محاضرة رقم (1)

((الفـــصل الأول))

الميكانيك الكمي بثلاثة أبعاد

Quantum Mechanics in the Three Dimensions

في الميكانيك الكمي معادلة شرودنكر في بعد واحد عبارة عن معادلة تفاضلية تصف كيفية تغير الحالة الكمية لنظام فيزياوي... ووضعت عام (1925) وهي بمثابة قانون نيوتن الثاني للحركة والذي يعتبر الأساس في الفيزياء الكلاسيكية.......

سنحاول في هذا الفصل تعميم معادلة شرودنجر من البعد الواحد الى الابعاد الثلاثه (x, y, z) والتي سنقوم بتحويلها الى الابعاد الكرويه (r, ϑ, φ)

من معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن

$$H\psi = E\psi \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1)$$

حيث H يمثل الهاملتونين (وهو مجموع الطاقة الحركية + الطاقة الكامنة) و ψ هي الدالة الموجيه التي تصف الجسيم المتحرك.

$$H = \frac{1}{2}m\,v^2 + U = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + U \qquad \ldots\ldots\ldots(2)$$

ويمكن التعبير عن مؤثر الزخم الكلي لجسيم بصيغة المؤثرات بالعلاقة

$$\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

وبما ان مركبات الزخم بصيغة المؤثرات تكتب كالتالي

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad , p_y = -\, i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad , p_z = -\, i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad \text{.........}(4)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \qquad \text{..........}(5)$$

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2}{\partial^2 z}$ يمثل مؤثر لابلاس في المحاور الديكارتية

$\therefore$ معادلة شرودنجر بالابعاد الثلاثة تأخذ الصيغة الاتية:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U]\psi = E\psi \qquad \text{..........}(6)$$

حيث ان ψ و U هي دوال للموقع. ويمكن كتابة الاحداثي الكروي r كمتجه بدلالة الاحداثيات الديكارتية $\vec{r} = (x, y, z)$.

أحتمالية ايجاد الجسيم في وحدة حجم $d^3r = dxdydz$ هي $\int |\psi(r,t)|^2 d^3r = 1$

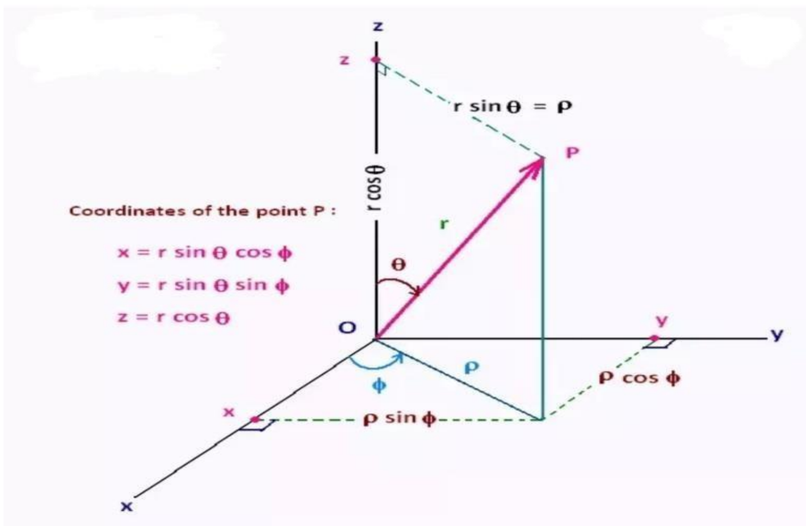
(في حالة المعايرة) . وهذا يعني ان الجسيم موجود ضمن المدى المحدد مئة بالمئة.

حل معادلة شرودنكر بالابعاد الثلاث

Solution of S. E in three dimension

في كثير من المسائل المهمة يكون الجهد (U) متماثل كرويا اي انه يعتمد فقط على المسافة r من نقطة الاصل , وكذلك فأن معادلة شرودنكر يسهل فصلها بأستخدام المحاور الكروية. وعليه يكون من المناسب استخدام المحاور الكروية (r,ϑ,ϕ) .

الشكل أدناه يعطي المحاور المتعامدة والمحاور الكروية والعلاقة بينهما



$$x = r sin(\vartheta)\cos(\varphi)$$

$$y = r\sin\vartheta\sin\phi$$

$$z = r\cos\vartheta$$

$$r^2 = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \quad \text{...........} \quad (7 \quad \text{العلاقات})$$

$$\cos\vartheta = \frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}$$

$$\tan\phi = \frac{y}{x}$$

من العلاقات (7) نستطيع حساب ∇^2 بدلالة المحاور الكروية

وللحصول على العلاقة ∇^2 بدلالة (r,ϑ,ϕ) نحتاج المشتقات ل x,y,z بدلالة (r,ϑ,ϕ) وذلك

باستخدام قاعدة التفاضل المتسلسل (chain rule)

$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta}+\frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

أذن ∇^2 في المحاور الكروية تأخذ الصيغة التالية:

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial \vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial}{\partial \vartheta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2(\vartheta)}\left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) \quad \ldots.(9)$$

أذن معادلة شرودنكر الغير معتمدة على الزمن بالمحاور الكروية ستكون :-

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial \psi}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial \psi}{\partial \theta})+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}(\frac{\partial^2\psi}{\partial \phi^2})\right\}+U\psi=E\psi \ldots\ldots\ldots..(10)$$

الدالة ψ هي دالة ل (r,ϑ,ϕ) أذن بالإمكان كتابة الدالة بصيغة فصل المتغيرات وكالتالي

$$\psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)Y(\vartheta,\varphi) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..(11)$$

محاضرة رقم (2)
((الفـــصل الأول))

الميكانيك الكمي بثلاثة أبعاد
Quantum Mechanics in the Three Dimensions

عوض 11 بالعلاقة 10 ثم نضرب طرفي المعادلة في $(-\frac{2mr^2}{\hbar^2 RY})$ نحصل على:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(U-E)+\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{sin^2(\vartheta)}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right\}=0$$

...............(12)

هذه المعادلة تحتوي على جزئين الاول يتغير مع المسافة r والثاني مع الزوايا φ, ϑ لذلك نستطيع فصل هذه المعادلة الى معادلتين كل منها يساوي كمية ثابته مثل C الذي سنسميه ثابت التفريق وايضا لانه مقدار ثابت يمكن وضع اي صيغه له حسب رغبتنا .

لذلك يصبح لدينا.....

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}(\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2})-CY\right\}=0 \quad ....(14)$$

$$\frac{1}{r^2}\{\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})\}-\{\frac{2m}{\hbar^2}[U-E]-\frac{C}{r^2}\}R=0 \quad ....(15)$$

العلاقة 15 تسمى المعادلة القطرية و العلاقة 14 هي العلاقة الزاوية

والملاحظ ان 14 لا تحوي على الجهد U مما يعني انها نفسها لاي جهد مركزي وبذلك فأنها تحل مرة واحدة تصح لجميع أشكال الجهد المركزي (لذلك سنبدأ بها اولا اما المعادله).

أما المعادلة 15 فلا نستطيع حلها الا أذا عرفنا صيغة الجهد المركزي U ومن خلال حلها نحصل على قيم الطاقة E.

حل المعادلة الزاوية (14) The Angular equation

نأخذ الثابت $C = l(l+1)$

أذن المعادلة 15 ستاخذ الصيغة التالية

$$\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin(\vartheta)^2}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right\}=-l(l+1)$$

وبأعادة صياغتها نحصل

$$\sin(\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}=-l(l+1)\ \sin(\vartheta)^2\,Y \quad \text{……………(16)}$$

***بأستخدام فصل المتغيرات للدالة $Y(\vartheta,\varphi)$ وكالتالي

نفرض أن $Y(\vartheta,\varphi)=\theta(\vartheta)\emptyset(\varphi)$

نعوض $Y(\vartheta,\varphi)$في المعادلة(16) ونقسم على $\theta(\vartheta)\emptyset(\varphi)$ نحصل على العلاقة

$$\frac{1}{\theta(\vartheta)}\left\{\sin(\vartheta)\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)\right\}+l(l+1)sin^2(\vartheta)+\frac{1}{\emptyset(\varphi)}\frac{d^2\emptyset(\varphi)}{d\varphi^2}=0$$

هذه المعادلة تحتوي على جزئين منفصلين يعتمد كل منهما على متغير لوحده ومجموع الجزئين يساوي صفر. ونستطيع ان نفصل الجزئين بحيث كل منهما يساوي كمية ثابتة وفرضا تساوي m^2 (ويسمى هذا الثابت بثابت التفريق أيضا)

$$\frac{1}{\theta(\vartheta)}\left\{\sin(\vartheta)\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)\right\}+l(l+1)sin^2(\vartheta)=m^2 \quad \text{……..…… (17)}$$

$$\frac{1}{\emptyset(\varphi)}\frac{d^2\emptyset(\varphi)}{d\varphi^2}=-m^2 \quad \text{……………(18)}$$

حل المعادلة(18) سهل جدا حيث

$$\frac{d^2\emptyset(\varphi)}{d\varphi^2}=-m^2\emptyset(\varphi)$$

أذن

$$\emptyset(\varphi)=e^{im\varphi}$$

أو

$$\emptyset(\varphi)=e^{-im\varphi}$$

سنجعل m اما موجبه او سالبه لذلك سنختار الحل الموجب وكالتالي

$$\emptyset(\varphi) = e^{im\varphi}$$

عند تقدم φ بمقدار 2π نرجع لنفس النقطة في الفضاء

$$\emptyset(\varphi + 2\pi) = \emptyset(\varphi)$$

حيث يكون

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi}$$

$$e^{im\varphi}e^{2im\pi} = e^{im\varphi}$$

وهنا يتوجب القول ان $e^{2im\pi} = 1$ او $\cos(2m\pi) + isin(2m\pi) = 1$ وهذا يتحقق عندما تكون m عدد صحيح لذلك نحصل

$$\phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, m = 0,\pm1,\pm2,........... \qquad ....(19)$$

حيث أن المقدار $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ هو ثابت المعايرة للدالة $\phi(\phi)$

****

محاضرة رقم (3)
((الفـــــصل الأول))

يرجى متابعة المحاضرة السابقة بالتفصيل:-

نرجع الان الى العلاقة رقم (17) والخاصة ب θ فقط

1- نعوض عن $C = l(l+1)$
2- نضرب المعادلة ب $\sin^2\theta$ للتخلص من المقام لنحصل على

$$\sin(\vartheta)\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin(\vartheta)\frac{d\theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right) + [l(l+1)sin^2(\vartheta) - m^2]\theta(\vartheta) = 0 \qquad \ldots\ldots\ldots(21)$$

العلاقة 21 ليست سهلة الحل......والحل لهذه المعادلة هو أيجاد قيمة $\theta(\vartheta)$,

والحل لها عبارة عن متعدد حدود يسمى متعدد حدود ليجندر لذلك سنكتب حلها مباشرة دون الخوض في التفاصيل والحل المناسب هو

$$\theta(\vartheta) = Ap_l^m(\cos(\vartheta)) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(22)$$

$P_l^m(\cos(\vartheta))$ متعدد مرتبط بدالة ليجندرالمرافقة (associated Legender function)

وان l عدد صحيح موجب ....وA هو ثابت المعايرة للدالة

لنفرض ان $-1 \le x \le 1$ $\quad \cos(\vartheta) = x$

عليه يكون متعدد الحدود هو

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{|m|}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|}P_l(x) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(23)$$

و

$P_l(x)$ هو متعدد حدود ليجندر من الرتبة l وان $P_l(x)$ هي دالة ل x يعرف بصيغة (رودريكس) كالتالي

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l \quad \text{………………….(24)}$$

لنأخذ بعض الدوال الأولى $p_l(x)$ لنرى كيف تطبق العلاقة 24

$l=0$	$p_l(x)=\frac{1}{2^0 0!}(\frac{d}{dx})^0(x^2-1)^0$		1
$l=1$	$p_l(x)=\frac{1}{2^1 1!}(\frac{d}{dx})^1(x^2-1)^1$		x
$l=2$	$p_2(x)=\frac{1}{2^2 2!}(\frac{d}{dx})^2(x^2-1)^2$	$=\frac{1}{2}\frac{d}{dx}(x^3-x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$	$\frac{1}{2}(3x^2-1)$
$l=3$	H.W1		
$l=4$	H.W2		

أذن متعددة حدود ليجندر من العلاقة 23 والتي تعتمد على قيمة m يمكن حسابها كالاتي

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}(\frac{d}{dx})^{|m|}P_l(x) \quad , x=\cos(\vartheta)$$

$l=0$	$m=0$	$P_0^0(x)=1$	
$l=0$	$m=\pm1$	$p_0^{\pm1}(x)$	$p_0^{\pm1}=(1-x^2)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dx}p_0(x)=0$
$l=2$	$m=0$	$p_2^0(x)$	$p_2^0(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$
$l=2$	$m=1$	H.W3	
$l=2$	$m=2$	H.W4	
$l=2$	$m=-2$	H.W5	

ملاحظة: اذا كانت $|m| > l$ فان كل قيم $P_l^m(x)$ مساوية للصفر

....

