الباب الرابع

تطبيقات بسيطة على معادلة شرودنجر

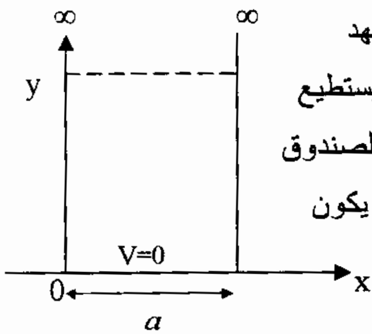
تطبيقات معادلة شرودنجر على مسائل الجهد
والأنظمة الذرية البسيطة

تطبيقات بسيطة على معادلة شرودنجر

في هذا الباب سوف ندرس بعض التطبيقات البسيطة على معادلة شرودنجر ، بما في ذلك مسائل الجهد والأنظمة الذرية البسيطة (في بعد واحد وفي ثلاثة أبعاد) .

التطبيق الأول: مسائل الجهد (Potential Problems)

مثال (١) : ــ حركة جسيم في صندوق (particle in a box)



في هذا المثال ندرس حركة جسيم في مجال جهد محدود بحائطين ارتفاعهما لا نهائي بحيث لا يستطيع الجسيم الهروب منهما ، ويكون الجهد داخل الصندوق مساويا للصفر أي أن الجسيم داخل الصندوق يكون جسيماً حراً (Free particle)

ويكتب الجهد عادة بالصورة :

$$V = 0 \qquad (0 < x < a)$$
$$V = \infty \qquad (x \le 0 \ , \ x \ge a)$$

حيث a اتساع الصندوق

الحركة تتم داخل الصندوق في بعد واحد : فتكون معادلة شرودنجر

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

وبأخذ $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} E$

$$\therefore \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0$$

وهي معادلة موجيه (wave equation) ، لها الحل العام :

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx \_\_\_\_\_\_ (1)$$

لإيجاد A,B : من الشروط الحدية (Boundary conditions) على الدالة الموجية.

عند حوائط الصندوق : لا توجد جسيمات متحركة ، فلا توجد دالة موجيه

$$\psi(x=0)=0 \qquad (2)$$

$$\psi(x=a)=0 \qquad (3)$$

بتطبيق الشرط الأول على المعادلة (1) :-

$$0=A\underbrace{\sin 0}_{0}+B\underbrace{\cos 0}_{1}$$

$$\therefore B=0 \quad \therefore \psi=A\sin kx \qquad (4)$$

بتطبيق الشرط الثاني على المعادلة (1) :

$$0=\underbrace{A}\underbrace{\sin ka} \qquad \therefore \sin ka=0$$

ولكن $\sin n\pi=0$ (حيث $n=1,2,........$)

$$\therefore ka=n\pi$$

$$\therefore k=\frac{n\pi}{a} \qquad (5)$$

وتصبح الدالة الموجيه :

$$\psi=A\sin\frac{n\pi}{a}x$$

عندما $n=1 \rightarrow \psi_1=A\sin\frac{\pi}{a}x$

عندما $n=2 \rightarrow \psi_2=A\sin\frac{2\pi}{a}x$ ، ...... وهكذا

$$\therefore \psi_n=A\sin\frac{n\pi}{a}x$$

<u>لإيجاد الثابت A :</u> نعاير الدالة ψ_n وذلك بتطبيق شرط المعايرة

$$1=\int_0^a|\psi|^2dx=\int_0^a\left|A\sin\frac{n\pi}{a}x\right|^2dx=A^2\int_0^a A\sin^2\frac{n\pi}{a}xdx$$

$$=\frac{1}{2}A^2\int_0^a\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)xdx$$

$$=\frac{1}{2}A^2\left[x-\left(\frac{a}{2n\pi}\right)\sin\frac{2n\pi}{a}x\right]_0^a=\frac{1}{2}A^2[a-0]=\frac{1}{2}A^2$$

$$\therefore A^2=\frac{2}{a} \quad \therefore A=\sqrt{\frac{2}{a}} \qquad \therefore \psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

