

$$\alpha \tan(\alpha a) = \beta \qquad \text{——— (13)}$$

الحالة الثانية $B=0$ و $C=D$ ومنها نحصل على

$$\alpha \cot(\alpha a) = -\beta \qquad \text{——— (14)}$$

عليه المعادلتين (13) و (14) هما الحل الرياضي للمسألة ولا يمكننا إيجاد جذورها بالحل التحليلي الا بالحل العددي أو بطريقة الرسم وسنختار طريقة الرسم هنا :

نفرض أن $\alpha a = \xi$ وكذلك $\beta a = \eta$

نعوض في العلاقة (13)

$$\frac{\xi}{a}\tan(\xi) = \frac{\eta}{a}$$

$$\xi \tan(\xi) = \eta \qquad \text{——— (15)}$$

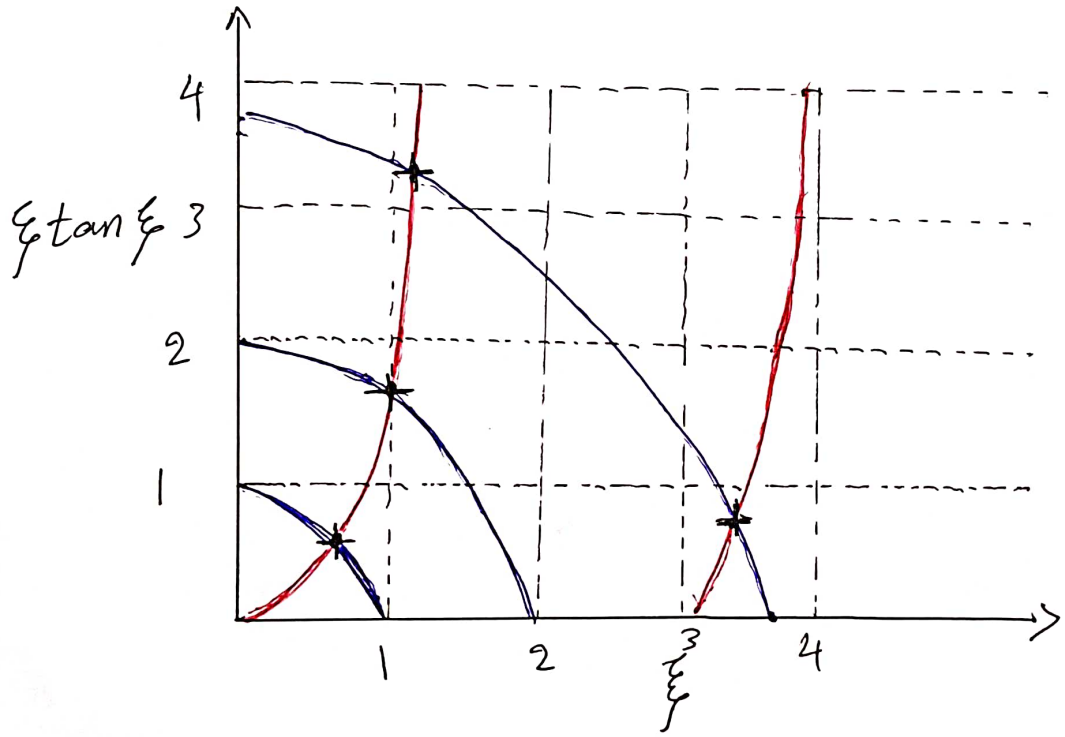
$$\xi^2 + \eta^2 = \alpha^2 a^2 + \beta^2 a^2$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} E a^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) a^2$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \qquad \text{——————} (16)$$

العلاقة (16) تمثل معادلة دائرة نصف قطرها $\left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\, a \right]$

نرسم $\xi \tan(\xi)$ كدالة للمتغير ξ ونرسم الدائرة أعلاه عليها بنصف القطر أعلاه نحصل على الشكل التالي:

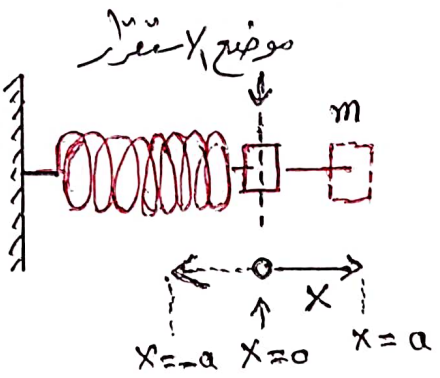


الحل بطريقة الرسم للمعادلة (13)

أن نقاط التقاطع تمثل جذور المعادلة (13).

بنفس الطريقة نرسم المعادلة $-\xi \cot(\xi)$ كدالة للمتغير ξ ولنفس الدائرة السابقة [واجب]

المتذبذب التوافقي البسيط Simple Harmonic oscillator



اذا سحبنا الكتلة m مسافة $(x=a)$ x الى جهة اليمين فانه النابض يحاول اعادة الكتلة الى موضع الاستقرار فينشأ قوة مقدارها F وهذه القوة تتناسب مع مقدار الازاحة $x=a$

$$F \propto -X$$

$$F = -KX$$

الاشارة السالبة تعني ان النابض يجذب الكتلة باتجاه الاستقرار

ثابت التناسب K يسمى ثابت النابض وهذا القانون هو قانون هوك .

$$F = -KX = m\frac{d^2X}{dt^2}$$

$$\frac{d^2X}{dt^2} + \frac{K}{m}X = 0$$

والحل لهذه المعادلة هو

$$X(t) = A\sin(wt) + B\cos(wt)$$

$$w = \sqrt{\frac{K}{m}}$$ ويمثل التردد الزاوي

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2$$ الطاقة الكامنة

$$U(x) = U(x_0) + U'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2}U''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$$

هنا استخدمنا مفكوك تايلور لدالة الطاقة الكامنة

1- $U(x_0)$ يمثل مقدار ثابت للدالة لذلك يمكنه وضع ثابت مكانه،

2- $U'(x_0)$ يمكنه اهمالها لانها تعتبر نهاية صغرى اي قيمتها تساوي صفر

3- $(x-x_0)$ ذات الأس اكبر من 2 تهمل لصغر قيمتها وعليه تكون الدالة

$$U(x) \simeq \frac{1}{2}U''(x_0)(x-x_0)^2$$

وهذه تصف حركة تذبذبية توافقية بسيطة حول النقطة x_0 بثابت تابض مؤثر $K = U''(x_0)$.