وأذا رجعنا للعلاقة(23) نرى أننا في الحقيقة نحتاج $P_l^m(\cos\vartheta)$ والتي هي متسلسلة بدلالة $\cos\vartheta$ وأدناه بعض دوال ليجندر بدلالة $\cos\vartheta$

p_0^0	1
p_0^0	$\sin\vartheta$
p_1^0	$\cos\vartheta$
p_2^0	$\frac{1}{2}(3\cos^2\vartheta-1)$
p_2^1	$3\sin\vartheta\cos\vartheta$

****

((ملاحظة مهمة جدا))

في نظام المحاور الكرويه فان وحدة الحجم هي

$$d^3r = r^2\sin(\vartheta)\,d\vartheta d\varphi dr \qquad \text{...........(25)}$$

والمعايرة للدالة تأخذ الشكل التالي :--

$$\int |\psi(r,t)|^2 d^3r = \int |\psi(r,t)|^2\, r^2 \sin(\vartheta)\, d\vartheta d\varphi dr$$

$$= \int |R(r)|^2 r^2 dr \int |Y(\vartheta,\varphi)|^2 \sin(\vartheta)\, d\vartheta d\varphi \qquad \text{.............(26)}$$

والعلاقة الاخيرة مناسبة لاجراء التكامل على المتغيرات بصورة منفصله كالتالي

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \qquad (27)$$

وهي حالة المعايرة للجزء القطري من حل معادلة شرودنجر

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|Y(\vartheta,\varphi)|^2\sin(\vartheta)\,d\vartheta d\varphi = 1 \qquad (28)$$

بالعلاقة (22) هي دالة معايرة وثابت المعايرة لها يساوي $Y_l^m(\vartheta,\phi)$ الدالة

$$A=\left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(29)$$

وبذلك فأن الدالة الزاوية تأخذ الصيغة النهائية التالية:

$$.\,Y_l^m(\vartheta,\phi)=\left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}} e^{im\phi}\,p_l^m(\cos\vartheta) \qquad \ldots\ldots\ldots(30)$$

****

Q1

أثبت أن الدالة بالعلاقة 19 هي دالة معايرة

Q2

اشتق بالتفصيل المعادلة 9 بأستخدام العلاقات 8

Q3

أذا أعطيت معادلة شرودنكر الغير معتمدة على الزمن لجسيم تحت تأثير قوة مركزية هي

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta})+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}(\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2})\right\}+U\psi=E\psi$$

وكانت الدالة الموجية التي تصف الجسيم $\psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)Y(\vartheta,\varphi)$

أستخدم صيغة فصل المتغيرات للحصول على الجزء القطري والجزء الزاوي من معادلة شرودنكر.

Q4 **أحسب:** p_3^3 , p_3^0 , p_3^1 , p_2^2 , p_2^3 ,

Q5 : أستخدم العلاقتين 10 و11 لأثبات العلاقة 12 بالتفصيل

Q6: أستخدم العلاقة 30 و $Y_1^1(\vartheta,\phi)$ و $Y_1^0(\vartheta,\phi)$ لحساب $Y_1^{-1}(\vartheta,\phi)$

Q8 -: هل الدالة Y_3^0 والدالة Y_2^1 معايرة

Q7:-أثبت أن الدالتين Y_0^0 و Y_2^1 هي دوال متعامدة.

محاضرة رقم (3)
((الفـــصل الأول))

The Radial Equation المعـــــادلة القطريه

ذكرنا سابقا أن الجزء الزاوي للدالة الموجية الزاوية $Y(\vartheta,\varphi)$ الناتج من حل معادلة شرودنجر يبقى نفسه لكل الجهود المتناظرة كرويا $U(r)$. وأن شكل الجهد $U(r)$ يؤثر فقط في الجزء القطري من الدالة الموجية $R(r)$ والمعطى بالمعادلة (15) :

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(U(r)-E)R(r)=l(l+1)R(r) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots(25)$$

ويمكن ان نبسط هذه المعادلة وذلك بتبديل المتغيرات كالاتي:

بفرض أن

$$R(r)=\frac{S(r)}{r}$$

$$\frac{dR}{dr}=\frac{r\frac{dS}{dr}-S}{r^2}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=r\frac{d^2S}{dr^2}$$

أذن العلاقة (25) تصبح

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2S(r)}{dr^2}+\left[U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]S(r)=ES(r) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(26)$$

(26) عبارة عن معادلة شرودنكر لبعد واحد لجسيم كتلته m يتحرك في مجال جهد (يختلف عن الجهد الأصلي) ويسمى الجهد المؤثر U_{eff}

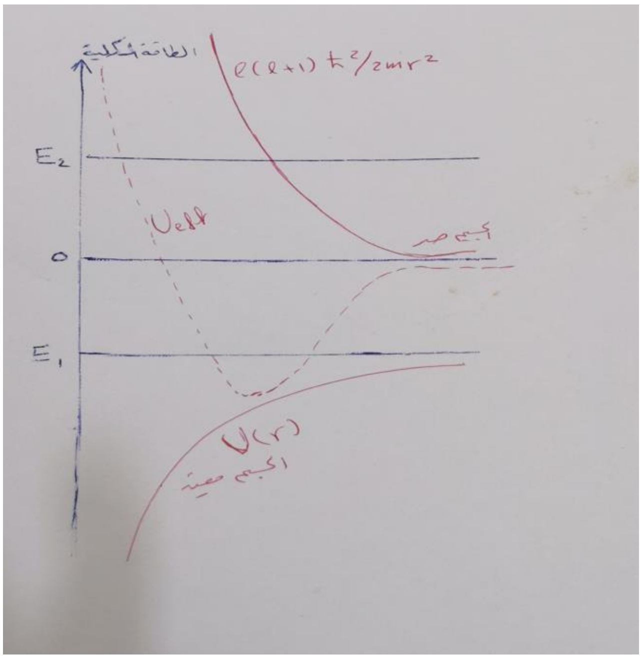
حيث

$$U_{eff}=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}+\frac{l(l+1)}{r^2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(27)$$

U_{eff}:- الجهدالذي يتحرك فيه الالكترون

$U(r)$:-جهد كولوم

$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$:-جهد القوة الطاردة



<u>***The Hydrogen atom***</u>   <u>***ذرة الهيدروجين***</u>

تعتبر ذرة الهيدروجين من أبسط الأنظمة التي يمكن دراستها حيث تحتوي على بروتون (ثقيل غير متحرك) ونفترض انه يقع في نقطة الاصل(وله شحنه مقدارها e) ويدور حوله الالكترون (جسيم خفيف جدا وشحنته e-) , والطاقة التي تربط الالكترون بالبروتون النواة او ما يسمى بالجهد الكروي هي:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi \in_0}\frac{1}{r} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(28)$$

عند $r = \infty$ $U(r) = 0$

معادلة شرودنكر لذرة الهيدروجين تأخذ الصيغة التالية:-

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2S(r)}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\in_0}\frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]S(r) = ES(r) \quad \ldots\ldots(29)$$

الهدف من العلاقة (29) هو حساب الدالة $S(r)$ وحساب الطاقات المسموحة E.

المعادلة القطرية لذرة الهيروجين

أفرض $k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, بالنسبة للطاقات المقيدة فأن E سالبة وبذلك فأن k يمتلك قيم موجبة

وبقسمة العلاقة (29) على E وأدخال تعريف k ينتج لدينا ,

$$\frac{1}{K^2}\frac{d^2S(r)}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi \in_0 \hbar^2 K}\,\frac{1}{Kr} + \frac{l(l+1)}{(Kr)^2}\right]S(r) \quad ......(30)$$

سنقترح القيم التالية

$$Kr = \rho \qquad\qquad \rho_o = \frac{me^2}{2\pi\varepsilon_o\hbar^2 k} = ثابت$$

عليه تصبح المعادلة كالتالي

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]S(\rho) \qquad (31)$$

نحاول أيجاد الحلول ضمن خطوط الاقتراب

لايمكن حل هذه المعادلة بسهولة وبصورة مباشرة ,لذلك سنلجأ الى حلها في ثلاث مناطق الاولى المنطقة البعيدة جدا. والثانية المنطقة القريبة من نقطة الأصل. ثم المنطقة الوسطى والتي سنأخذها على شكل متعدد حدود يربط بين الحلين الاول والثاني معا بشكل يعطي الدالة القطرية الصحيحه .

الحل1-- في المنطقة البعيدة جدا $\rho \to \infty$ $\qquad \frac{l(l+1)}{\rho^2} \approx \frac{\rho}{\rho_o} = 0$

وهنا تصبح المعادلة (31):

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} = S(\rho)$$

والحل لهذه المعادلة هو

$$S(\rho) \Rightarrow e^{-\rho}$$
$$\Rightarrow e^{+\rho}$$

الحل $e^{+\rho}$ غير مقبول فيزياويا

(*) .... حل مقبول لان يحقق الشروط الحدودية $\rightarrow e^{-\rho}$

الحل 2-- الحل في المنطقة القريبة من نقطة الاصل ,$\rho \rightarrow 0$ وهنا تؤول المعادلة 31 الى:

$$\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} S(\rho)$$

والحل لهذه المعادلة هو:

$$S(\rho) \Rightarrow e^{-l}$$
$$\Rightarrow e^{+l+1}$$

وهنا ρ^{-l} تذهب للمالانهاية عندما $\rho \rightarrow 0$ لذلك ,

$$S(\rho) \approx \rho^{l+1} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (**)$$

الحلين بالعلاقتين *و** هما المقبولين فيزياويا أذن نفرض دالة جديدة $\gamma(\rho)$ تربط الحلين المقبولين مع بعض وتمثل حل وسط. $\gamma(\rho)$ وبذلك يكون الحل الكلي

$$S(\rho) = \rho^{l+1}\, e^{-\rho}\gamma(\rho) \qquad \ldots\ldots\ldots \quad (32)$$

$\gamma(\rho)$ هو متعدد حدود يعرف بالصيغة التالية:

$$\gamma(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \ldots\ldots\ldots(33)$$

لنضع $n + l = q$ وكذلك $2l + 1 = p$ فيكون لدينا

$$L_{q-p}^{p}(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \qquad \ldots\ldots\ldots(34)$$

$L_{q-p}^{p}(x)$ هو متعدد حدود يسمى متعدد لاكوري المرافق ,, اما متعدد حدود لاكوري $L_q(x)$ من الرتبة q فيعطى بالعلاقة:

$$L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x}) x^q \qquad (35)$$

واخيرا فان الدالة الموجية القطرية المعايرة لذرة الهيدروجين تكون بالشكل التالي:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)\right] \ldots\ldots\ldots(36)$$

والدالة الموجية المعايرة الكلية لذرة الهيدروجين تكون بالشكل التالي:

$$\psi_{nlm(r,\vartheta,\varphi)} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)\right] Y_l^m(\vartheta,\varphi) \qquad (37)$$

مثال:

لنأخذ جسيما في صندوق جهد كروي لامتناهي

$$U(r) = \begin{cases} 0 & if\ r < a \\ \infty & if\ r > a \end{cases}$$

أحسب الدوال الموجية والطاقات المسموح بها لهذا الجسيم؟

الحل:

خارج الصندوق تكون الدالة الموجيه مساوية الى صفر

بينما داخل البئر فأن الدالة الموجيه تحسب من المعادلة القطرية كالتالي:

$$\frac{d^2S(r)}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - K^2\right] S(r) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(38)$$

أذ ان $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

سنأخذ شروط حدودية سهلة لحل المعادلة (38) حيث نأخذ $l = 0$ ومنها $S(a) = 0$ أذن:

$$\frac{d^2S(r)}{dr^2} = -K^2 S(r) \quad \rightarrow \quad \frac{d^2S(r)}{dr^2} + K^2 S(r) = 0$$

حل هذه المعادلة بسيط ومن النوع

$$S(r) = A\,sin(Kr) + B\,cos(Kr)$$

$$R(r) = \frac{S(r)}{r} = A\,\frac{sin(Kr)}{r} + B\,\frac{cos(Kr)}{r}$$

في هذه المعادلة فان الثابت B يجب ان يكون مساوي للصفر لان الدالة تكون غير معرفة عندما $r = 0$ اي انها تذهب للمالانهايه وكذلك فان $\sin(Ka)$ يتطلب ان يذهب للصفر لكي نحصل على دالة تساوي صفر عند الحدود

$$\sin(Ka) = 0$$

وهذا يتحقق عندما $Ka = n\pi$ حيث أن n عدد صحيح لذلك,

$$R(r) = A\frac{\sin(\frac{n\pi}{a}r)}{r} \quad ....(39)$$

وبعد اجراء المعايرة على هذه الدالة نحصل على قيمة الثابت A

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$$

واخير حصلنا على الحل النهائي للدالة القطريه للجهد اعلاه .أي بالصيغة

$$R_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a r^2}}\,\sin(\frac{n\pi r}{a})$$

اما الطاقات المسموح بها فيمكن الحصول عليها من $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ وكذلك $Ka = n\pi$

وبمساواة العلاقتين يمكن الحصول على الطاقة E_{nl}

$$E_{n0} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad , \qquad (n = 1,2,3, \ldots\ldots)$$

محاضرة رقم (5)
((الفـــــصل الأول))

Eigen functions of the angular momentum operator

الدوال الذاتية لمؤثر الزخم الزاوي $\vec{L}$

يعرف الزخم الزاوي لجسيم يتحرك بسرعة $\vec{v}$ من مركز قوة وبمسافة r حـول محـوريمر مـن مركز هذه القوة ب ......