ولإيجاد الطاقة الكلية:

حيث أن : $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ وحيث أن : $k=\frac{n\pi}{a}$

$$\therefore \frac{n^2\pi^2}{a^2}=\frac{2m}{\hbar^2}E$$

$$\therefore E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

وهي الطاقة الكلية ، ومنهما نرى أن: $E\alpha n^2$

عندما $n=1$:

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

عندما $n=2$:

$$E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$ ، .... وهكذا

$$\therefore E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

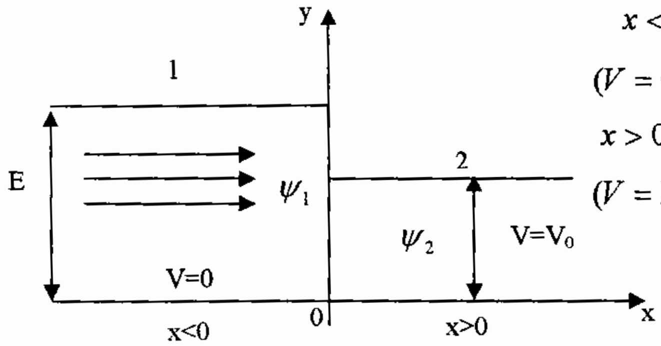
ويقال في هذه الحالة أن الطاقة لها قيم مكماه أو مكممة (quantized) ، نحصل عليها باعطاء n قيمها المختلفة .

ولذلك يسمى العدد n بالعدد الكمي (quantum number) . .

مثال (٢) :- قفزة الجهد (potential jump) أو جهد الخطوة (step potential)

يقصد بهذا المثال حركة جسيم في مجال جهد معين في منطقة ما ثم انتقل الجسيم إلى منطقة أخرى مع حدوث تغيير فجائي (أو قفزة) في الجهد، ولحل هذا المثال :

نفرض لدينا منطقتين :



منطقة (1) : حيث $x<0$

$(V=0)$

منطقة (2) : حيث : $x>0$

$(V=V_0)$

<u>وتكون لدينا حالتان :</u>

<u>حالة (١):</u> $E>V_0$ (طاقة الجسيمات أكبر من جهد الحاجز) .

<u>من الناحية الكلاسيكية :-</u> حيث أن $E>V_0$ فإن كل الجسيمات بالطاقة E سوف تخترق المجال ، ولا توجد أي جسيمات مرتدة .

فإذا كان :

N_i عدد الجسيمات الساقطة على حاجز الجهد لوحدة المساحات في وحدة الزمن .

N_t عدد الجسيمات النافذة (المخترقة) لحاجر الجهد لوحدة المساحات في وحدة الزمن .

N_r عدد الجسيمات المنعكسة (المرتدة) عن حاجز الجهد لوحدة المساحات في وحدة الزمن.

[المنعكسة reflected ، والنافذة transmitted ، والساقطة incident]

معني التفسير الكلاسيكي للمسألة :

$$N_i=N_t \quad , \; N_r=0$$

<u>من ناحية ميكانيكا الكم :</u>

باعتبار أن الجسيمات تتحرك وتصاحبها موجات ، وأن حاجز الجهد يشبه حائل شبه منفذ ، فإن جزءاً من الجسيمات الساقطة على الحاجز ينفذ من الحاجز والجزء الآخر ينعكس ، أي أن :

في المنطقة (١) : توجد

جسيمات ساقطة →

← جسيمات منعكسة

في المنقطة (٢) : توجد

جسيمات نافذة →

معادلة شرودنجر :

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

تأخذ الصورتين الآتيتين :

(١) في المنطقة (١) :

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}+\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}\psi_1=0$$

بأخذ $\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ فإن :

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}+\alpha^2\psi_1=0 \qquad \_\_\_\_\_\_(1)$$

(٢) في المنطقة (٢) :

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}\psi_1=0$$

بأخذ $\beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)$ فإن :

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+\beta^2\psi_2=0 \qquad \_\_\_\_\_\_(2)$$