المسألة الكمية هي حل معادلة شرودنجر لهذا النوع

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad \text{——} (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi \quad \text{——} (2)$$

هنالك طريقتين لحل هذه المعادلة :

الطريقة الاولى : ← سنعيد كتابة المعادلة (2) بالشكل الآتي :

(3)

$$\left[\frac{P^2}{2m} + \frac{(m\omega x)^2}{2m}\right]\psi = E\psi \qquad \text{——— (3)}$$

هنا أفترض أن $\hat{P} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ هو مؤثر الزخم

وتكتب المعادلة (3) أيضاً

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[P^2 + (m\omega x)^2\right] \qquad \text{——— (4)}$$

يسمى $\hat{H}$ المؤثر الهاملتوني وهو مجموع الطاقة الحركية والكامنة للمتذبذب التوافقي

المؤثر : هو صيغة رياضية كما يكون x أو $\frac{d}{dx}$

أو اي شيء آخر يدخل على الدالة الموجية ويستخرج منها المعلومات المطلوبة .

لنعرف المؤثرين التاليين :

$$\left.\begin{aligned} a^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(+ip + m\omega x) \end{aligned}\right\} \qquad \text{——— (5)}$$

وهذه نتيجة من تحليل المعادلة (4) اذ فقد بينا مرتين بعد القسمة على $\hbar\omega$ لتحويلها الى مؤثرات بدون وحدات

لنجرب حاصل المؤثر

$$\hat{a}\,a^{\dagger} = \frac{1}{2\hbar m\omega}(ip + m\omega x)(-ip + m\omega x)$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)\right]$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[p^2 + (m\omega x)^2\right] - \frac{i}{2\hbar}[x, p]$$

القوس الأخير هو قوس تبادل بين x ، p .

العلماء المؤثرات يحتاج نوع من الدقة . لنجد قيمة قوس التبادل $[x, p]$.

$$[x, p]\, f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}f(x) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(x f(x))\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{df(x)}{dx} - x\frac{df(x)}{dx} - f(x)\frac{dx}{dx}\right)$$

$$= i\hbar\, f(x)$$

$$\therefore [x, p] = i\hbar \qquad \text{——— (6)}$$

نسمي العلاقة (6) علاقة التبادل الكانونية ، أما $f(x)$ فنسميها دالة أختبار test function

$$\therefore \quad \hat{a}\,a^{\dagger} = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}$$

$$\text{or} \qquad H = \hbar\omega\left(\hat{a}\,a^{\dagger} - \frac{1}{2}\right) \qquad \text{——— (7}$$

وبنفس الطريقة نجد أن $a^\dagger \hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}$

أو $\hat{H} = \hbar\omega (a^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$ ——(8)

وكذلك $[\hat{a}, a^\dagger] = 1$ ——(8a)

برهن هذه العلاقة ؟

وعليه تكون معادلة شرودنجر للمتذبذب التوافقي

$$\left.\begin{aligned} \hbar\omega (a^\dagger \hat{a} + \tfrac{1}{2})\psi &= E\psi \\ \hbar\omega (\hat{a} a^\dagger - \tfrac{1}{2})\psi &= E\psi \end{aligned}\right\} \quad ——(9)$$

اذا كانت الدالة ψ تحقق معادلة شرودنجر بطاقة E بحيث $\hat{H}\psi = E\psi$ فإن $a^\dagger\psi$ تحقق نفس المعادلة بطاقة مقدارها $E+\hbar\omega$ أي أن

$$\hat{H}(a^\dagger\psi) = (E + \hbar\omega)(a^\dagger\psi)$$

وسنبرهن هذه العلاقة.

$$\begin{aligned} \hat{H}(a^\dagger\psi) &= \hbar\omega (a^\dagger\hat{a} + \tfrac{1}{2})(a^\dagger\psi) \\ &= \hbar\omega (a^\dagger\hat{a}\, a^\dagger + \tfrac{1}{2} a^\dagger)\psi \\ &= \hbar\omega\, a^\dagger (\hat{a} a^\dagger + \tfrac{1}{2})\psi \end{aligned}$$

$$= a^\dagger \left[\hbar\omega\left(a^\dagger\hat{a}+1+\tfrac{1}{2}\right)\psi\right]$$

$$= a^\dagger \left[\hbar\omega\left(a^\dagger\hat{a}+\tfrac{1}{2}+1\right)\psi\right]$$

$$= a^\dagger \left[H+\hbar\omega\right]\psi$$

$$= a^\dagger \left[\hat{H}\psi+\hbar\omega\psi\right]$$

$$= a^\dagger \left[E\psi+\hbar\omega\psi\right] = a^\dagger\left[E+\hbar\omega\right]\psi$$

$$H(a^\dagger\psi) = \left[E+\hbar\omega\right](a^\dagger\psi) \quad \text{—— (10)}$$