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{P} \quad ....(38)$$

$\hat{p}$ هو الزخم الخطي وأتجاهه مماس للمسار المنحني للجسيم .فأذا كان الجسيم يتحرك في المستوي xy فأن الزخم يكون بأتجاه z , أذن $\vec{L}$ عمودي على المستوي وبأتجاه z

من تعريف مؤثر الزخم الخطي

أو أن الزخم الزاوي بدلالة المؤثرات يعطى بالعلاقة

$$\vec{L} = -i\hbar(\vec{r} x \vec{\nabla}) \;.............(39)$$

وكذلك

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad ....(40)$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{L} = i\hat{L}_x + j\hat{L}_y + k\hat{L}_z$$

من العلاقات (40)

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) = (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) \quad ....(41)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}) = (x\hat{p}_y - y\hat{p}_z)$$

المؤثرات $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ تكون غير متبادلة حيث أن

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=[y\hat{p}_z-z\hat{p}_y,z\hat{p}_x-x\hat{p}_z]$$

$$=[y\hat{p}_z-z\hat{p}_y,z\hat{p}_x-x\hat{p}_z]$$

$$=[y\hat{p}_z,z\hat{p}_x]-[y\hat{p}_z-x\hat{p}_z]-[z\hat{p}_y,z\hat{p}_x]+[z\hat{p}_y,x\hat{p}_z] \quad ....(42)$$

أستخدم المتباينة

$$A(B+C)=AB+AC$$
$$[A,B+C]=[A,B]+[A,C]$$

وبهذا فأن المعادلة (42) تأخذ الشكل الاتي

$$=y\hat{P}_x[\hat{P}_z,z]+x\hat{P}_y[z,\hat{P}_z]+0+0$$
$$=[y\hat{P}_x-x\hat{P}_y][\hat{P}_z,z] \quad .... \ (43)$$
$$=[x\hat{P}_y-y\hat{P}_x]i\hbar\delta_z=i\hbar\hat{L}_z$$

....

المـــــؤثر $\hat{L}^2$

$$\hat{L}^2=\hat{L}^2{}_x+\hat{L}^2{}_y+\hat{L}^2{}_z$$

حيث $\hat{L}^2=\hat{L}.\bullet\hat{L}$

$$\hat{L}_x{}^2=\hat{L}_x\bullet\hat{L}_x$$

مــــثال : أحسب أقواس التبادل بين $\hat{L}^2$ ومركباته الثلاث

ملاحظة : أستفد من خواص أقواس التبادل $[A^2,B]=A[A,B]+[A,B]A$

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=(\hat{L}^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}^2)$$
$$=(\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2)\hat{L}_x-\hat{L}_x(\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2)$$
$$=\hat{L}_x^2\hat{L}_x+\hat{L}_y^2\hat{L}_x+\hat{L}_z^2\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_x^2-\hat{L}_x\hat{L}_y^2-\hat{L}_x\hat{L}_z^2$$
$$=[\hat{L}_x^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x]$$
$$=\hat{L}_x[\hat{L}_x,\hat{L}_x]+[\hat{L}_x,\hat{L}_x]\hat{L}_x+\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{L}_x]+$$
$$[\hat{L}_y,\hat{L}_x]\hat{L}_y+\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z,\hat{L}_x]\hat{L}_z$$
$$=\hat{L}_x[0]+[0]\hat{L}_x+\hat{L}_y[-i\hbar\cancel{\hat{L}_z}]-i\hbar\cancel{\hat{L}_z}\hat{L}_y$$
$$+i\hbar\cancel{\hat{L}_z}L_y+i\hbar\cancel{L_y}L_z$$
$$=0$$

وبنفس الطريقة بالمثال يمكن أثبات أن جميع مركبات الزخم الزاوي تكون متبادلة مع $\hat{L}^2$

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_y\right]=0$$
$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right]=0 \qquad (44)$$
$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right]=0$$

((المعادلات (44) تخضع لخاصية التبادل وهذا يعني وجود دوال ذاتية مشتركة بين المؤثر $\hat{L}^2$ وأي من المركبات الثلاث........وهذا يعني أننا نستطيع قياس القيم المتوقعة لأي أثنين من هذه المركبات وبدقة تامة)) .

المؤثرات السلمية $\hat{L}_+$ $\hat{L}_-$ **Ladder Operator**

الان يمكن أن نعرف المؤثرين $\hat{L}_+$ $\hat{L}_-$, بالطريقة التالية

$$\hat{L}_{\pm}=\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \qquad ....(45)$$

مثال

أحسب قوس التبادل $\left[\hat{L}_z,\hat{L}_{\pm}\right]=\pm i\hbar\hat{L}_{\pm}$

(الحـــــل)

$$\left[\hat{L}_z,\hat{L}_{\pm}\right]=\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]\pm i\left[\hat{L}_z,\hat{L}_y\right]$$
$$=i\hbar\hat{L}_y \pm(-i\hbar\hat{L}_x)$$
$$=\pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)$$
$$=\pm\hbar\hat{L}_{\pm} \qquad ....(46)$$

***نحن الان في موقع نستطيع حساب $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ والتي هي دالة ذاتية للمؤثر L^2 وبقيمة ذاتية $\hbar^2 l(l+1)$

$$L^2 Y_l^m(\vartheta,\phi)=\hbar^2 l(l+1)Y_l^m(\vartheta,\phi)$$

***$Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ هي أيضا دالة ذاتية الى المؤثر L_z بقيمة ذاتية $\hbar m$

$$L_z Y_l^m(\vartheta,\phi)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\vartheta,\phi)=m\hbar Y_l^m(\vartheta,\phi)$$

النتيجة هي التوافقيات الكروية Spherical harmonic $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ وهذا معناه ان التوافقيات الكرويه هي دوال ذاتية للمؤثرين L^2 و L_z .

مثال:

ما هي القياسات الممكنة لكل من L^2 و L_z للدالة الذاتية $|l,m>=|3,m>$ ؟

(الـــحل)

القياسات الممكنة هي القيم الذاتية ، فالقيم الذاتية للمؤثر L^2 هي $\hbar^2 l(l+1)$

$$\hbar^2 l(l+1) = 3(3+1)\,\hbar^2 = 12\hbar^2$$

لقيم $l=3$ فان القيم ممكنة القياس للمؤثر L_z هي من $-3\hbar$ الى $3\hbar$

$$-3\hbar,\quad -\,2\hbar,\quad -\hbar,\quad 0,\quad \hbar,\quad 2\hbar,\quad 3\hbar$$

مثال:

ما هي نتائج تاثير المؤثرين L_+ و L_- على الدالة الذاتية $|2,-1>$ ؟

(الـــحل)

$$L_+\left|l,m>\right. = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\ \hbar\left|l,m+1>\right.$$

$$L_+\left|2,-1>\right. = \sqrt{2(2+1)-(-1)\big((-1)+1\big)}\ \hbar\left|-1+1>\right.$$

$$L_+\left|2,-1>\right. = \sqrt{6-0}\ \hbar|2\,,0>$$

$$L_+\left|2,-1>\right. = \sqrt{6}\ \hbar|2\,,0>$$

H.W1

$$L_-\,|2\,,-1> = ?$$

H.W2 أثبت أن $[\hat{L}_y,\hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$. و $[\hat{L}_z,\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$

H.W3 أحسب قوس التبادل

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_\pm]$$
$$[\hat{L}_y,\hat{L}_\pm]$$
$$[\hat{L}^2,\hat{L}_\pm] = 0$$
$$[\hat{L}_\pm,\hat{L}_\pm] = \pm 2\hbar\hat{L}_z$$

محاضرة رقم (~~5~~ 6)

((الفـــــصل الأول))

الميكانيك الكمي بثلاثة أبعاد

الزخم الزاوي الذاتي (البرم)   ***Intrinsic angular momentum (SPIN)***

....

من خلال التجارب العملية للجسيمات الاولية ,وجد ان معظم الجسيمات تمتلك درجة حرية داخلية اضافية تسمى " البرم " ومن الافضل التفكير بالبرم على أنه عدد كمي اضافي نحتاجه لتوصيف حالة (دالة) الجسيم ، والبرم هي خاصية تعبر عن دوران الجسيم الأولي حول نفسه.
والبرم هو واحد من الزخوم الزاوية بالميكانيك الكمي والنوع الثاني درسناه سابقا هو الزخم الزاوي المداري
والمعنى الفيزياوي للبرم غير مفهوم جيدا وبرم الجسيم هوشكل من أشكال الزخم الزاوي.....

يتم وصف البرم " بمؤثرمتجهي S, حيث

$$\vec{S} = \overrightarrow{e_x}\, S_x + \overrightarrow{e_y}\, S_y + \overrightarrow{e_z}\, Z_z \text{..............(1)}$$

$\overrightarrow{e_\imath}$ وحدة متجه $(i = x, y, z)$ مركبات البرم (S_x, S_y, S_z) تحقق علاقات التبادل التالية:

$$[S_x\, , S_y = i\hbar S_z]$$

$$[S_y\, , S_z = i\hbar S_x] \text{.....................(2)}$$

$$[S_z\, , S_x = i\hbar S_y]$$

وهذا يعني وجود دوال ذاتية انية مشتركه لكل من S^2 و S_z

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \text{.............(3)}$$

$$S^2 \left| S, m_s \right\rangle = \hbar^2 S(S+1) \left| S, m_s \right\rangle$$

$$S_z\, |S, m_s > = \hbar m_s |S, m_s >$$

حيث أن m_s هو العدد الكمي المغزلي

....

هناك فقط قيمتان للمركبة m_s ، $m_s = \pm\frac{1}{2}$ نستطيع ان نقول ان المتجه الذاتي(دالة البرم) هو $| \pm\frac{1}{2} >$ بقيم ذاتية تساوي

$$S^2 \left|\pm\frac{1}{2} \right> = \frac{3}{4}\,\hbar^2 \left| \pm\frac{1}{2} \right>$$

يمكن كذلك تعريف مؤثرات الرفع والخفض $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ وبيان تأثيرها على الدالة $| \pm\frac{1}{2} >$

$$S_+ |\frac{1}{2} > = 0$$

$$S_- \left|\frac{1}{2} \right> = \hbar \left| -\frac{1}{2} \right>$$

$$S_- \,| -\frac{1}{2} > = 0$$

$$S_+ | -\frac{1}{2} > = \hbar |\frac{1}{2} >$$

وكما شرحنا سابقا فيما يخص الزخم الزاوي L , فأن مؤثر الرفع يرفع الى دالة أعلى او يجعل القيمة صفرا أذا كنا في أعلى دالة

استخدام التمثيل المصفوفي للبرم

$$|\frac{1}{2} > = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$| -\frac{1}{2} > = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

في هذا التمثيل فان مؤثرات البرم تتناسب مع مصفوفات باولي $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$

أذ ان مصفوفات باولي تعرف بالعلاقات ادناه

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 1$$

*****هناك عدة طرق لتمثيل متجه دالة البرم وهي

$$|\frac{1}{2}> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+> = |\uparrow> = \uparrow$$

$$|-\frac{1}{2}> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-> = |\downarrow> = \downarrow$$

مثال: استخدم التمثيل المصفوفي للبرم واحسب

$$S_x\,|+> = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}|->$$

$$S_x\,|-> = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}|+>$$

H.W1 جد نواتج التاثير التالي

$$S_y|+> \qquad S_z|-> \qquad S_y|-> \qquad S_z|+\rangle$$

H.W2 في تمثيل البرم لدينا $S_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $S_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ أحسب التكامل $\left\langle S_{\frac{1}{2}} \middle| S_{-\frac{1}{2}} \right\rangle = \delta_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}}$

H.w3 القيمة المتوقعة للمؤثر $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ للحالة المتمثلة بالدالة $S = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ تساوي

محاضرة رقم (7)

((الفـصل الثاني))

ميكانيك المصفوفات

Matrix Mechanics

****

لا شك ان الطالب لديه الكثير من المعلومات عن المصفوفات وكيفية التعامل معها ومع العمليات الحسابية من عمليات الجمع والطرح والضرب والقسمة ...... الخ

وما يهمنا في ميكانيك المصفوفات هو أن المؤثرات التي نتعامل معها تكتب بشكل مصفوفات ليسهل التعامل معها..................

وهذه المؤثرات يجب أن تمتلك الخواص الاتية:

1- يجب أن تكون مؤثرات هرميتية.

2- المؤثر يجب أن يكون كمية مقاسة تجريبيا ولذلك أصبح هذا المؤثر هو مؤثر هرميتي كمي.((نتائج قياسات الكمية تطابق البتائج التجريبية)) .

3- يجب أن تكون خطية وهذه الصفة مهمة جدا حيث تمكننا من وضع هذه المؤثرات والتعامل معها بقوانين الجبر الخطي الاعتيادية.

أذا كان لدينا الدالة الذاتية $\boldsymbol{\phi}$ يؤثر عليها مؤثر $\widehat{A}$ فيعطي دالة جديدة Ψ

$$\Psi = \boldsymbol{\phi}\widehat{A} \qquad ....(1)$$

المعادلة (1) تمثل عملية تحويل وأن $\widehat{A}$ أما ن يكون تفاضل أو تكامل على كل الفضاء الموجود فيه الجسم

الدالة $\boldsymbol{\phi}$ ممكن تكون

$$_3\boldsymbol{\phi},\ _2\boldsymbol{\phi}\ ,\ _1\boldsymbol{\phi}\ = \boldsymbol{\phi}\ ,\ ....$$

وكذلك

$$\Psi=\Psi_1 ,\Psi_2 ,\Psi_3 , \qquad ....(2)$$

Ψ_3 ,Ψ_2 ,Ψ_1 تمثل المتجهات الاساسية Basic functions

ونستطيع كتابة Ψ بدلالة المتجهات الاساسية :

$$.............(3)\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} b_i \Psi_i$$

بالرجوع للمعادلة (1) نلاحظ أن المؤثر $\hat{A}$غير الدالة من متجه $\emptyset$ الى متجه Ψ (جديد) وهذه العملية بالرياضيات تدعى المصفوفات (Matrix)

نستطيع أن نعبرعن كل مؤثر بشكل مصفوفة.:.