حيث ψ_1,ψ_2 هما الدالتان الموجبتان في المنطقتين (٢) ، (١)

الحل العام للمعادلتين (2) ،(1) :

$\psi_1=Ae^{i\alpha x}+Be^{-i\alpha x}$ (منقطة (١)) _____(3)

$\psi_2=Ce^{i\beta x}$ (منطقة (٢)) _____(4)

حيث A,B,C تمثل سعات الموجات الساقطة ، المنعكسة ، النافذة على الترتيب ، ويمكن إيجاد B,C بدلالة A كالآتي :

نطبق الشروط الحدية [الدالة الموجية ψ ومشتقاتها ψ' تكون متصلة عند الحدود الفاصلة]

$$\psi_1(x=0)=\psi_2(x=0)\rightarrow A+B=C \qquad \_\_\_\_(5)$$

$$\psi_1'(x=0)=\psi_2'(x=0)\rightarrow i\alpha A-i\alpha B=i\beta C \qquad \_\_\_\_(6)$$

بحل (6) ، (5) :

من (5) : $A+B=C$

من (6) : $A-B=\dfrac{\beta}{\alpha}C$

بالجمع :

$$C=\frac{2\alpha}{\alpha+\beta}A \leftarrow 2A=C\frac{\alpha+\beta}{\alpha} \leftarrow 2A=C\left(1+\frac{\beta}{\alpha}\right)$$

بالتعويض في (5) :

$$B=C-A=\frac{2\alpha}{\alpha+\beta}A-A$$

$$=A\left(\frac{2\alpha}{\alpha+\beta}-1\right)=A\left(\frac{2\alpha-\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)=\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}A$$

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

بالتعويض في (4) ، (3) عن قيمتي B,C :

$$\psi_1=A\left[e^{i\alpha x}+\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}e^{-i\alpha x}\right]$$

$$\psi_2=A\left[\frac{2\alpha}{\alpha+\beta}e^{i\beta x}\right]$$

<u>إثبات قانون ثبوت الكتلة :-</u>

المطلوب إثبات أن : عدد الجسيمات الساقطة = عدد الجسيمات المنعكسة + عدد الجسيمات النافذة

أي إثبات أن : $N_i = N_r + N_t$

نفرض أن v_i هي سرعة الجسيم في المنطقة (1) [في الجسيمات الساقطة]

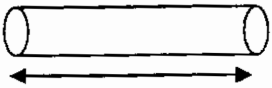
v_t هي سرعة الجسيم في المنطقة (2) [في الجسيمات النافذة]

$$\therefore \frac{1}{2}mv_i^2 = E \therefore v_i^2 = \frac{2E}{m} = \frac{2}{m}\frac{\alpha^2\hbar^2}{2m} = \frac{\alpha^2\hbar^2}{m^2} \therefore v_i = \frac{\alpha\hbar}{m}$$

$$\frac{1}{2}mv_t^2 = E - V_0 \therefore v_t^2 = \frac{2(E-V_0)}{m} = \frac{2}{m}\frac{\beta^2\hbar^2}{2m} = \frac{\beta^2\hbar^2}{m^2} \therefore v_t = \frac{\beta\hbar}{m}$$

<u>أيضاً</u> : حيث أن الجسيمات المنعكسة تسير في نفس الوسط (الوسط(1)) فإن سرعة الجسيمات المنعكسة :

$$v_r = v_i = \frac{\alpha\hbar}{m}$$



$$v = \frac{x}{t} = \frac{x}{1} = x$$

وبأخذ اسطوانة مساحة مقطعها الوحدة وطولها يساوي سرعة الجسيم (v) فيكون عدد الجسيمات التي تعبر وحدة المساحات في وحدة الزمن هو :

$$N = |\psi|^2 d\tau = |\psi|^2 \cdot 1 \cdot v = |\psi|^2 \cdot v = \psi\psi^* \cdot v$$