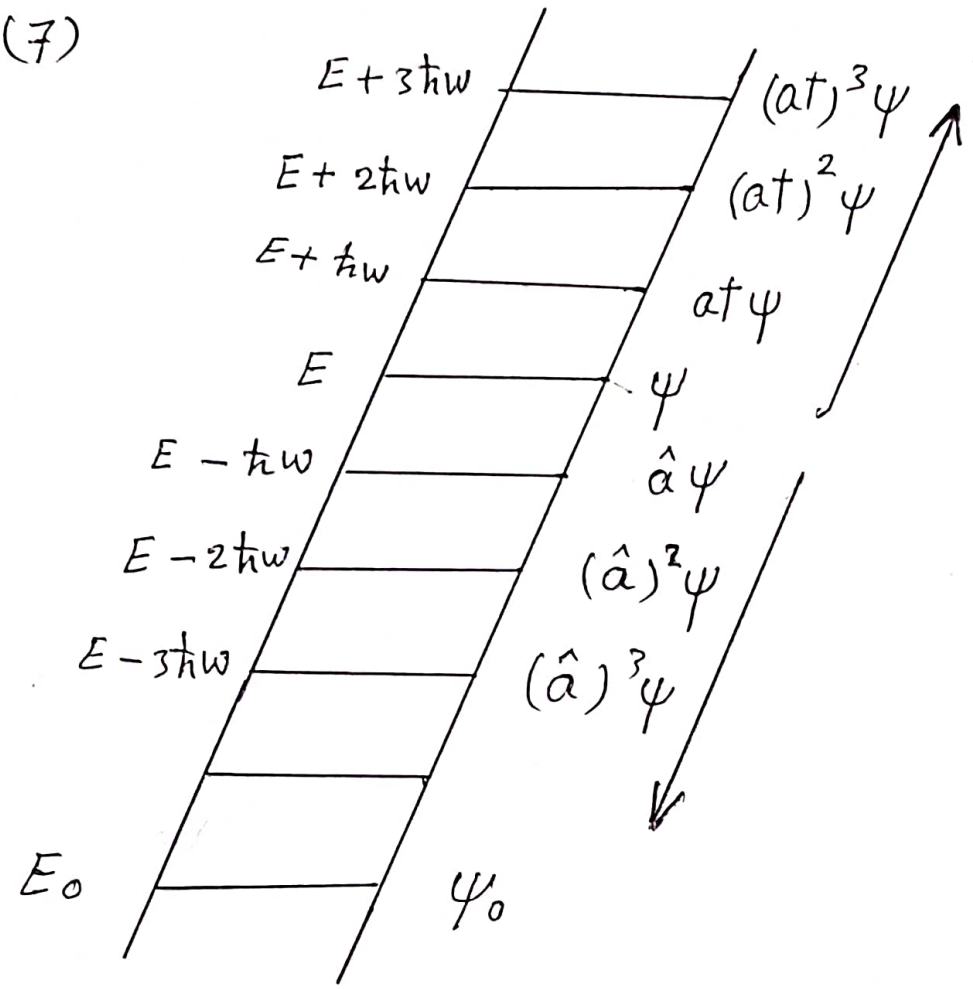
أو اننا استخدمنا العلاقة (8a) لاستبدال $\hat{a}a^\dagger$ بـ $a^\dagger\hat{a}+1$ مع ملاحظة ان المؤثر يتبادل مع اي ثابت.

بنفس الطريقة فان (11) $\hat{H}(\hat{a}\psi) = (E-\hbar\omega)(\hat{a}\psi)$

وعليكم ايجازها ؟

تسمى المؤثرات $a^\dagger, \hat{a}$ بالمؤثرات السلمية Ladder operators كان $a^\dagger$ يسمى مؤثر رفع او نحو raising operator أما المؤثر $\hat{a}$ فيسمى مؤثر خفض مؤثر آباده Lowering operator.

والشكل التالي يمثل تأثير مؤثري الرفع والخفض على دوال الطيفية التواقيع ما يقابلها من الطاقات.



سلّم الحالات (الدوال) للمتذبذب التوافقي .

الحل أي حد يعمل المؤثر $\hat{a}$ ؟

$$\hat{a}\,\psi_0 = 0 \qquad (12)$$

وهذه علاقة مهمة جداً ومنها نستطيع حساب $\psi_0(x)$ أو ما يسمى دالة الاستقرار أو الدالة الأرضية
ground state

لتجربة عملية حساب $\psi_0(x)$ ؟

(8)

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (i\hat{p} + m\omega x)$$

$$\hat{a}\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \psi_0 = 0$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x\, dx$$

$$\ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{Constant}$$

$$\psi_0 = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \qquad \text{——(13)}$$

وبإجراء عملية المعايرة يمكننا إيجاد الثابت A

$$\int \psi_0^*(x)\, \psi_0(x)\, dx = 1$$

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar}\, dx = 1$$

$$|A|^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1$$

$$A^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

$$\therefore \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \qquad \text{——(14)}$$

ولحساب الطاقة:

نعوض العلاقة (14) في العلاقة (9) مع ملاحظة أنه $\hat{a}\psi_0 = 0$ نجد أنه

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{——— (15)}$$

عند خلال معرفتنا بالدالة والطاقة (الأرضية) يمكننا تطبيق مؤثر الرفع عدة مرات لإيجاد الدوال المثارة

$$\left.\begin{aligned}\psi_n(x) &= A_n (a^+)^n \psi_0(x) \\ E_n &= (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\end{aligned}\right\} \qquad \text{——— (16)}$$

A_n ثابت المعايرة.