****

لنفرض لدينا مجموعة الدوال $U_n(r)$ أثرنا عليها بالمؤثر الكمي $\hat{F}$ والناتج دالة جديدة لأحداثيات النظام n=1,2,3,.....

$$............(4) \qquad \hat{F}U_n(r) = \square_n(r)$$

يمكن توسيع الدالة الجديدة $\chi_n(\vec{r})$ بدلالة $U_n(r)$ لان الأخيرة تمثل مجموعه كاملة

$$\hat{F}U_1(r) = f_{1m}U_m(r)$$
$$\hat{F}U_2(r) = f_{2m}U_m(r)$$
$$\hat{F}U_3(r) = f_{3m}U_m(r) \qquad ....(5)$$
$$\vdots$$
$$\hat{F}U_m(r) = \sum f_{mn}U_n(r)$$

هي عوامل متوقعه (Projections coefficients) ولحساب f_{mn} نأخذ المرافق $U_j^*(r)$

وبأخذ خواص التعامد والمعايرة

$$\int U_j^* \hat{F} U_n d\tau = \sum f_{mn} \int U_j^* U_n d\tau \qquad \text{.............(6)}$$

$$\delta_{jm} = \int U_j^* U_n d\tau$$

$$\int U_j^* \hat{F} U_n d\tau = \sum f_{mn} \delta_{jm} \qquad \text{............(7)}$$

وهذه العلاقة تكتب بشكل محدد كما في أدناه

$$f_{mn} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \dots\dots f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & \dots\dots f_{2n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ f_{m1} & f_{m2} & \dots f_{mn} \end{pmatrix} \qquad \text{.(8)......................}$$

المعادلة (8)هي مصفوفة $\hat{F}$ بتمثيل $[U_n]$

اذا كانت المصفوفة قطرية اي ان كل عناصرها تساوي صفر ما عدا تلك التي تقع على القطر الرئيسي فان المقادير التي على القطر هي قيم ذاتية للمؤثر $\hat{F}$ واذا كانت لدينا مصفوفة المؤثر $\hat{F}$ فاننا نستطيع اجاد القيم الذاتية لهذا المؤثر من خلال جعل مصفوفته قطريه.

$$\begin{pmatrix} f_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_{44} \end{pmatrix}$$

العناصر الي في المنتصف هي القيم المميزة

بتمثيل المصفوفات $\hat{L}^2, \ \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$

نختار U_n بدلالة المحاور الكروية لأن لها معادلة قيم مميزة ودوال مميزة

$$U_n \rightarrow Y_l^m(\theta,\emptyset)$$

بصورة عامة

$$\langle L_i \rangle = \langle Y_l^m(\theta,\emptyset)\big|\hat{L}_i\,\big|Y_{\acute{l}}^{\acute{m}}(\theta,\emptyset)\rangle = \big\langle lm\big|\hat{L}_i\,\big|\acute{l}\acute{m}\big\rangle \quad ....(9)$$

وكذلك

$$...........(10)\big\langle lm\big|\hat{L}_z\big|\acute{l}\acute{m}\big\rangle = \acute{m}\hbar\big\langle lm\big|\acute{l}\acute{m}\big\rangle$$

$$=\acute{m}\hbar\delta_{m\acute{m}}\,\delta_{l\acute{l}}$$

مصفوفة $\hat{L}_z$

أكتب مصفوفة $\hat{L}_z$ للعدد الكمي $\mathrm{l} = 1$

الحل

بالنسبة ل $\mathrm{l} = 1$ هناك ثلاثة قيم ل m هي *1,0,-1* وبذلك تكون مصفوفة $\hat{L}_z$ هي *3×3*

فمن العلاقة (10)

$$\big\langle 11\big|\hat{L}_z\big|11\big\rangle = \acute{m}\hbar = \hbar$$

$$=0\big\langle 11\big|\hat{L}_z\big|1-1\big\rangle = \big\langle 1-1\big|\hat{L}_z\big|11\big\rangle = \acute{m}\hbar\delta_{11}$$

$$\big\langle 1-1\big|\hat{L}_z\big|1-1\big\rangle = \acute{m}\hbar = -\hbar\delta_{11}\delta_{-1-1}$$

$$\big\langle 10\big|\hat{L}_z\big|10\big\rangle = 0\hbar = 0\delta_{11}\delta_{00}$$

∴ محدد $\hat{L}_z$ هو

$$\hat{L}_z = \hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

مصفوفة $\hat{L}^2$

اولا-- أكتب مصفوفة$\hat{L}^2$ للعدد الكمي $l = 1$

$$\langle lm|\hat{L}^2|\acute{l}\acute{m}\rangle = \hbar^{\acute{2}} l(l \acute{+} 1)\delta_{m\acute{m}}\,\delta_{l\acute{l}}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

ثانيا-- أكتب مصفوفة$\hat{L}^2$ للعدد الكمي $l = 2$

بالنسبة ل $l = 2$ تكون لدينا مصفوفة 5×5

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}$$

محاضرة رقم (8)

((الفصل الثاني))

ميكانيك المصفوفات   *Matrix Mechanics*

مصفوفات المؤثرات للمتذبذب التوافقي

مصفوفة الهاملتون:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

فأذا كانت الدالة الموجية $\Psi(x)$هي حل معادلة شرودنكرللمتذبذب التوافقي ,

$$\hat{H}\ \Psi_n(x) = E_n\ \Psi_n(x)$$

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

وبذلك تكون عناصر الهاملتون

$$H_{mn} = <\ \Psi_m(x)\left|\hat{H}\right|\ \Psi_n(x) > = (n + \tfrac{1}{2})\hbar w\ \delta_{mn}$$

وان المصفوفة تكتب كالاتي

$$H = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar w & 0 & 0 & 0 & 0 \ldots\ldots.. \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar w & 0 & 0 & 0 \ldots\ldots\ldots. \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar w\ . & \ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots & \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & & & \\ 0 & 0 & \ldots\ldots..\ldots\ldots. & \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar w & \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots. & & & & \end{bmatrix}$$

مصفوفة الهاملتون هي مصفوفة قطرية

مصفوفة مركبة الزخم الخطي $\widehat{P_x}$

أن مؤثر مركبة الزخم الخطي بلأتجاه $\widehat{x}$

$$\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

$$\left(\hat{P}_x\right)_{mn} =< \Psi_m(x)\left|\hat{P}\right| \Psi_n(x) > \text{..................................} \ (**)$$

حيث أن الدوال الموجية بالعلاقة (**) هي

$$\Psi_n(x) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}}(\xi)$$

وبذلك نحسب القيم الذاتية من العلاقة (**)

((ألأشتقاق غير مطلوب فقط حفظ المصفوفة النهائية))

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x)\hat{P}_x \ \Psi_n(x)dx$$

وبتمثيل ξ أذ ان $\xi = \sqrt{\alpha}\, x$ وكذلك متعدد حدود هرمت $H_n(\xi)$

$$\left(\hat{P}_x\right)_{mn} = \frac{\hbar}{i} A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_m(\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left[e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)\right]dx$$

وبأستخدام متعددة حدود هيرمت

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

نحصل على

$$\left(\hat{P}_x\right)_{mn} = \frac{\hbar}{i} A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} n \ \ H_m(\xi)H_{n-1}(\xi)\,\mathrm{d}\xi - \frac{\hbar}{2i} A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \ H_m(\xi)H_{n+1}(\xi)\,\mathrm{d}\xi$$

نلاحظ أن التكامل الاول يساوي صفر ما لم تكون $n - 1 = m$

أذن التكامل الاول يكون

$$\left(\hat{P}_x\right)_{m,m+1} = \frac{\hbar}{i} A_m^* A_{m+1}(m+1) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \ H_m(\xi)H_m(\xi)\,\mathrm{d}\xi$$

$$\left(\hat{P}_x\right)_{m,m+1} = \frac{\hbar}{i} A_m^* \, A_{m+1}(m+1)\ \ 2^m m! \sqrt{\pi}$$

$$\left(\hat{P}_x\right)_{m,m+1} = \frac{\hbar}{i}(m+1)\left[\frac{1}{2^m m!}\ \left(\frac{\propto}{\pi}\right)^{1/2}\right]^{1/2}\left[\frac{1}{2^{m+1}(m+1)!}\ \left(\frac{\propto}{\pi}\right)^{1/2}\right]^{1/2}\ 2^m m! \sqrt{\pi}$$

وبتبسيط هذه العلاقة نحصل

$$\left(\hat{P}_x\right)_{m,m+1} = \ \hbar\ \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2}\left(-i\sqrt{m+1}\right)$$

وبنفس الطريقة فالتكامل الثاني يساوي صفر ما لم يكون $n+1=m$

$$\left(\hat{P}_x\right)_{m,m-1} = \ \hbar\ \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2}\ (i\sqrt{m}\,)$$

وبلأخير تكون النتيجة كلأتي

$$\hat{P}_x = \ \hbar\ \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2}\ \begin{cases}(-i\sqrt{m+1} \\ \quad i\sqrt{m}\end{cases}$$

وستكون المصفوفة مساوية الى:

$$\hat{P}_x = \ \hbar\ \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2}\begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & -i\sqrt{4} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & -i\sqrt{m} & 0 & \\ & i\sqrt{m} & 0 & -i\sqrt{m+1} & \\ & 0 & i\sqrt{m+1} & 0 & \end{bmatrix}$$

مصفوفة مؤثر $\hat{X}$

$$\hat{X}_{mn} =< \Psi_m(x)\left|\hat{X}\right| \Psi_n(x) > = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)_m^* X \Psi_n(x) dx$$

$$(\hat{X}_x)_{mn} = (1/2\sqrt{\propto}) A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_{n+1}(\xi) \,\mathrm{dx}$$
$$+ (\frac{\mathrm{n}}{\sqrt{\propto}}) A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_{n-1}(\xi) \,\mathrm{dx}$$

وبأستخدام العلاقة

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

من خلال حالة التعامد لدوال هيرمت نلاحظ أن التكاملين يساويان صفر ما لم يكون :

التكامل الاول تكون له قيمة عندما $m = n + 1$

$$X_{m,m-1} = \left(\frac{M}{2\alpha}\right)^{1/2} \qquad M = m - 1$$

التكامل الثاني تكون له قيمة عندما $m = n - 1$

$$X_{m,m+1} = \left(\frac{M+1}{2\alpha}\right)^{1/2} \qquad M = m - 1$$

أذن مصفوفة المؤثر $\hat{X}$ في هذا التمثيل

$$\hat{X}_x = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & \sqrt{m} & 0 & \\ & \sqrt{m} & 0 & \sqrt{m+1} & \\ & 0 & \sqrt{m+1} & 0 & \end{bmatrix}$$

H.W.1

جد مصفوفة كل من X^2 و P_x^2 لزيادة المعلومات راجع كتاب مقدمة في الميكانيك الكمي د.هاشم عبود و د.ضياءالمختار

H.W.2

أثبت أن القيمة المتوقعة ل $\langle \hat{p}_x \rangle = -\hbar(\frac{\alpha}{2})^{1/2} \sin \omega t$ وفي حالة الدالة

$$\psi = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} & \frac{1}{\sqrt{2}} e^{3i\omega t/2} & 0 \end{bmatrix}$$

H.W.3

لديك مصفوفة الطاقة للعناصر 4×4 فقط تساوي

$$E = \begin{bmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7\hbar\omega}{2} \end{bmatrix}$$

أحسب القيمة المتوقعة للطاقة $\langle E \rangle$ مستخدما الدالة

$$\psi_{(t)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} & \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-3i\omega t/2} & 0 \end{bmatrix}$$

محاضرة رقم(9)

((الفـصل الثاني))

Matrix Mechanics ***ميكانيك المصفوفات***

المتذبذب التوافقي وجبر المصفوفات (مؤثرات الرفع والخفض)

سنجري تغييرا على المؤثرات $\hat{X}$ و $\hat{P}_x$ بحيث نجعلها خالية من الوحدات (Dimensionless) وليكن

$$\chi = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\ X \quad , \quad \mathcal{P} = \frac{1}{\sqrt{mw\hbar}}\ P$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\ \hbar w \left[\chi^2 + \mathcal{P}^2\right]$$

$$[\chi , \mathcal{P}] = i$$

لنعرف مؤثر جديد ولنسميه $\hat{a}$ بحيث ان

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ [\chi + i\mathcal{P}\ ] \quad , \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\ [\chi - i\mathcal{P}\ ]$$

وعليه تكون المؤثرات χ و $\mathcal{P}$ بدلالة ($\hat{a}$ و $a^\dagger$) $a^\dagger$ المرافق الهرميتي الى $\hat{a}$

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}\ [\ \hat{a} + a^\dagger\ ] \quad , \quad \mathcal{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}\ [a^\dagger - \hat{a}\ ]$$