حيث $d\tau$ = حجم الاسطوانة

بتطبيق هذه العلاقة على N_i, N_r, N_t :

$$N_i = \psi_i^*\psi_i \cdot v_i = (Ae^{i\alpha x})(A^*e^{-i\alpha x}) \cdot v_i$$

$$= AA^* \cdot v_i = |A|^2 \cdot \frac{\alpha\hbar}{m} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_}(7)$$

$$N_r = \psi_r^* \psi_r \cdot v_r = (Be^{-i\alpha x})(B^* e^{-i\alpha x}) \cdot v_r$$

$$= BB^* \cdot v_r = |B|^2 \cdot \frac{\alpha \hbar}{m} = |A|^2 \cdot \frac{\alpha \hbar}{m} \left(\frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta} \right)^2 \quad \text{\_\_\_\_\_(8)}$$

$$N_t = \psi_t^* \psi_t \cdot v_t = (Ce^{i\beta x})(C^* e^{-i\beta x}) \cdot v_t$$

$$= CC^* \cdot v_t = |C|^2 \cdot \frac{\beta \hbar}{m} = |A|^2 \cdot \frac{\beta \hbar}{m} \left(\frac{2\alpha}{\alpha + \beta} \right)^2 \quad \text{\_\_\_\_\_(9)}$$

باستخدام (9) ، (8) ، (7) :

$$N_r + N_t = \frac{\alpha \hbar}{m} \left(\frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta} \right)^2 |A|^2 + \frac{\beta \hbar}{m} \left(\frac{2\alpha}{\alpha + \beta} \right)^2 |A|^2$$

$$= \frac{\hbar}{m} |A|^2 \frac{1}{(\alpha + \beta)^2} \left[\alpha(\alpha - \beta)^2 + \beta(2\alpha)^2 \right]$$

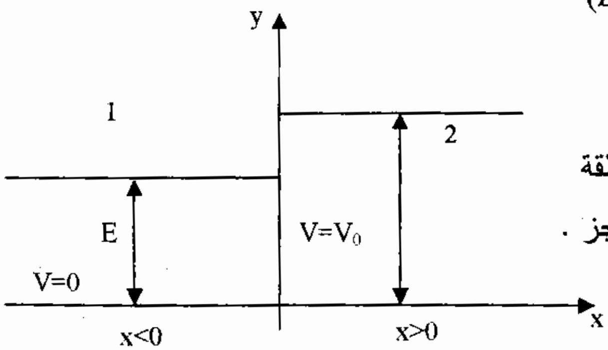
$$= \frac{\alpha \hbar}{m} |A|^2 \frac{1}{(\alpha + \beta)^2} \left[\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta + 4\alpha\beta \right]$$

$$= \frac{\alpha \hbar}{m} |A|^2 \frac{1}{(\alpha + \beta)^2} \left[\alpha^2 + 2\alpha\beta + \beta^2 \right] = \frac{\alpha \hbar}{m} |A|^2 = N_i$$

وبذلك نكون قد أثبتنا قانون ثبوت الكتلة .

<u>الحالة الثانية :-</u> $(E < V_0)$

كل الجسيمات الساقطة تنعكس ، حيث أن طاقة حركتها في المنطقة (١) أقل من جهد الحاجز .



دراسة المسألة في هذه الحالة من ناحية ميكانيكا الكم :

معادلة شرودنجر : في المنطقة (1) :

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 = 0$$

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \qquad \therefore \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \alpha^2 \psi_1 = 0 \qquad \text{\_\_\_\_(1)}$$

في المنطقة (2) :

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\, \psi_2 = 0$$

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \qquad \therefore \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0 \text{\_\_\_\_(2)}$$

الحال العام للمعادلتين (2) ، (1) :

$$\psi_1 = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \qquad \text{\_\_\_\_(3)}$$

$$\psi_2 = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \qquad \text{\_\_\_\_(4)}$$

الحــل (3) يمثل حركة موجيه (تذبذبية) في المنطقة (1) حيث A,B يمــثلان سعتي الموجتين الساقطة والمنعكسة .

الحــل (4) يمثل حركة أسيه (غير تذبذبية) في المنطقة (2) .