مثال:

جد الحالة المثارة الأولى للمتذبذب التوافقي؟

لدينا $\psi_n(x) = A_n (a^+)^n \psi_0(x)$

$$\therefore \psi_1(x) = A_1 a^+ \psi_0(x)$$

$$= \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$= A_1\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \times e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

والآن نعاير الدالة لإيجاد A_1؟

(10)

$$\int |\psi_1(x)|^2 dx = \int \psi_1^*(x)\, \psi_1(x)\, dx = 1$$

$$|A_1|^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = 1$$

$$|A_1|^2 = 1 \Rightarrow A_1 = 1$$ نأخذ القيمة الموجبة

$\hat{a}$ هو a^- و $\hat{a}^\dagger$ هو a^+ المعطى بـ: المرافق الهرميتي لـ

أي أن $(a^\dagger)^* = \hat{a}$ وهذا صحيح

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a^\dagger \psi_n)^* (a^\dagger \psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}\, \psi_n^*\, a^\dagger \psi_n\, dx$$

$$= \hat{a} (a^\dagger \psi_n)^* \psi_n\, dx$$

لدينا أيضا

$$\left.\begin{aligned} a^\dagger \hat{a}\, \psi_n &= n\, \psi_n \\ \hat{a}\, a^\dagger\, \psi_n &= (n+1)\, \psi_n \end{aligned}\right\} \quad \text{——(17)}$$

$$\left.\begin{aligned} a^\dagger\, \psi_n &= c_n\, \psi_{n+1} \\ \hat{a}\, \psi_n &= d_n\, \psi_{n-1} \end{aligned}\right\} \quad \text{——(18)}$$

(11) كيف نجد الثوابت c_n ، d_n ؟

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a^\dagger \psi_n)^* (a^\dagger \psi_n)\, dx = |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx$$

$$= (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx$$

$$\therefore |c_n|^2 = n+1$$

$$|d_n|^2 = n$$

وبالمثل

$$\therefore \quad \left.\begin{aligned} a^\dagger \psi_n &= \sqrt{n+1}\ \psi_{n+1} \\ \hat{a}\, \psi_n &= \sqrt{n}\ \psi_{n-1} \end{aligned}\right\} \quad \text{---- (19)}$$

$$\psi_1 = a^\dagger \psi_0$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 \psi_0$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger \psi_1\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger (a^\dagger \psi_0)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3 \times \sqrt{2}}} (a^\dagger)^3 \psi_0$$

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}} a^\dagger \psi_3$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\times3\times2}} (a^\dagger)^4 \psi_0$$

وهكذا لبقية الدوال الأعلى

$$\therefore \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0 \qquad \text{——————(20)}$$

أي أن ثابت الطاقة $A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$ اثبت ذلك

مثال : جد القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة في الحالة ψ_n (أو نقول في الحالة n) للمتذبذب التوافقي ؟

$$\langle U \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n \, dx$$

من المعادلة (5) نجد ان

$$\left.\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a^\dagger + \hat{a}\right) \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \left(a^\dagger - \hat{a}\right) \end{aligned}\right\} \qquad \text{——(21)}$$

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(a^\dagger)^2 + a^\dagger \hat{a} + \hat{a} a^\dagger + (\hat{a})^2 \right]$$

$$\therefore \langle U \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* \left[(a^\dagger)^2 + a^\dagger \hat{a} + \hat{a} a^\dagger + (\hat{a})^2 \right] \psi_n \, dx$$

(13)

$$\langle U \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \langle n | (a^\dagger)^2 + a^\dagger a + a a^\dagger + (a)^2 | n \rangle$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} \left[\langle n | (a^\dagger)^2 | n \rangle + \langle n | a^\dagger a | n \rangle + \right.$$

$$\left. \langle n | a a^\dagger | n \rangle + \langle n | (a)^2 | n \rangle \right]$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} \left[\langle n | \sqrt{n+1}\sqrt{n+2} | n+2 \rangle + \langle n | n | n \rangle + \right.$$

$$\left. \langle n | \sqrt{n+1}\sqrt{n+1} | n \rangle + \langle n | \sqrt{n}\sqrt{n-1} | n-2 \rangle \right]$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} (n + n + 1)$$

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

لدينا $E = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ تمثل الطاقة الكلية

$$\therefore \langle U \rangle = \frac{1}{2} E$$

الطريقة الثانية في حل معادلة شرودنجر للمتذبذب التوافقي البسيط
(الطريقة التحليلية) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}mw^2x^2\psi = E\psi \quad \text{——} (1)$$

نفرض $\xi = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, x$ (ξ متغير خالي من الوحدات)

وعليه تكون المعادلة (١) بالشكل التالي

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \quad \text{——} (2)$$

وهنا K تمثل الطاقة بوحدات $\frac{1}{2}\hbar w$

$$K = \frac{2E}{\hbar w} \quad \text{——} (3)$$

الهدف هو حل المعادلة (2) وإيجاد قيمة K التي تمثل الطاقات المسموح بها

عندما تكون ξ كبيرة جداً ($\times$ كبيرة جدا) قياساً الى K

تكون المعادلة (2) $\quad \text{——} (4)$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$$

وهذه لها حل تقريبي

$$\psi(\xi) \cong A e^{-\xi^2/2} + B e^{\xi^2/2} \quad \text{——} (5)$$

الحد الثاني $Be^{\xi^2/2}$ يتجه للامتناهية عندما ξ كبيرة لذلك

نجعل $B=0$ فتكون المعادلة (5) كالتالي

$$\psi(\xi) = A\, e^{-\xi^2/2} \qquad \text{——— (6)}$$

هنا الثابت A يسمى دالة تصحيح الى $\psi(\xi)$ وتسمى $h(\xi)$ وعليه (6) تؤول الى

$$\psi(\xi) = h(\xi)\, e^{-\xi^2/2} \qquad \text{——— (7)}$$

$h(\xi)$ تمثل متعدد حدود في ξ وله الشكل

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \qquad -(8)$$

نشتق المعادلة (7) مرتين لايجاد المشتقة الاولى والثانية وتعوضها في المعادلة (2) نحصل على