لنرى الان ماذا يعني حاصل ضرب المؤثرات $\hat{a}$ و $a^\dagger$ وكيف سنستفيد منهما لاحقا

$$\hat{a}a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\ [\chi + i\mathcal{P}\ ] * \frac{1}{\sqrt{2}}\ [\chi - i\mathcal{P}\ ]$$

$$\hat{a}a^{\dagger} = \frac{1}{2}\left(\chi^{2} + \mathcal{P}^{2}\right) + \frac{i}{2}(\mathcal{P}\,\chi - \chi\mathcal{P}) \qquad ....(1)$$

$$a^{\dagger}\,\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\chi^{2} + \mathcal{P}^{2}\right) - \frac{i}{2}(\mathcal{P}\,\chi - \chi\mathcal{P}) \qquad ....(2)$$

نطرح المعادلة رقم (2) من المعادلة رقم (4) نحصل على

$$\hat{a}a^{\dagger} - a^{\dagger}\,\hat{a} = i[\mathcal{P}\,,\chi] = 1 \qquad ....(*)$$

$$\left[\hat{a}\,,a^{\dagger}\right] = 1 \quad ....(3)$$

من العلاقة(2) والعلاقة (*)   يمكن ان نحصل على

$$a^{\dagger}\,\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\chi^{2} + \mathcal{P}^{2}\right) - \frac{i}{2}\,\frac{1}{i}$$

$$a^{\dagger}\,\hat{a} = \frac{\mathcal{H}}{\hbar w} - \frac{1}{2}$$

$$\mathcal{H} = (a^{\dagger}\,\hat{a} + \frac{1}{2})\;\hbar w$$

اي اننا وجدنا صيغة المؤثر الهاملتوني للمتذبذب التوافقي بدلالة مؤثرات الرفع والخفض وبوحدات $\hbar w$

لنعرف المؤثر التالي بدلالة $\hat{a}$ و $a^{\dagger}$

$$\hat{N} = \; a^{\dagger}\,\hat{a}$$

$$\mathcal{H} = (\hat{N} + \frac{1}{2})\;\hbar w$$

لتكن الدالة $\Psi = |\lambda >$ الدالة الذاتية للهاملتون $\mathcal{H}$ بقيمة ذاتية λ اي بمعنى

$$\mathcal{H}|\lambda > = \lambda\,|\lambda >$$

نريد معرفة عمل المؤثر $a^{\dagger}$ على المعادلة $\mathcal{H}|\lambda > = \lambda\,|\lambda >$

$$\mathcal{H}(\,a^{\dagger}\,|\lambda >) = ?$$

$$= (a^{\dagger}\,\hat{a} + \frac{1}{2})\;\; a^{\dagger}\,|\lambda > \hbar w$$

يمكن رفع $\hbar w$ من المعادلة مؤقتا لانها مقدار ثابت ثم بعد ذلك اضافتها الى النتيجه الاخيرة لتقليل تكرار كتابتها

$$a^{\dagger}(\mathcal{H}\left|\lambda >= \;a^{\dagger}\left(\hat{a}a^{\dagger} + \frac{1}{2}\right)\right|\lambda >$$

$$= \;a^{\dagger}(a^{\dagger}\,\hat{a} + 1 + \frac{1}{2})\;\;|\lambda >$$

$$= \;a^{\dagger}(\,\mathcal{H} + 1)\;\;|\lambda >$$

$$= \;a^{\dagger}(\,\lambda + 1)\;\;|\lambda >$$

$$= (\,\lambda + 1)\;\;\; a^{\dagger}\;\;|\lambda >$$

$$\mathcal{H}(\,a^{\dagger}\,|\lambda >) = \;(\,\lambda + 1)\;\;\; a^{\dagger}\;\;|\lambda >$$

يمكن القول ان $(\,a^{\dagger}\;\;|\lambda >\,)$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\mathcal{H}$ بقيمه ذاتية $(\,\lambda + 1)$ ومنه نستنتج ان المؤثر $a^{\dagger}$ رفع القيمة الذاتية للمؤثر الهاملتوني بمقدار وحده واحدة لذلك يسمى مؤثر رفع

بالمثل فان

$$\mathcal{H}(\,\hat{a}|\lambda >) = (\,\lambda - 1)\hat{a}\;|\lambda >$$

أذن $\hat{a}$ هو مؤثر خفض

مؤثر الخفض يجب ان يغلق (يتوقف) عند حد معين ولا يمكن الاستمرار به للمالانهاية بحيث ان

$$< E > \geq 0$$

لنفرض ان $|0>$ هي ادنى حالة ممكنه (حالة مستقرة) ground state بحيث ان تاثير $\hat{a}$ عليها يساوي صفر

$$\hat{a}|0> = 0 \qquad \text{..............} \ (4)$$

تعتبر هذه العلاق جدا مهمة بالنسبة للمتذبذب التوافقي وسنستفاد منها لاحقا

Eigen values of the harmonic oscillator

القيم الذاتية للمتذبذب التوافقي

....

سنبدأ من الحالة المستقرة

$$\mathcal{H}|0> = E_0|0>$$

$$(a^{\dagger}\,\hat{a} + \frac{1}{2})\,\Big|0> = \left(\widehat{N} + \frac{1}{2}\right)\Big|\,0>$$

$$= \left(0 + \frac{1}{2}\right)\Big|0> = \frac{1}{2}\Big|\,0>$$

$$E_0 = \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\hbar w$$

المیكانیك الكمي

((الفـــصل الثالث))

طرق التقريب Approximation Methods

****

في ميكانيك الكم هناك القليل من المسائل الفيزيائية البسيطة والتي يمكن أن نحصل لها علي حلول دقيقة كاملة لمعادلة شرودنجر بسبب البساطة والسهولة النسبية لمؤثر الهاملتون الذي يمثل تلك المسألة،

ومن الامثلة على تلك المسائل الجسيم الحر في بئر جهد، ذرة الهيدروجين والمتذبذب التوافقي البسيط . لكن معظم المسائل في ميكانيك الكم ليس لها حل كامل ودقيق لصعوبة الهاملتون (مثل ذرة الهليوم التي تحتوي الكترونين في مدارها الخارجي) وبالتالي صعوبة حل معادلة شرودنجر، ولذلك نضطر إلي استخدام طرق تقريبية لحساب القيم الذاتية والدوال الذاتية لمؤثر الهاملتون وللحصول علي معلومات قيّمة ندرسها حول سلوك النظام الذي ندرسه .

كيفية حساب الفرق

1- لحساب الفرق نستخدم نظرية التصحيح
2- يستخدم التقريب للحصول على نتيجة أفضل قريبة من الواقع
3- أذا كان الفرق كبير فأن نظرية التقريب لا تصح
4- نستخدم طرق التقريب فقط أذا كان التأثير ضعيف

من أهم طرق التقريب

1- نظريه التصحيح **Perturbation Theory**
2- طريقه التغاير **Variational Method**

1- نظرية التصحيح

(أ) نظريه التصحيح تقسم الى نظريه التصحيح الغير معتمدة على الزمن

(ب) نظريه التصحيح التي تعتمد على الزمن

سندرس أولا/

نظريه التصحيح الغير معتمده على الزمن

i // للمستويات الطاقة المنحله

ii// لمستويات الطاقه غير المنحله

(ملاحظة)

في دراستنا لنظريه الاضطراب الغير المعتمده على الزمن الهاملتون الممثل للنظام الكمي محل الدراسه يفترض ان لايعتمد بشكل صريح على الزمن

نظام بسيط + تاثير خارجي = نظام بسيط +حد أضطراب أو تصحيح

نفرض لدينا نظام هاملتون مثالي (قبل حدوث تأثير عليه يكون في الحاله الصفريه), فان معادله القيم الذاتيه

$$H^0\varphi_n^0 = E_n^0\varphi_n^0 \qquad \textbf{..........(1)}$$

العلاقه (1) معروفه وبالتفصيل (غير مقربه) وتكون الطاقه المرتبطه به $\boldsymbol{E_n^o}$ كبيرة ∴هو يمثل الجزء الأعظم من الهاملتون

بعد تاثير مؤثر خارجي على النظام أعلاه فان الهاملتون للنظام الجديد يصبح

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' = \hat{H}^0 + \lambda\hat{w} \qquad \textbf{.........(2)}$$

اذن اصبح لدينا مساله جديده نحتاج لحلها

1- معرفة $\hat{H}'$ والذي يمثل الاضطراب وهو صغير جدا مقارنة مع $\hat{H}_0$

2- معرفه الحاله الصفريه لايجاد الدوال الذاتيه والقيم الذاتيه للنظام.

وللسهوله نفرض حد الاضطراب

$$\hat{H}' = \lambda \hat{w} \quad ....(3)$$

تعرف λ بالوسيط وهي معامل حقيقي خالي من الوحدات وتتراوح قيمتها

$$0 \langle \ \lambda \ \langle 1 \quad ....(4)$$

اذن المساله المراد إيجاد حلولها التقريبيه هي :

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n ....(5)$$

ψ ايتل لثمت اولسلك ايلعفلا نللظام ادقعملا تختلف أختلافا طفيفا عن φ_n^0 التي تمثل السلوك الاساسي للنظام لذلك فيمكن كتابتها كمتسلسلة قوى بدلالة λ وكالاتي:

$$\Psi_n = \Psi_n^o + \lambda\, \Psi_n^1 + \lambda^2\Psi_n^2 + \lambda^3\Psi_n^3 + \cdots ....(6)$$

وكذلك E_n تختلف أختلافا طفيفا عن القيم الذاتية للنظام المثالي فلذلك يمكن كتابتها بدلالة λ وكالاتي

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 . + ...(6)$$

Ψ_n^o هي الدالة الذاتية للحالة الصفرية وتساوي φ_n^0

Ψ_n^1 هي الدالة الذاتية المصححة من الرتبة الاولى

Ψ_n^2 هي الدالة الذاتية المصححة من الرتبة الثانية

E_n^o القيمة الذاتية للحالة الصفرية

E_n^1 القيمة الذاتية المصححة من الرتبة الاولى

E_n^2 القيمة الذاتية المصححة من الرتبة الثانية .... وهكذا

والان لحل معادله شرودنكر للنظام المعقد تكون مهمتنا هي إيجاد التصحيحات للدوال الذاتيه والقيم الذاتيه لاي رتبه فمثلا

$$E_n \approx E_n^0 + \lambda^1 E_n^1 \quad \text{..........(7)}$$

تمثل التصحيح من الرتبة الاولى

عوض العلاقتين 2و 7 بالعلاقه 5 مع كون $\lambda^0 = 1$ نحصل

$$\left(\hat{H}^0 + \lambda^1 \hat{w}\right)\varphi_n^0 = \left(E_n^0 + \lambda^1 E_n^1\right)\varphi_n^0 \quad \text{........(8)}$$

بضرب طرفي للعلاقة من اليسار بمرافق φ_n^0 واجراء عملية التكامل نحصل

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{H}^0 + \lambda^1 \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| \left(E_n^0 + \lambda^1 E_n^1\right) \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{H}^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle + \lambda^1 \left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle + \lambda^1 \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^1 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

وبما ان

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{H}^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

أذن

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^1 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = E_n^1 \left\langle \varphi_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

وبذلك نستطيع كتابة التصحيح الأول للطاقة

$$E_n^1 = \frac{\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle}{\left\langle \varphi_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle}$$

واذا كانت φ_n^0 معايرة , اذن نستطيع كتابة التصحيح الأول بالطاقة بالصيغة ادناه

$$E_n^1 = \left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle \quad \text{...........(9)}$$

حيث يمكن الاستفادة من خواص المعايرة والتعامد للدوال

$$\langle \varphi_n^0 | \varphi_m^0 \rangle = \delta_{nm} \begin{cases} = 1 & \text{if } n = m \\ = 0 & \text{if } n \neq m \end{cases}$$

العلاقة (9) تمثل مصفوفة عناصر قطرية يمكن كتابتها بالشكل

$$E_n^1 = \hat{w}_{n,n} \quad \text{........(10)}$$

وبذلك يمكننا حساب $\widehat{W}_{n,n}$ بأجراء التكامل التالي:

$$\widehat{W}_{n,n} = \int \emptyset_n^0 \ \widehat{W} \emptyset_n^0 \quad \text{.......(11)}$$

محاضرة رقم(11)
الميكانيك الكمي

((الفـــصل الثالث))

طرق التقريب Approximation Methods

****

في ميكانيك الكم هناك القليل من المسائل الفيزيائية البسيطة والتي يمكن أن نحصل لها علي حلول دقيقة كاملة لمعادلة شرودنجر بسبب البساطة والسهولة النسبية لمؤثر الهاملتون الذي يمثل تلك المسألة،

ومن الامثلة على تلك المسائل الجسيم الحر في بئر جهد، ذرة الهيدروجين والمتذبذب التوافقي البسيط . لكن معظم المسائل في ميكانيك الكم ليس لها حل كامل ودقيق لصعوبة الهاملتون (مثل ذرة الهليوم التي تحتوي الكترونين في مدارها الخارجي) وبالتالي صعوبة حل معادلة شرودنجر، ولذلك نضطر إلي استخدام طرق تقريبية لحساب القيم الذاتية والدوال الذاتية لمؤثر الهاملتون وللحصول علي معلومات قيّمة ندرسها حول سلوك النظام الذي ندرسه .