ولكي تكون الدالة ψ_2 محدودة (finite) يجب أن نأخذ الحل الذي يتناقص أسيا [لأن $x \to \infty, e^{\infty} \to \infty$]

$$\therefore \psi_2 = De^{-\beta x} \qquad \text{\_\_\_\_(5)}$$

لحساب الثابتان B,D بدلالة A :

نطبق الشروط الحدية [الدالة ومشتقاتها متصلة عند الحد الفاصل] :

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \to A + B = D \qquad \text{\_\_\_\_(6)}$$

$$\psi_1'(x=0) = \psi_2'(x=0) \to i\alpha A - i\alpha B = -\beta D \qquad \text{\_\_\_\_(7)}$$

بحل المعادلتين (7) ، (6) :

من (6) :

$$A+B=D$$

من (7) :

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

بالجمع :

$$\therefore 2A=D+\frac{i\beta}{\alpha}D=D\left(1+\frac{i\beta}{\alpha}\right)=D\frac{\alpha+i\beta}{\alpha}$$

$$\therefore D=\frac{2\alpha}{\alpha+i\beta}A \qquad (8)$$

وبالتعويض في (6) :

$$B=D-A=\frac{2\alpha}{\alpha+i\beta}A-A=A\left(\frac{2\alpha}{\alpha+i\beta}-1\right)=A\left(\frac{\alpha-i\beta}{\alpha+i\beta}\right)$$

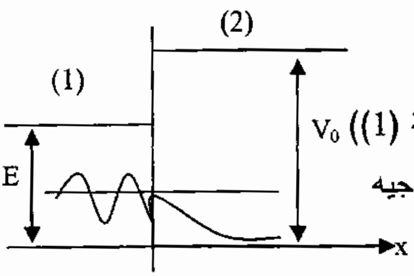
$$\therefore B=\left(\frac{\alpha-i\beta}{\alpha+i\beta}\right)A \qquad (9)$$

وتصبح الدوال الموجية ψ_1,ψ_2 بعد التعويض من (9) ، (8) في (5) ، (3) :

$$\psi_1=Ae^{i\alpha x}+\left(\frac{\alpha-i\beta}{\alpha+i\beta}\right)Ae^{-i\alpha x}=A\left[e^{i\alpha x}+\frac{\alpha-i\beta}{\alpha+i\beta}e^{-i\alpha x}\right]$$

$$\psi_2=A\left(\frac{2\alpha}{\alpha+i\beta}\right)e^{-\beta x}$$

حيث A سعة الموجة الساقطة [وتكون عادة معلومة] .



دراسة قانون ثبوت الكتلة في هذه الحالة :-

حيث أن الدالة الموجيه ψ_1 تمثل جسيمات تصاحبها موجات (في المنقطة (1)) ، وأن الدالة الموجيه ψ_2 لا تمثل حركة موجيه [التي هي أساس ميكانيكا الكم حيث كل جسيم متحرك تصاحبه موجه] ، وبذلك لا توجد موجات نافذة (في المنطقة(2)) أي أن $N_t = 0$ وبذلك يكون : $N_i = N_r$

ولإثبات ذلك رياضيا :-

$$N_i = \frac{\alpha\hbar}{m}|A|^2$$

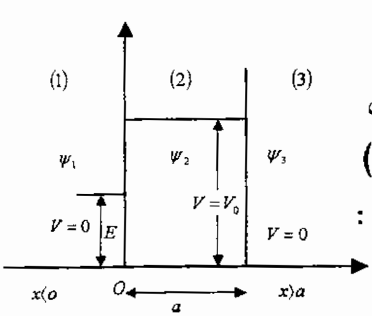
$$N_r = \frac{\alpha\hbar}{m}|B|^2 = \frac{\alpha\hbar}{m}BB^*$$

$$= \frac{\alpha\hbar}{m}\left(A\frac{\alpha - i\beta}{\alpha + i\beta}\right)\left(A^*\frac{\alpha + i\beta}{\alpha - i\beta}\right)$$

$$= \frac{\alpha\hbar}{m}AA^* = \frac{\alpha\hbar}{m}|A|^2 = N_i$$

وهذا يعني أن $N_t = 0$ أي أن كل الجسيمات الساقطة (وتصاحبها موجات) ، تنعكس ، وهو ما ينطبق مع التفسير الكلاسيكي للمسألة .