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (K-1)h = 0 \qquad \text{——— (9)}$$

من المعادلة (8)

$$\left.\begin{aligned} \frac{dh}{d\xi} &= \sum_{j=0}^{\infty} j\, a_j\, \xi^{j-1} \\ \frac{d^2h}{d\xi^2} &= \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)\, a_{j+2}\, \xi^j \end{aligned}\right\} \qquad \text{——— (10)}$$

نعوض العلاقة (10) في العلاقة (9) نحصل على

(3)

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[(j+1)(j+2)\, a_{j+2} - 2j a_j + (k-1) a_j \right] \xi^j = 0$$

لكي تكون هذه المعادلة صحيحة يجب ان تكون الاقيمة داخل القوس مساوية للصفر

$$(j+1)(j+2)\, a_{j+2} - 2j a_j + (k-1) a_j = 0$$

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-k)}{(j+1)(j+2)} a_j \qquad \text{---------- (11)}$$

علاقة التكرار هذه مكافئة الى معادلة شرودنجر فعند معرفة a_0 يمكننا توليد كل الحدود الزوجية

$$a_2 = \frac{1-k}{2} a_0$$

$$a_4 = \frac{5-k}{12} a_2 = \frac{(5-k)(1-k)}{24} a_0$$

وعند البدأ بـ a_1 يمكننا توليد كل الحدود الفردية

$$a_3 = \frac{3-k}{6} a_1$$

$$a_5 = \frac{7-k}{20} a_3 = \frac{(7-k)(3-k)}{120} a_1$$

ويكون الحل الكامل هو

$$h(\xi) = h_{even}(\xi) + h_{odd}(\xi)$$

(4)

$$h_{even}(\xi) = a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \cdots$$

$$h_{odd}(\xi) = a_1 \xi + a_3 \xi^3 + a_5 \xi^5 + \cdots$$

لا يمكننا الاستمرار في علاقة التكرار الى حدود غير متناهية وبعضها لا يمكن مصادرتها لذلك يجب ان تكون هنالك قيمة عليا الى ان هي n وليكن $a_{n+2} = 0$ اي نقطع السلسلة لتعقد اكدود عند $j = n$ والحل المقبول فيزيائياً هو ان تكون العلاقة (11) ذات بسط ساوي للصفر أي أن

$$2n+1 - k = 0$$

أي أن

$$k = 2n+1$$

ولكن k في العلاقة (3) هي

$$k = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

عليه $\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n+1$ وبالتالي

$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad \text{——(12)}$$

أذا وضعنا قيمة $k = 2n+1$ في علاقة التكرار (11) نحصل على

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \qquad \text{——(13)}$$

اذا وضعنا $n=0$ واهملنا a_1 لكي نترك الحدود الفردية
فعند قيمة $j=0$ تكون $a_2=0$ وبذلك يكون

$$h_0(\xi) = a_0$$

وعند

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$$

ولقيمة $n=1$ وناخذ $a_0=0$ ومع قيمة $j=1$ نحصل على
$a_3=0$ وبالتالي

$$h_1(\xi) = a_1 \xi$$

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}$$

وبصورة عامة فانه $h_n(\xi)$ متعدد حدود من الرتبة
n في ξ ويسمى متعدد حدود هرمت $H_n(\xi)$
(Hermite polynomials)

وبذلك متعدد حدود هرمت تكون دالة المتذبذب التوافقي

$$\psi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

ولكن $\xi = \sqrt{\alpha} x$

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\sqrt{\alpha} x) e^{-\alpha x^2/2}$$

(6)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\, H_m(\xi)\, d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}\, \delta_{nm}$$

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi)\, e^{-\xi^2/2}$$

$$H_0 = 1$$

$$H_1 = 2\xi$$

$$H_3 = 4\xi^2 - 2$$

$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$\vdots$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}$$

$$2\xi H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi)$$

$$\frac{d H_n(\xi)}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = 1$$ کدام یک عکس کتابه

(7)

$$\int_{-\infty}^{\infty} A_n^2 H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} dx = 1$$

$$\frac{A_n^2}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

$$\frac{A_n}{\sqrt{\alpha}} \left[2^n n! \sqrt{\pi} \right] = 1$$

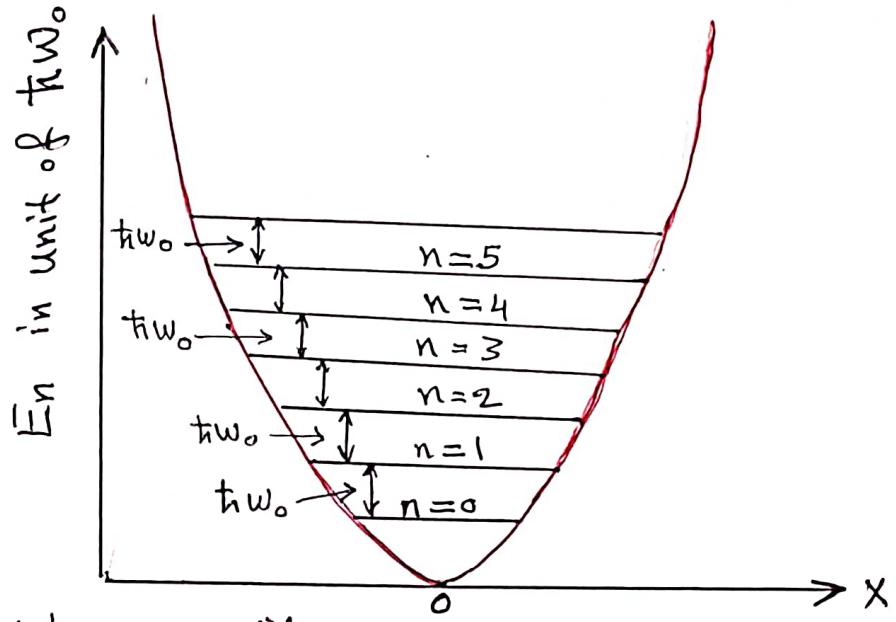
$$A_n = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \right]^{1/2}$$