كيفية حساب الفرق

1- لحساب الفرق نستخدم نظرية التصحيح
2- يستخدم التقريب للحصول على نتيجة أفضل قريبة من الواقع
3- أذا كان الفرق كبير فأن نظرية التقريب لا تصح
4- نستخدم طرق التقريب فقط أذا كان التأثير ضعيف

من أهم طرق التقريب

1- نظريه التصحيح **Perturbation Theory**
2- طريقه التغاير **Variational Method**

1- نظرية التصحيح

(أ) نظريه التصحيح تقسم الى نظريه التصحيح الغير معتمدة على الزمن

(ب) نظريه التصحيح التي تعتمد على الزمن

سندرس أولا/

نظريه التصحيح الغير معتمده على الزمن

i // للمستويات الطاقة المنحله

ii// لمستويات الطاقه غير المنحله

(ملاحظة)

في دراستنا لنظريه الاضطراب الغير المعتمده على الزمن الهاملتون الممثل للنظام الكمي محل الدراسه يفترض ان لايعتمد بشكل صريح على الزمن

نظام بسيط + تاثير خارجي = نظام بسيط +حد أضطراب أو تصحيح

نفرض لدينا نظام هاملتون مثالي (قبل حدوث تأثير عليه يكون في الحاله الصفريه), فان معادله القيم الذاتيه

$$H^0\varphi_n^0 = E_n^0\varphi_n^0 \qquad \text{.........}(1)$$

العلاقه (1) معروفه وبالتفصيل (غير مقربه) وتكون الطاقه المرتبطه به $\boldsymbol{E_n^o}$ كبيرة ∴هو يمثل الجزء الأعظم من الهاملتون

بعد تاثير مؤثر خارجي على النظام أعلاه فان الهاملتون للنظام الجديد يصبح

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' = \hat{H}^0 + \lambda\hat{w} \qquad \text{.........}(2)$$

اذن اصبح لدينا مساله جديده نحتاج لحلها

1- معرفة $\hat{H}'$ والذي يمثل الاضطراب وهو صغير جدا مقارنة مع $\hat{H}_0$

2- معرفه الحاله الصفريه لايجاد الدوال الذاتيه والقيم الذاتيه للنظام.

وللسهوله نفرض حد الاضطراب

$$\hat{H}' = \lambda \hat{w} \quad \text{........(3)}$$

تعرف λ بالوسيط وهي معامل حقيقي خالي من الوحدات وتتراوح قيمتها

$$0 \langle \ \lambda \ \langle 1 \quad \text{.........(4)}$$

اذن المساله المراد إيجاد حلولها التقريبيه هي :

$$\text{.........(5)} \ \hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

ψ الثمد يتل اولسلك ااظنلل يلعفلم ادقعمل تختلف أختلافا طفيفا عن φ_n^0 التي تمثل السلوك الاساسي للنظام لذلك فيمكن كتابتها كمتسلسلة قوى بدلالة λ وكالاتي:

$$\Psi_n = \Psi_n^o + \lambda \Psi_n^1 + \lambda^2 \Psi_n^2 + \lambda^3 \Psi_n^3 + \cdots \text{....(6)}$$

وكذلك E_n تختلف أختلافا طفيفا عن القيم الذاتية للنظام المثالي فلذلك يمكن كتابتها بدلالة λ وكالاتي

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 . + \text{........} \text{....(6)}$$

Ψ_n^o هي الدالة الذاتية للحالة الصفرية وتساوي φ_n^0

Ψ_n^1 هي الدالة الذاتية المصححة من الرتبة الاولى

Ψ_n^2 هي الدالة الذاتية المصححة من الرتبة الثانية

E_n^o القيمة الذاتية للحالة الصفرية

E_n^1 القيمة الذاتية المصححة من الرتبة الاولى

E_n^2 القيمة الذاتية المصححة من الرتبة الثانية .... وهكذا

والان لحل معادله شرودنكر للنظام المعقد تكون مهمتنا هي إيجاد التصحيحات للدوال الذاتيه والقيم الذاتيه لاي رتبه فمثلا

$$E_n \approx E_n^0 + \lambda^1 E_n^1 \qquad \text{.........(7)}$$

تمثل التصحيح من الرتبة الاولى

عوض العلاقتين 2و 7 بالعلاقه 5 مع كون λ^0 =1 نحصل

$$\left(\hat{H}^0 + \lambda^1 \hat{w}\right)\varphi_n^0 = \left(E_n^0 + \lambda^1 E_n^1\right)\varphi_n^0 \qquad \text{........(8)}$$

بضرب طرفي للعلاقة من اليسار بمرافق φ_n^0 واجراء عملية التكامل نحصل

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{H}^0 + \lambda^1 \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| \left(E_n^0 + \lambda^1 E_n^1\right) \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{H}^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle + \lambda^1 \left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle + \lambda^1 \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^1 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

وبما ان

$$\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{H}^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

أذن

$$= \left\langle \varphi_n^0 \middle| E_n^1 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle \; \left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

$$= E_n^1 \left\langle \varphi_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle \; \left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

وبذلك نستطيع كتابة التصحيح الأول للطاقة

$$E_n^1 = \frac{\left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle}{\left\langle \varphi_n^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle}$$

واذا كانت φ_n^0 معايرة , اذن نستطيع كتابة التصحيح الأول بالطاقة بالصيغة ادناه

$$E_n^1 = \left\langle \varphi_n^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_n^0 \right\rangle \qquad \text{...........(9)}$$

هنا تمت الاستفادة من خواص المعايرة والتعامد للدوال

$$\langle \varphi_n^0 | \varphi_m^0 \rangle = \delta_{nm} \begin{cases} = 1 & \text{if } n = m \\ = 0 & \text{if } n \neq m \end{cases}$$

العلاقة (9) تمثل مصفوفة عناصر قطرية يمكن كتابتها بالشكل

$$E_n^1 = \hat{w}_{n,n} \quad \ldots\ldots\ldots \qquad \mathbf{(10)}$$

وبذلك يمكننا حساب $\widehat{\boldsymbol{W}}_{\boldsymbol{n,n}}$ بأجراء التكامل التالي:

$$\widehat{\boldsymbol{W}}_{\boldsymbol{n,n}} = \int \emptyset_{\boldsymbol{n}}^{\boldsymbol{0}} \; \widehat{\boldsymbol{W}} \emptyset_{\boldsymbol{n}}^{\boldsymbol{0}} \quad \ldots\ldots.\mathbf{(11)}$$

محاضرة رقم (12)

الميكانيك الكمي

((الفصل الثالث))

التصحيح من الرتبة الأولى للدالة الذاتية

من المحاضرة السابقة

$$H^0\varphi_l^0 = E_l^0\varphi_l^0 \qquad \text{.......... (1)}$$

$$H\Psi_l = E_l\Psi_l \qquad \text{.......... (2)}$$

$$H = H^0 + \lambda^1\hat{w} \qquad \text{.......... (3)}$$

$$\Psi_l = \varphi_l^0 + \lambda^1\Psi_l^1 \qquad \text{.......... (4)}$$

$$E_l = E_l^0 + \lambda^1 E_l^1 + \lambda^2 E_l^2 \qquad \text{.......... (5)}$$

بتعويض العلاقات 3,4,5 بالعلاقة 2 نحصل

$$\left(H^0 + \lambda\hat{w}\right)\left(\varphi_l^0 + \lambda\Psi_l^1\right) = \left(E_l^0 + \lambda E_l^1 + \lambda^2 E_l^2\right)\left(\varphi_l^0 + \lambda\Psi_l^1\right) \qquad \text{....... (6)}$$

$$H^0\varphi_l^0 + H^0\lambda\Psi_l^1 + \lambda\hat{w}\varphi_l^0 + \lambda^2\hat{w}\Psi_l^1 = E_l^0\varphi_l^0 + \lambda E_l^0\Psi_l^1 + \lambda E_l^1\varphi_l^0 + \lambda^2 E_l^1\Psi_l^1 + \lambda^2 E_l^2\varphi_l^0 + \lambda^3 E_l^2\Psi_l^1$$

و بمساواة معاملات λ^0 و λ^1و λ^2 علي جانبي العلاقة السابقة على التوالي نحصل على

$$\lambda^0 \text{ (8) ....} \qquad \hat{H}^0\varphi_l^0 = E_l^0\varphi_l^0 \qquad :$$

$$\lambda^1 \text{ (9) ....} \qquad \hat{H}^0\Psi_l^1 + \hat{w}\varphi_l^0 = E_l^1\varphi_l^0 + E_l^0\Psi_l^1 \qquad :$$

$$\lambda^2 \text{ (10) ....} \qquad \hat{w}\Psi_l^1 = E_l^1\Psi_l^1 + E_l^2\varphi_l^0 \qquad :$$

(ملاحظه)--- مع أهمال الرتب العليا ل λ

ولحساب التصحيح من الرتبة الأولى والثانية نفرض أنه يمكن كتابة التصحيح بفك الدالة Ψ_l^1 كجمع خطي ل φ_n^0 وكالأتي

$$\Psi_l^1 = \sum_{n\neq l} a_n \varphi_n^0 \qquad \text{.......... (11)}$$

وبتعويض العلاقه 9 بالعلاقة 11 نحصل على

$$\hat{H}^0 \sum_{n\neq l} a_n \varphi_n^0 + \hat{w}\varphi_l^0 = E_l^1 \varphi_l^0 + E_l^0 \sum_{n\neq l} a_n \varphi_n^0$$

بضرب المعادلة من اليسار ب $(\varphi_m^0)^*$ وأجراء التكامل

$$\left\langle \varphi_m^0 \middle| \hat{H}^0 \middle| \sum_{n\neq l} a_n \varphi_n^0 \right\rangle + \left\langle \varphi_m^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_l^0 \right\rangle = \left\langle \varphi_m^0 \middle| E_l^0 \middle| \varphi_l^0 \right\rangle + E_l^0 \sum_{n\neq l} a_n \left\langle \varphi_m^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

$$\sum_{n\neq l} a_n E_m^0 \left\langle \varphi_m^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle + \left\langle \varphi_m^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_l^0 \right\rangle = E_l^0 \left\langle \varphi_m^0 \middle| \varphi_l^0 \right\rangle + E_l^0 \sum_{n\neq l} a_n \left\langle \varphi_m^0 \middle| \varphi_n^0 \right\rangle$$

$$\sum_{n\neq l} a_n E_m^0 \delta_{m,n} + \left\langle \varphi_m^0 \middle| \hat{w} \middle| \varphi_l^0 \right\rangle = E_l^0 \delta_{ml} + E_l^0 \sum_{n\neq l} a_n \delta_{mn}$$

ولقيم $m \neq l$ تختصر الى

$$a_m E_m^0 + \hat{w}_{ml} = E_l^0 a_m$$

$$\text{.......... (12)} \qquad a_m = \frac{\hat{w}_{ml}}{E_l^0 - E_m^0}$$

وبما أن $m = n$, أذن

$$\text{.......... (13)} \qquad = \sum_{n\neq l} \frac{\hat{w}_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n^0 \quad \Psi_l^1 = \sum_{n\neq l} a_n \varphi_n^0$$

أستخدم العلاقة 13 بالعلاقة 4

$$\Psi_l = \varphi_l^0 + \lambda \sum_{n\neq l} \frac{\hat{w}_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n^0 \qquad \text{.......... (14)}$$

(ملاحظة) حتى يصح تطبيق العلاقة 14 يجب ان يكون l # n

التصحيح من الرتبة الثانية (للمستويات الغير منحلة)

Second order perturbation correction for non degenerate levels

من العلاقة (10) أعلاه والتي حصلنا عليها من تجميع معاملات λ^2

حيث قمنا بأعادة صياغتها كلأتي:

$$\left(\hat{w} - E_l^1\right)\Psi_l^1 = E_l^2 \varphi_l^0 \quad \ldots\ldots\ldots.\ (15)$$

بضرب المعادلة 15 من اليساربالمرافق للدالة φ_l^o وأجراء التكامل

$$\left\langle \varphi_l^0 \middle| \hat{w} - E_l^1 \middle| \Psi_l^1 \right\rangle = E_l^2 \left\langle \varphi_l^0 \middle| \varphi_l^0 \right\rangle$$

$$E_l^2 = \frac{\left\langle \varphi_l^0 \middle| \hat{w} - E_l^1 \middle| \Psi_l^1 \right\rangle}{\left\langle \varphi_l^0 \middle| \varphi_l^0 \right\rangle}$$

وأذا كانت φ_l^0 دالة معايرة , أذن المقام بالعلاقة أعلاه يساوي واحد. وبذلك نحصل على

$$E_l^2 = \left\langle \varphi_l^0 \middle| \hat{w} - E_l^1 \middle| \Psi_l^1 \right\rangle \quad \ldots\ldots\ldots.(16)$$

نرجع للعلاقة 14 والخاصة بالدالة Ψ_l^1 ,حيث سنعوض الدالة Ψ_l^1 في العلاقة 16 وبذلك نحصل على

$$E_l^2 = \left\langle \varphi_l^0 \middle| \hat{w} - E_l^1 \middle| \sum_{n \neq l} \frac{\hat{W}_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n^0 \right\rangle \quad \ldots\ldots\ldots\ldots..(17)$$

$$= \sum_{n \neq l} \frac{\hat{w}_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \langle \varphi_l^0 | \hat{w} | \varphi_n^0 \rangle - E_l^1 \sum_{n \neq l} \frac{\hat{w}_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \langle \varphi_l^0 | \phi_n^0 \rangle$$

$$= \sum_{n \neq l} \frac{\hat{W}_{nl}}{E_l^o - E_n^o} \hat{W}_{\ln} - E_l^1 \sum_{n \neq l} \frac{\hat{W}_{nl}}{E_l^o - E_n^o} \langle \varphi_l^o | \varphi_n^o \rangle$$