مثال (٣) : تأثير النفق [Tunnel Effect]



في هذا المثال حزمة من الجسيمات تسقط على حاجز أو حائط جهد (potential Barrier) محدد بقيمة معينة ويؤثر في مسافة a ، بحيث :

$$V = V_0 \qquad (0\langle x\langle a)$$
$$V = 0 \qquad (x\langle 0, x\rangle a)$$

نعتبر الطاقة الكلية للجسيمات $E\langle V_0$ (أقل من جهد الحاجز) .

لدينا ثلاث مناطق : منطقة (1) : $x<0$ ، الدالة الموجية ψ_1

منطقة (2) : [النفق] $(0<x<a)$ والدالة الموجية ψ_2

منطقة (3) : $(x>a)$ ، الدالة الموجية ψ_3

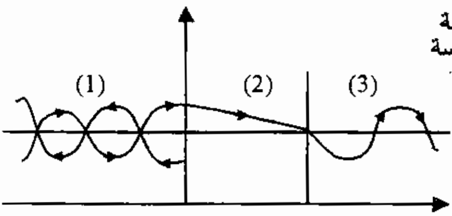
من الناحية الكلاسيكية : الجسيمات ذات الطاقة $E<V_0$ تنعكس كلها عند المستوى $x=0$.

من ناحية ميكانيكا الكم : ــ الجسيمات الساقطة ينعكس جزء منها في الإتجاه السالب لمحور x ويخترق الجزء الثاني حاجز الجهد متحركاً بصورة أسية تناقصية حتى ينفذ من الحاجز (أو النفق) مستمرا في المنطقة $x>a$ في الأتجاه الموجب لمحور x على هيئة حزمة موجية .

في المنطقة (1) : حركة موجية ⟵ ساقطة ⟶ منعكسة

في المنطقة (2) : حركة أسية

في المنطقة (3) : حركة موجية ⟶ نافذة



معادلة شرودنجر :

في المنطقة (1) :

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\alpha^2\psi_1=0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (1)$$

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

في المنطقة (2) :

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

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

في المنطقة (3) :

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2}+\alpha^2\psi_3=0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (3)$$

__الحل العام للمعادلات الثلاثة__ :

$$\psi_1 = \underset{\downarrow}{A}e^{i\alpha x} + B\underset{\downarrow}{e}^{-i\alpha x}$$

موجة منعكسة موجة ساقطة

$$\psi_2 = ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad (\text{حركة أسية})$$

$$\psi_3 = \underset{\downarrow}{F}e^{i\alpha x}$$

موجة نافذة

__لإيجاد الثوابت AB,C,D,F__: نطبق الشروط الحدية عند x = a , x = 0

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \rightarrow \quad A + B = C + D \qquad \_\_\_\_(4)$$

$$\psi_1'(x=0) = \psi_2'(x=0) \rightarrow \quad i\alpha(A-B) = \beta(C-D) \qquad \_\_\_\_(5)$$

$$\psi_2(x=a) = \psi_3(x=a) \rightarrow \quad Ce^{\beta a} + De^{-\beta a} = Fe^{i\alpha a} \qquad \_\_\_\_(6)$$

$$\psi_2'(x=a) = \psi_3'(x=a) \rightarrow \quad \beta\left(Ce^{\beta a} - De^{-\beta a}\right) = i\alpha Fe^{i\alpha a} \qquad \_\_\_\_(7)$$