للمتذبذب التوافقي الكلاسيكي نقاط رجوع عند الإزاحة التي فيها تكون طاقة الجسيم الكامنة تساوي الطاقة الكلية [الحركية تساوي صفر] وتعطى نقاط الرجوع عند

$$X_{max} = \sqrt{\frac{2E}{K}}$$

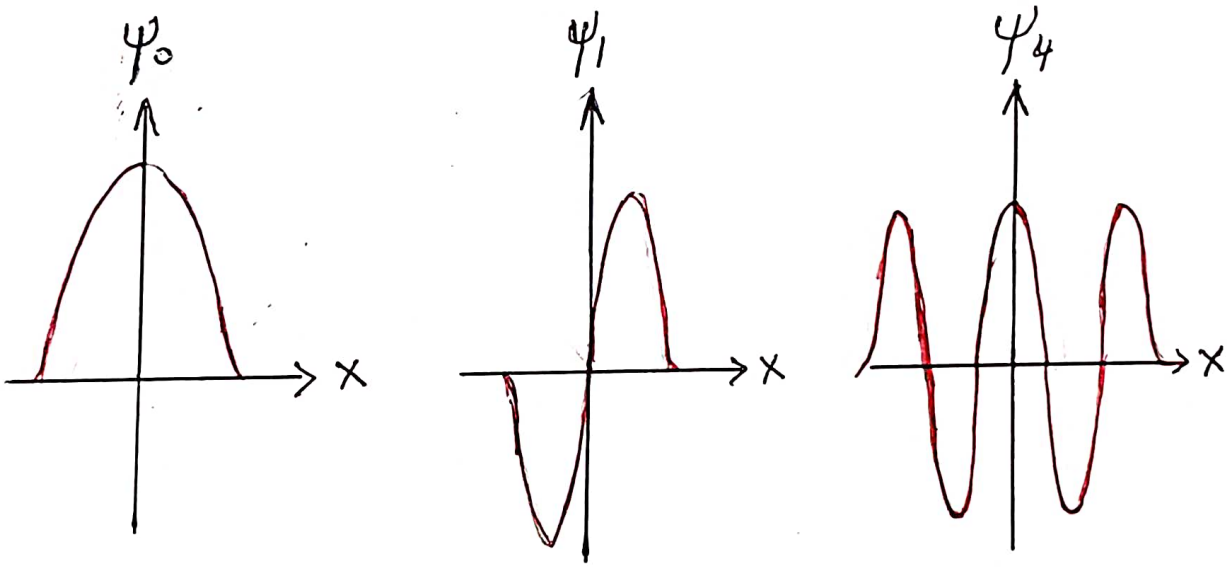
وفي الميكانيك الكمي نلاحظ ان توزيع الاحتمالية عند نقاط انقلاب تشبه نظيرتها نقاط الرجوع الكلاسيكي ونقطة الانقلاب تظهر عندما

$$\frac{\partial^2}{\partial X^2} \psi_n(x) = 0$$



مستويات الطاقة للمتذبذب التوافقي حسب المعادلة

$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})\,\hbar\omega$$



$\psi_n(x)$ مقابل x لبعض الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي

س١: ارسم ψ_2 ، ψ_3 ، ψ_5

س٢: أرسم $|\psi_0(x)|^2$

(1) (K)

Expectation value calculation حسابات القيم المتوقعة

:←

1- القيمة المتوقعة للموقع x في الحالة $\psi_n(x,t)$

:←

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x,t)\,[x]\,\psi_n(x,t)\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, e^{\frac{i}{\hbar}Ent}\,[x]\,\psi_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ent}\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,[x]\,\psi_n(x)\,dx$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left[A_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}\right]^*[x]\left[A_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}\right] d\xi$$

with $x = \frac{\xi}{\sqrt{\alpha}} = \frac{\xi}{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}$

$$\langle x \rangle = \frac{A_n^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\,[\xi]\,H_n(\xi)\,d\xi$$

بالاستفادة من علاقة التكرار $2\xi H_n = H_{n+1} + 2nH_{n-1}$ نحصل على

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2}\frac{A_n^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\,H_{n+1}(\xi)\,d\xi + n\,\frac{A_n^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\,H_{n-1}(\xi)\,d\xi$$

$$= \frac{1}{2}\frac{A_n^2}{\alpha}\,\delta_{n,n+1} + n\,\frac{A_n^2}{\alpha}\,\delta_{n,n-1}$$

$$\langle x \rangle = 0$$

النتيجة $\langle x \rangle = 0$ جاءت بسبب تعامد متعدد حدود هرميت.

ولها معنى فيزيائي هو (1) انه الاحتمالية في ايجاد الجسيم على الجهة الموجبة لمحور x تساوي الاحتمالية على الجهة السالبة منه (2) النتيجة تمثل تماثل الاحتمالية حول نقطة الأصل.

2 - القيمة المتوقعة لـ x^2 في $\psi_n(x)$.