*** ولقيم $n \neq l$ يصبح الحد الثاني من المعادلة مساويا الى الصفر

$$E_l^2 = \sum_{n \neq l} \frac{\hat{w}_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \hat{w}_{\ln} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(18)$$

*** وكذلك فأن $\hat{W}_{\ln}$ هو المرافق العقدي ل $\hat{W}_{nl}$.أذن

$$E_l^2 = \sum_{n \neq l} \frac{|\hat{w}_{nl}|^2}{E_l^0 - E_n^0} \qquad \ldots\ldots\ldots\ (19)$$

العلاقة 19 تعطي التصحيح من الرتبة الثانية للطاقة لنظرية الاضطراب

أذن الطاقة الكلية E_l مصححة من الرتبة الثانية (العلاقة 5) تصبح

$$E_l \approx E_l^0 + \lambda \hat{w}_{ll} + \lambda^2 \sum_{n \neq l} \frac{|\hat{w}_{nl}|^2}{E_l^0 - E_n^0} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (20)$$

حيث تمثل E_l^o قيمة الطاقة للمستوي l للحالة الأرضية

$\hat{W}_{ll}$ التصحيح من الرتبة الأولى للطاقة

$\sum_{n \neq l} \frac{\hat{W}^2{}_{nl}}{E_l^o - E_n^o}$ التصحيح من الرتبة الثانية للطاقة

مثال:- جد التصحيح بالطاقة E_l من الرتبة الثانية عند وضع المتذبذب التوافقي في مجال كهربائي منتظم شدته ε

وأتجاهه بأتجاه محور x. علما بأن الدوال الذاتية للمتذبذب التوافقي هي $\psi_n = A_n e^{-\zeta^2/2} H_n(\zeta)$

(Solution)

بما أن التصحيح من الرتبة الثانية للطاقة معرف بالعلاقة (20) حيث

$$E_l \approx E_l^0 + \lambda \hat{w}_{ll} + \lambda^2 \sum_{n \neq l} \frac{|\hat{w}_{nl}|^2}{E_l^0 - E_n^0}$$

أذن سنقوم أولا بحساب الحد

$$\sum_{n \neq l} \frac{\hat{W}^2{}_{nl}}{E_l^o - E_n^o}$$

نحتاج حساب التكامل

$$W_{nl} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* W_{nl} \psi_l dx$$

$$= -\varepsilon e \frac{A_n A_l}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} H_l \;\; e^{-\zeta^2/2} \zeta \; H_n \;\; e^{-\zeta^2/2} dx$$

$$= -\varepsilon\, e \frac{A_n A_l}{\sqrt{\alpha}} \quad [\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n+1}\; H_l \;\; e^{-\zeta^2} dx \; + n \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n-1}\; H_l \;\; e^{-\zeta^2} dx \;\;] \qquad ....(22)$$

(أولا)- نحسب الجزء الاول من التكامل وكالاتي

$$A_n A_l \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n+1}\; H_l \;\; e^{-\zeta^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A_{n+1} A_l \; H_{n+1}\; H_l \;\; e^{-\zeta^2} dx$$

نستخدم هنا خواص المعايرة حيث أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A_n A_l \; H_{n+1}\; H_l \;\; e^{-\zeta^2} dx \; = \delta_{n+1,l} = 1$$

وعندها يأخذ التكامل الأول الصيغة الاتية

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n+1}\ H_l\ \ \mathrm{e}^{-\zeta^2} dx = \frac{1}{A_{n+1}A_l}\delta_{n+1,l} \qquad ....(23)$$

(ثانيا)- نحسب التكامل الثاني من العلاقة (22)

$$A_n A_l \int_{-\infty}^{+\infty} n\ \ H_{n-1}\ H_l\ \ \mathrm{e}^{-\zeta^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A_{n-1}A_l\ H_{n-1}\ H_l\ \ \mathrm{e}^{-\zeta^2} dx$$

وبأستخدام خواص المعايرة مرة أخرى يصبح

$$H_{n-1}\ H_l\ \ \mathrm{e}^{-\zeta^2} dx = \delta_{n-1,l}$$

وعندها يأخذ التكامل الثاني الصيغة الاتية

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n-1}\ H_l\ \ \mathrm{e}^{-\zeta^2} dx = \frac{1}{A_{n-1}A_l}\delta_{n-1,l} \qquad ....(24)$$

بتعويض 23 و 24 بالعلاقة 22 نحصل

$$W_{n+1,l} = -\varepsilon\, e \frac{A_n A_l}{2\sqrt{\alpha}}\ \frac{1}{\mathrm{A_{n+1}}A_l}\delta_{n+1,l} \qquad \begin{aligned} &= 0 \text{ if } \mathrm{n}+1 \neq \mathrm{l} \\ &= 1 \text{ if } \mathrm{n} = \mathrm{l}-1 \end{aligned}$$

$$W_{n-1,l} = -\varepsilon\, e \frac{A_n A_l}{2\sqrt{\alpha}}\ \frac{1}{\mathrm{A_{n-1}}A_l}\delta_{n-1,l} \qquad \begin{aligned} &= 0 \text{ if } \mathrm{n}-1 \neq \mathrm{l} \\ &= 1 \text{ if } \mathrm{n} = \mathrm{l}+1 \end{aligned}$$

$$W_{l-1,l} = -\varepsilon\, e \frac{A_{l-1}A_l}{2\sqrt{\alpha}}\ \frac{1}{A^2{}_l} = \frac{-\varepsilon\, e}{2\sqrt{\alpha}}\ \left[\frac{2^l\ \mathrm{l}!}{2^{\mathrm{l}-1}\ (\mathrm{l}-1)!}\right]^{1/2} = -e\varepsilon\,[\frac{l}{2\alpha}]^{1/2}$$

و

$$W_{l+1,l} = -\varepsilon\, e \frac{A_{l+1} A_l (l+1)}{\sqrt{\alpha}} \;\; \frac{1}{A^2{}_l} = \frac{-\varepsilon\, e}{\sqrt{\alpha}} \;\; \left[\frac{2^l\ (\mathrm{l}+)!}{2^{\mathrm{l}-1}\ \mathrm{l}!}\right]^{1l2} = -e\varepsilon[\frac{l+1}{2\alpha}]^{1l2}$$

وبذلك من جمع الحدين الاخيرين نحصل

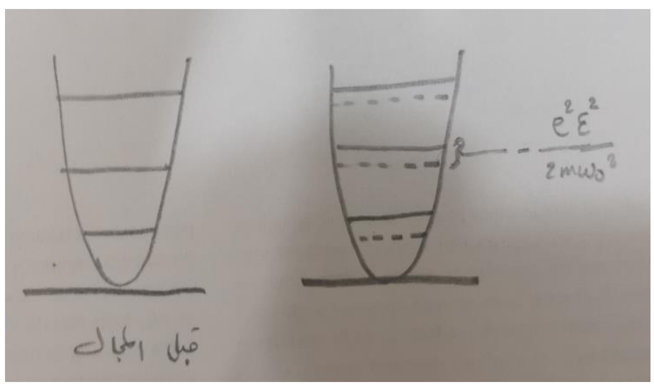
$$= \frac{e^2\varepsilon^2}{2\alpha}\left[\frac{l}{\hbar\ \mathrm{w_o}} - \frac{l+1}{\hbar\ \mathrm{w_o}}\right] = \frac{-e^2\varepsilon^2}{2\alpha\hbar\ \mathrm{w_o}} \;\; == \frac{-e^2\varepsilon^2}{2m\,\mathrm{w}^2{}_\mathrm{o}}$$

وبهذا يكون مستوي الطاقة بالعلاقة (20)

$$E_l = E_l^o + 0 - \frac{-e^2\varepsilon^2}{2m\,\mathrm{w}^2{}_\mathrm{o}}$$

الأشارة سالبة تعني أن تأثير المجال الكهربائي هو التأثير على مستويات الطاقة وجعلها تنخفض الى الأسفل بمقدار

$$\frac{-e^2\varepsilon^2}{2m\,\mathrm{w}^2{}_\mathrm{o}}$$



محاضرة رقم 13

الميكانيك الكمي

((الفصل الثالث))

Degenerate perturbation theory

نظرية التصحيح الغير معتمدة على الزمن للمستويات المنحلة

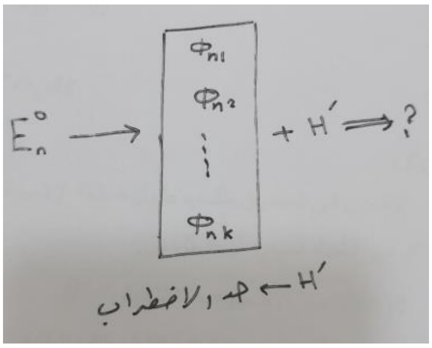
المقصود بالمستويات المنحلة

"ان هناك اكثر من دالة موجية واحدة لكل مستوي طاقة واحد"

على سبيل المثال مستوي الطاقة $n = 2$ في الذرة توجد فية اوربتالين هي اوربتال S فيه دالتين لكل حالة برم واربتال P يحتوي على ست حالات لكل واحدة دالة موجية وبذلك يكون عدد الدوال الموجية ثمانية في مستوي الطاقة $n = 2$ وهذا هو المقصود بالانحلال

أذا كانت الحالات الغير مضطربة منحلة....أي أنه أذا أشتركت حالتان (أو أكثر) φ_1^0 و φ_2^0 بنفس الطاقة E_l^o .

وبذلك فأن المعادلات في المحاضرات السابقة ..التي تحتوي في مقامها على الحد $(E_l^o - E_n^o)$ سيصبح هذا الحد مساويا الى الصفروبذلك فأن نظرية الاضطراب في هذه الحالة تصبح غير ذات فائدة لذلك يجب التفكير بطريقة أخرى



Perturbation theory when two levels are close

نظرية الاضطراب في حالة مستويين متقاربين

بالرجوع للعلاقتين(14) و (20) نلاحظ أن التصحيح بالدالة الموجية والطاقة للمستوي l سيصبح كبيرا جدا بسبب اقتراب المقام من الصفر $(E_l^o - E_n^o)=0$ وبذلك لا يمكن استخدام هاتين العلاقتين.

لذلك...نفرض لدينا نظام يمتلك دالتين موجبتين φ_b^o و φ_a^o والتي تكون منحلة من نفس مستوي الطاقة E^o
أذن بأمكاننا تمثيل الحالة بكتابة الدالة الكلية Ψ على أنها جمع خطي لمجموع الدوال وكما يلي :

$$\psi^o = \alpha\psi_a^o + \beta\psi_b^o \qquad \text{.................(25)}$$

$$H^o\psi_a^o = \mathrm{E}^o\ \psi_a^o \quad \text{و} \quad H^o\psi_b^o = \mathrm{E}^o\ \psi_b^o \qquad \text{................(26)}$$

$$\left\langle \psi_a^o \middle| \psi_a^o \right\rangle = \left\langle \psi_b^o \middle| \psi_b^o \right\rangle = 1$$

$$\text{...............................(27)}$$

$$\left\langle \psi_a^o \middle| \psi_b^o \right\rangle = 0$$

الدالة بالعلاقة (25) هي أيضا دالة ذاتية للهاملتونين H^o وبقيمة ذاتية E^o
ومن المحاضرة السابقة وعند أخذ $\lambda = 1$ فأن

$$H = H^O + H'. \qquad \text{...............(28)}$$

وكذلك

$$E = E^O + E^1 + \text{.........} \quad \text{............(29)}$$

$$\psi = \psi^O + \psi^1 + \text{.........}\text{.................(30)}$$

عوض 29 و 30 بالعلاقة 28 نحصل

$$H = H^O + H'$$

$$(H^O + H')(\psi^o + \psi^1) = (E^o + E^1)(\psi^o + \psi^1)$$

$$H^O\psi^o + H^O\psi^1 + H'\psi^o + H'\psi^1 = E^o\psi^o + E^o\psi^1 + E^1\psi^o + E^1\psi^1$$

وبتبسيط هذه المعادلة نحصل

$$H^O\psi^1 + H'\psi^o = E^o\psi^1 + E^1\psi^o \qquad \text{.....................(31)}$$

بضرب العلاقة (31) من اليسار ψ_a^o ثم أجراء عملية التكامل نحصل

$$\left\langle \psi_a^o \middle| H^o\psi^1 \right\rangle + \left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi^o \right\rangle = E^o\left\langle \psi_a^o \middle| \psi^1 \right\rangle + E^1\left\langle \psi_a^o \middle| \psi^o \right\rangle$$

الحد الاول من الطرف الايمن يساوي الحد الاول من الطرف الايسر...... لذلك يتبقى الحدود التالية"

$$\left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi^o \right\rangle = E^1\left\langle \psi_a^o \middle| \psi^o \right\rangle \qquad \text{...............(32)}$$

الان نقوم بتعويض العلاقة (1) بالعلاقة (32) لنحصل على

$$\alpha\left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi_a^o \right\rangle + \beta\left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi_b^o \right\rangle = \alpha E^1\left\langle \psi_a^o \middle| \psi_a{}^o \right\rangle + \beta\left\langle \psi_a^o \middle| \psi_b^o \right\rangle$$

$$\left\langle \psi_a^o \middle| \psi_a{}^o \right\rangle = 1$$

$$\left\langle \psi_a^o \middle| \psi_b^o \right\rangle = 0$$

$$\alpha E^1 = \underbrace{\alpha\left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi_a^o \right\rangle}_{\downarrow\ \alpha \mathrm{W_{aa}}} + \underbrace{\beta\left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi_b^o \right\rangle}_{\downarrow\ \beta \mathrm{W_{ab}}} \qquad \text{.................(33)}$$

$$\mathrm{W_{aa}} = \left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi_a^o \right\rangle$$

$$\mathrm{W_{ab}} = \left\langle \psi_a^o \middle| H^1\psi_b^o \right\rangle \qquad \text{.............................(35)}$$