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \, [x^2] \, \psi_n(x) \, dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{A_n^2}{\alpha \sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) \, \xi^2 H_n(\xi) \, d\xi$$

$$\xi^2 H_n = \frac{1}{4} H_{n+2} + (n+\tfrac{1}{2}) H_n + n(n-1) H_{n-2}$$

بملاحظة حالات التعامد لمتعدد حدود هرميت نلاحظ أن الحد الذي يحتوي على $\frac{1}{4}H_{n+2}$ والحد الذي يحتوي H_{n-2} كلاهما يؤول للصفر فتكون المعادلة:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{(n+\frac{1}{2})}{\alpha} \frac{A_n^2}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) \, d\xi$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{n+\frac{1}{2}}{\alpha} \quad \Rightarrow \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

$$\langle x^2 \rangle = (n+\tfrac{1}{2}) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}$$

3 - ايجاد القيمة المتوقعة للزخم ($\hat{P}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$) إذا كانت $\psi_n(x)$:

$$\langle \hat{P}_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \left[-i\hbar \frac{d}{dx}\right] \psi_n(x)\, dx$$

لدينا $\xi = \sqrt{\alpha}\, x$: $dx = \frac{d\xi}{\sqrt{\alpha}}$ ، $\psi_n(\xi) = A_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$

$$\langle \hat{P}_x \rangle = \frac{\hbar}{i} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \frac{d}{\frac{d\xi}{\sqrt{\alpha}}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \frac{d\xi}{\sqrt{\alpha}}$$

$$\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)\right) = -\xi e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) + e^{-\xi^2/2} \frac{dH_n(\xi)}{d\xi}$$

ولدينا علاقة التكرار

$$\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)\right) = e^{-\xi^2/2}\left[n H_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi)\right]$$

وبالتالي نحصل على

$$\langle \hat{P}_x \rangle = \frac{\hbar}{2i} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)\left[n H_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi)\right] d\xi$$

$$\langle \hat{P}_x \rangle = 0$$

بسبب تقاطع متعدد حدود هرميت .

(4)

4- القيمة المتوقعة لـ $\hat{p}_x^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2$ في حالة $\psi_n(x)$:

$$\langle \hat{p}_x^2 \rangle = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \right)^2 \right] \psi_n(x)\, dx$$

$$= -\sqrt{\alpha}\,\hbar^2 A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \frac{d^2}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)\, d\xi$$

نستخدم العلاقة التالية

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\left[e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \right] = e^{-\xi^2/2}\left[n(n-1) H_{n-2} - (n+\tfrac{1}{2}) H_n + \tfrac{1}{4} H_{n+2} \right]$$

$$\langle \hat{p}_x^2 \rangle = \sqrt{\alpha}\,\hbar^2 A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) (n+\tfrac{1}{2}) H_n(\xi)\, d\xi$$

$$= \sqrt{\alpha}\,\hbar^2 (n+\tfrac{1}{2}) \left[A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) H_n(\xi)\, d\xi \right]$$

$$\langle p_x^2 \rangle = \sqrt{\alpha}\,\hbar^2 (n+\tfrac{1}{2}) \left[\sqrt{\alpha} \right]$$

$$= \alpha \hbar^2 (n+\tfrac{1}{2})$$

$$\langle p_x^2 \rangle = \hbar \omega (n+\tfrac{1}{2}) m$$

$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

5 – حساب القيم المتوقعة في الحالات المختلطة

المقصود بالحالات المختلطة ان النظام الكمي ليس مستقراً في حالة مركبة و الحالات المختلطة تعني حالات غير نقية مثلاً

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_0(x,t) + \psi_1(x,t)\right]$$

هنا $\psi(x,t)$ تعتبر حالة غير نقية لوجود ψ_0 مع ψ_1 معاً اي أنها حالة مختلطة.

كثافة الاحتمال للحالة المختلطة $\psi(x,t)$:

$$\psi^*(x,t)\,\psi(x,t) = \frac{1}{2}\left[(\psi_0+\psi_1)^*(\psi_0+\psi_1)\right]$$