وبذلك تصبح العلاقة (33)

$$\alpha E^1 = \alpha \mathrm{W_{aa}} + \beta \mathrm{W_{ab}} \qquad \text{...................(36)}$$

بضرب العلاقة (31) من اليسار ψ_b^o ثم أجراء عملية التكامل نحصل

$$\beta E^1 = \alpha \mathrm{W_{ba}} + \beta \mathrm{W_{bb}} \qquad \text{...................(37)}$$

الان سنحل المعادلتين 36 و 37 بالنسبة ل E^1 نحصل

$$\alpha E^1 = \alpha W_{ab} + \beta W_{ab} \Rightarrow \boxed{\beta W_{ab}} = \alpha E^1 - \alpha W_{aa}$$

$$(\beta E^1 = \alpha W_{ba} + \beta W_{bb}) \times W_{ab}$$

$$E^1 \boxed{\beta W_{ab}} = \alpha W_{ab} W_{ba} + \boxed{\beta W_{ab}} W_{bb}$$

$$E^1(\alpha E^1 - \alpha W_{aa}) = \alpha W_{ab}W_{ba} + W_{ab}(\alpha E^1 - \alpha W_{aa})$$

$$\alpha E^1(E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb}) = \alpha W_{ab}W_{ba}$$

$$\alpha \neq 0$$

أذن $$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa}W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0$$

$$E_{\pm}^{1} = \frac{1}{2}[W_{aa} + W_{ab} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{ab})^2 + 4|W_{ab}|^2}$$

ملاحظة 1 أذا فرضنا أن $E_1^1 = E_1^2$ ويقابلان نفس الدالة الموجية فالانحلال يسمى جزئيا

ملاحظة 2 أذا كانت كل قيم E_1^1 مختلفة عن بعضها , أي أن كل من E_1^4 و E_1^3 و E_1^2 و E_1^1

تقابل دالة موجية ∴ الانحلال يزول نهائيا

ملاحظة 3 أذا كانت $E_1^1 \rightarrow \Psi_1$

$E_1^2 \rightarrow \Psi_1$

.

الخ

أي أن الجذور متساوية وتقابل نفس الدالة فأن الانحلال لا يزول

****

H.W1 : أستخدم نفس الطريقة السابقة التي وجدنا بها العلاقة (33) أشتق العلاقة 37

محاضرة رقم (11)
الميكانيك الكمي
أ.د.هيفاء عبدالنبي جاسم

الفصل الرابع

The Variational Method طريقة التغاير

1- تطبق هذه النظرية في حالة عدم صلاحية نظرية التصحيح.....أي عندما يكون الخطأ كبير جدا

2 - طريقة متخصصة لحساب قيمة تقريبية لطاقة المستوي الأرضي لتلك الأنظمة التي لا يمكن حلها بالطريقة التحليلية

3 - أيضا بأستخدامها نستطيع حساب قيم تقريبية (بدقة أقل) للمستويات المثارة $E_1 , E_2, \ldots$

أذا أخذنا نظام , المؤثر الهاملتوني الغير معتمد على الزمن لهذا النظام = $\hat{H}$,
وللنظام عدد لانهائي من مستويات الطاقة, كل مستوى طاقة E_n تقابلها دالة موجية Ψ_n وتحقق العلاقة التالية

$$\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

نضرب طرفي المعادلة (1) × Ψ_n^* ونكامل

$$\int \Psi_n^* \hat{H} \Psi_n d\tau = \int \Psi_n^* E_n \Psi_n d\tau$$

$$E_n = \frac{\int \Psi_n^* \hat{H} \Psi_n d\tau}{\int \Psi_n^* \Psi_n d\tau} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

بما أن الدالة Ψ_n دالة معايرة أذن $\int \Psi_n^* \Psi_n d\tau = 1$

من المعادلة (2) نحصل

$$E_n = \int \Psi_n^* \hat{H} \Psi_n d\tau \quad \ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

ملاحظة: طاقة المستوي الأرضي للنظام هي E_o وتحسب من العلاقة (3)

$$E_o = \int \Psi_o^* \hat{H} \Psi_o d\tau \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(4)$$

هنا نختار Ψ_o دالة مقاربة لحالة النظام حتى تكون E_o صحيحة

****

نختار الدالة $\emptyset$ دالة معايرة وتعتمد على أحداثيات النظام , و هنا ينص مبدأ التغاير على أن

$$E \;=\int \emptyset^{*}\,\widehat{H}\,\emptyset\;\; d\tau\;\geq E_{o}$$

ويمكن كتابة الدالة $\emptyset$ بدلالةالدوال المتعامدة Ψ_n ;

$$\ldots\ldots\ldots\ldots(6)\emptyset=\sum_{n=1}a_n\Psi_n$$

a_n:ثوابت

نضرب المعادلة (6) في $\emptyset^{*}$ ونكامل

$$\int \emptyset^{*}\;\emptyset\;\;d\tau=\int \emptyset^{*}\;\sum_{n}a_n\Psi_n d\tau$$

$$1\;=\int\sum_{n}a_n{}^{*}\Psi_n{}^{*}d\tau\;\sum_{n}a_n\Psi_n d\tau$$

$$1\;=\sum_{n}a_n\;a_n{}^{*}\int\;\Psi_n^{*}\Psi_n d\tau$$

التكامل يساوي واحد أذن

$$\sum_{n}a_n\;a_n{}^{*}=1$$

$$E\;=\int\sum_n a_n{}^{*}\Psi_n{}^{*}\widehat{H}\;\;\sum_n a_n\Psi_n d\tau\qquad\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(7)\because$$

وكذلك $\quad \widehat{H}\Psi_n=E_n\,\Psi_n$

أذن ومن العلاقة (7) نحصل

$$E\;=\sum_{n}a_n{}^{*}\,a_n\int\sum_{n}\Psi_n{}^{*}\,E_n\,\Psi_n d\tau$$

$$E\;=\sum_{n}a_n{}^{*}\,a_n E_n\int\;\Psi_n\;\;\Psi_n{}^{*}d\tau$$

$$\therefore\quad E\;=\sum_n a_n{}^{*}\,a_n\;E_n\qquad\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

$$E-E_o\;=\sum_n a_n{}^{*}\,a_n\;E_n\;-E_o$$

$$\therefore\qquad\ldots\ldots\ldots(9)\qquad E-E_o\;=\sum_n a_n{}^{*}\,a_n(\;E_n\;-E_o)$$

$$E-E_o\;=\sum_n|a_n|^2\;(\;E_n\;-E_o)$$

الكمية $(E_n - E_o)$ كمية موجبة ويمكن ان تساوي صفر ولا يمكن أن تكون سالبة (لأن E_oهو أدنى مستوي طاقة) و $|a_n|^2$ كمية موجبة

∴ المقدار $(E_n - E_o)$ $\sum_n |a_n|^2$ يجب أن يكون موجب أو مساوي صفر و هذه أقل قيمة.

Then $E \geq E_o$

الدالة $\emptyset$ تدعى دالة تجريبية ويجب أن تكون قريبة من الدالة الموجية للمستوي الحقيقي ,وتعتمد على عدة عوامل تغايرية حيث أن التكامل بالعلاقة (2) يحسب هذه المعاملات بحيث نختار قيم هذه المعاملات التي تعطي أقل قيمة للطاقة بالعلاقة (2).

ملاحظة:

الفائدة من هذه المعاملات هو أكتساب الدالة مرونة أعلى في التغيير وكلما زادت المرونة زادت الدقة في الحل . مثلا أذا كانت الدالة التجريبية $\emptyset$ تعتمد على العوامل التغايرية $(\alpha, \beta, \gamma, \dots\dots)$ يعني

$\emptyset(\alpha, \beta, \gamma, \dots\dots)$ يعني علينا حساب أدنى قيمة للتكامل حيث

$I_{min} \approx E_o$ من حساب $\frac{\partial I}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial I}{\partial \beta} = 0, \quad \frac{\partial I}{\partial \gamma} = 0$

****

أمثلة محلولة تخص طريقة التغاير

....

مثال 1

أحسب طاقة المستوى الارضي لذرة الهيدروجين بفرض الدالة التجريبية $\phi = e^{-\alpha r}$

الحل

$$\because \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r}\right.$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] - \frac{e^2}{r}$$

$\because$ المستوى الارضي لذرة الهيدروجين $n = 1$ و $l = 0$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2}\right] - \frac{e^2}{r}$$

(1)

$$\int \phi^* \phi \, d\tau = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} e^{-2\alpha r} r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, dr$$

$$= \underbrace{\int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta}_{=2} \; \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi} \int_0^{\infty} r^2 e^{-2\alpha r} dr$$

$$= 4\pi \int r^2 e^{-2\alpha r} dr = 4\pi \frac{2!}{(2\alpha)^{2+1}}$$

حيث استخدمنا التكامل الآتي

$$\int x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{(\alpha)^{n+1}}$$

(٢) نجد $\int \phi^* H \phi \, d\tau$

$$\frac{d\phi}{dr} = -\alpha e^{-\alpha r} \Longrightarrow \frac{d^2\phi}{dr^2} = \alpha^2 e^{-\alpha r}$$

$$\cdot \; \hat{H}\phi = \left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{-2\alpha}{r} + \alpha^2\right] - \frac{e^2}{r}\right] e^{-\alpha r}$$

$$\therefore \int \phi^* H \phi \, d\tau = 4\pi \int_0^\infty e^{-\alpha r} \left(\hat{H} e^{-\alpha r}\right) r^2 \, dr$$

$$= 4\pi \left[\frac{\hbar^2}{2m} 2\alpha \int_0^\infty r e^{-2\alpha r} dr - \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr - e^2 \int_0^\infty r e^{-2\alpha r} dr \right.$$

$$= 4\pi \left[\frac{\hbar^2 \alpha}{2m} \frac{1!}{(2\alpha)^{1+1}} - \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} \frac{2!}{(2\alpha)^{2+1}} - e^2 \frac{1!}{(2\alpha)^{1+1}} \right]$$

$$= \frac{2\pi \hbar^2}{m} \left[\frac{1}{4\alpha} - \frac{1}{2\alpha} \right] - 4\pi e^2 \frac{1}{4\alpha^2}$$

and $\Longrightarrow$ $$E = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\alpha^3}{\pi} \left[\frac{\pi \hbar^2}{2m\alpha} - \frac{\pi e^2}{\alpha^2} \right]$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 - e^2 \alpha$$

نشتق E بالنسبة الى α .

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2}{m} \alpha - e^2 = 0$$

$$\alpha = \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{1}{a_0}$$

حيث $\frac{me^2}{\hbar^2} = a_0$

$$\therefore E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 e^4}{\hbar^4} - \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{1}{2}\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right)$$

$E = 1$ Ryd بالوحدات الذرية

مثال ٢ أحسب طاقة المستوى الأرضي للمتذبذب التوافقي بفرض الدالة التجريبية

$$\phi = e^{-\gamma x^2}$$

الحل

الهاملتون للمتذبذب التوافقي

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx$$

نحسب $$E = \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi \, dx}{\int \phi^* \phi \, dx}$$

$$\Rightarrow \frac{d\phi}{dx} = -2\gamma x \, e^{-\gamma x^2} \quad , \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} = 4\gamma^2 x^2 e^{-\gamma x^2} - 2\gamma e^{-\gamma x^2}$$

$$\Rightarrow \hat{H}\phi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}4\gamma^2 + \frac{1}{2}k\right]x^2 e^{-\gamma x^2} + \frac{2\gamma\hbar^2}{2m} e^{-\gamma x^2}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \hat{H} \phi \, dx = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}4\gamma^2 + \frac{1}{2}k\right]\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\gamma x^2} + \frac{2\gamma\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\gamma x^2} dx$$

$$\because \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\gamma x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\gamma}}$$

$$\because \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\gamma x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4\gamma\sqrt{2\gamma}}$$

$$\therefore \int \phi^* H \phi \, dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\gamma}}\left[\left(-\frac{2\hbar^2\gamma^2}{m} + \frac{1}{2}k\right)\frac{1}{4\gamma} + \frac{2\gamma\hbar^2}{2m}\right] \quad \text{---} *$$

$$و \int \phi^* \phi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\gamma x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\gamma}} \quad \text{---} **$$

$$\therefore\ E = \left[\left(\frac{k}{2} - \frac{2\hbar^2\gamma^2}{m}\right)\cdot\frac{1}{4\gamma} + \frac{\gamma\hbar^2}{m}\right]$$

$$E = \frac{k}{8\gamma} + \frac{\hbar^2\gamma}{2m}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial E}{\partial \gamma} = 0 = \frac{-k}{8\gamma^2} + \frac{\hbar^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \gamma^2 = \frac{km}{4\hbar^2} \Longrightarrow \gamma = \pm\sqrt{\frac{km}{2\hbar}}$$

$$\because\ \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \Longrightarrow \gamma = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

نعوض γ في علاقة الطاقة E

$$E = \frac{k}{8}\left(\frac{2\hbar}{m\omega}\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)$$

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

H.W

أحسب بطريقة التغاير طاقة المستوى الأرضي لذرة الهيدروجين بإستخدام الدالة الموجية $\phi = e^{-\beta r^2}$.