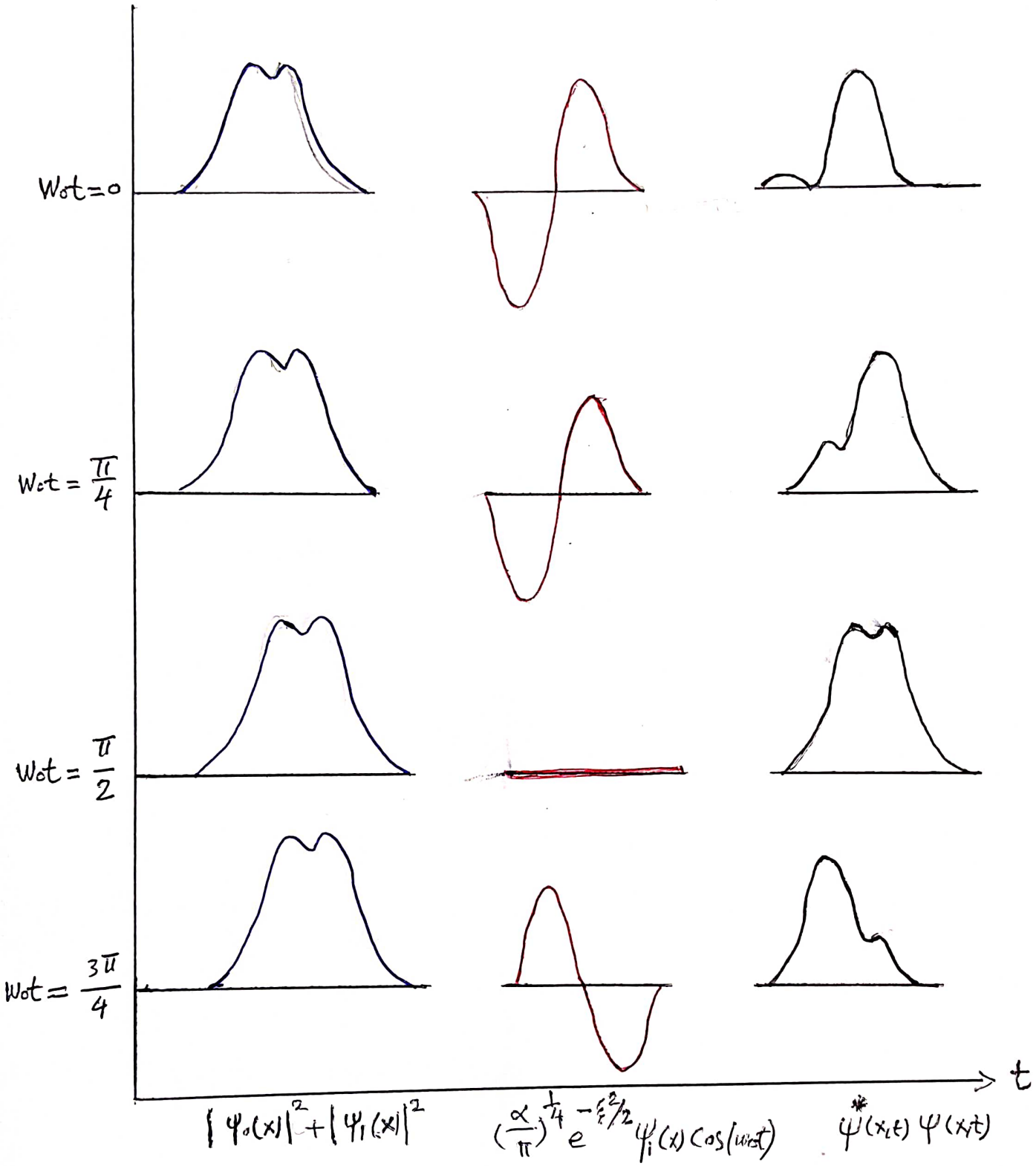
$$= \frac{1}{2}\left[A_0 e^{-\xi^2/2} H_0(\xi) e^{i\omega_0 t/2} + A_1 e^{-\xi^2/2} H_1(\xi) e^{3i\omega_0 t/2}\right]$$
$$\left[A_0 e^{-\xi^2/2} H_0(\xi) e^{-i\omega_0 t/2} + A_1 e^{-\xi^2/2} H_1(\xi) e^{-3i\omega_0 t/2}\right]$$

$$= \frac{1}{2}|\psi_0|^2 + \frac{1}{2}|\psi_1|^2 + \frac{1}{2}A_0A_1 e^{-\xi^2} H_0 H_1 \left(e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}\right)$$

$$= \frac{1}{2}|\psi_0|^2 + \frac{1}{2}|\psi_1|^2 + A_0A_1 e^{-\xi^2} H_0 H_1 \cos(\omega_0 t)$$

$$\psi^*(x,t)\,\psi(x,t) = \frac{1}{2}|\psi_0|^2 + \frac{1}{2}|\psi_1|^2 + \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\xi^2/2} \psi_1(x)\cos(\omega_0 t)$$

الصيغة الاخيرة لكثافة الاحتمال للحالة المختلطة.



كثافة الاحتمال كدالة الى الزمن للحالة المختلطة $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1)$ للمتذبذب التوافقي

6 – حساب القيمة المتوقعة للطاقة الكلية :

$$\langle E \rangle = \langle \psi(x,t), \hat{H}\, \psi(x,t) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*}(x,t)\, \hat{H}\, \psi(x,t)\, dx$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0^{*}(x)\, e^{i\omega_0 t/2} + \psi_1^{*}(x)\, e^{3i\omega_0 t/2} \right] \left[\hat{H} \right] \left[\psi_0(x) \right.$$

$$\left. e^{-i\omega_0 t/2} + \psi_1(x)\, e^{-3i\omega_0 t/2} \right] dx$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0^{*}(x)\, e^{i\omega_0 t/2} + \psi_1^{*}(x)\, e^{3i\omega_0 t/2} \right] \left[\frac{\hbar\omega_0}{2} \psi_0(x) \right.$$

$$\left. e^{-i\omega_0 t/2} + \frac{3\hbar\omega_0}{2} \psi_1(x)\, e^{-3i\omega_0 t/2} \right] dx$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{3\hbar\omega_0}{2} \right]$$

$$\langle E \rangle = \hbar\omega_0$$

7 - إيجاد القيمة المتوقعة للمتغير x في الحالة المختلطة

:

$$\langle x \rangle = \langle \psi(x,t), x\,\psi(x,t) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\, x\, \psi(x,t)\, dx$$

$$= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0(x) e^{i\omega_0 t/2} + \psi_1(x) e^{3i\omega_0 t/2} \right][x]\left[\psi_0(x) e^{-i\omega_0 t/2} + \psi_1(x) e^{-3i\omega_0 t/2}\right] dx$$

$$= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0^*(x)\, x\, \psi_0(x) + \psi_1^*(x)\, x\, \psi_1(x) + \psi_0^*(x)\, x\, \psi_1(x) e^{-i\omega_0 t} + \psi_1^*(x)\, x\, \psi_0(x) e^{i\omega_0 t} \right] dx$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \cos(\omega_0 t)$$

واجب : اثبت ان القيمة المتوقعة للزخم $\hat{p}_x$ في الحالة المختلطة

$$\langle \hat{p}_x \rangle = -\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\, \hbar \sin(\omega_0 t)$$

يساوي