__المطلوب__ : إيجاد ما يعرف بمعامل النفاذ T (Transmission coeff.) الذي يعرف بأنه النسبة بين عدد الجسيمات التي تعبر وحدة المساحات في وحدة الزمن في الحزمة النافذة والحزمة الساقطة ، أي أن :

$$T = \frac{\psi_3\psi_3^* v_t}{\psi_1\psi_1^* v_i} = \frac{\left(Fe^{i\alpha x}\right)\left(F^*e^{-i\alpha x}\right)v_t}{\left(Ae^{i\alpha x}\right)\left(A^*e^{-i\alpha x}\right)\cdot v_i} = \frac{FF^*.v_t}{AA^*.v_i}$$

وحيث أن $v_i = v_t$ [سرعة الجسيمات الساقطة = سرعة الجسيمات النافذة]
لأنهما يتحركان في وسط فيه v = 0 (الجهد متلاشي) فأننا نحصل على :

$$T = \frac{FF^*}{AA^*} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

والآن : بحذف B بين (6) و (5) :

$$2A = \frac{A}{i\alpha}(C-D) + (C+D) = C\left(1+\frac{\beta}{i\alpha}\right) + D\left(1-\frac{\beta}{i\alpha}\right) \qquad \_\_\_\_(8)$$

وبإيجاد C , D من (7) ، (6) :

$$2Ce^{\beta a} = Fe^{i\alpha a}\left(1+\frac{i\alpha}{\beta}\right) \quad \therefore C = \frac{F}{2}e^{i\alpha a}e^{-\beta a}\left(1+\frac{i\alpha}{\beta}\right)$$

$$2De^{-\beta a} = Fe^{i\alpha a}\left(1-\frac{i\alpha}{\beta}\right) \quad \therefore D = \frac{F}{2}e^{i\alpha a}e^{\beta a}\left(1-\frac{i\alpha}{\beta}\right)$$

وبالتعويض في (8) :

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

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

$$\therefore 2Ae^{-i\alpha a} = \frac{F}{2}\left[e^{-\beta a}\left(1+\frac{\beta}{i\alpha}+\frac{i\alpha}{\beta}\right)+e^{\beta a}\left(2-\frac{\beta}{i\alpha}-\frac{i\alpha}{\beta}\right)\right]$$

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

$$= F\left[2\cosh\beta a + i\left(\frac{\beta}{\alpha}-\frac{\alpha}{\beta}\right)\sinh\beta a\right]$$

حيث :

$$\cosh\beta a = \frac{1}{2}\left(e^{\beta a}+e^{-\beta a}\right), \ \sinh\beta a = \frac{1}{2}\left(e^{\beta a}-e^{-\beta a}\right)$$

$$\therefore F = \frac{2Ae^{-i\alpha a}}{2\cosh\beta a + i\left(\frac{\beta}{\alpha}-\frac{\alpha}{\beta}\right)\sinh\beta a}, \quad F^* = \frac{2A^*e^{i\alpha a}}{2\cosh\beta a - i\left(\frac{\beta}{\alpha}-\frac{\alpha}{\beta}\right)\sinh\beta a}$$

$$\therefore T = \frac{FF^*}{AA^*} = \frac{4}{2\cosh^2\beta a + \left(\frac{\beta}{\alpha}-\frac{\alpha}{\beta}\right)^2\sinh^2\beta a}$$

حالة خاصة : إذا كان حاجز الجهد (النفق) متسعاً أي إذا كانت a كبيرة جداً أي إذا كانت $\beta a \gg 1$ فإن :

$$\cosh \beta a = \frac{1}{2}\left(e^{\beta a} + e^{-\beta a}\right) \simeq \frac{1}{2} e^{\beta a} \quad , \quad \sinh \beta a \simeq \frac{1}{2} e^{\beta a}$$

ويصبح معامل النفاذ T بالصورة :

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

$$= 4e^{-2\beta a}\left[\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2 + \beta^2}\right]^2 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2\beta a} = T_0 e^{-2\beta a}$$

حيث :

$$n = \frac{\alpha}{\beta} = \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \quad , \quad T_0 = \frac{16n^2}{\left(1+n^2\right)^2}$$

وهذا معناه أن T تكون صغيرة جداً عندما تكون β كبيرة ، وفي مثل تلك الحالة فإن جزءاً صغيراً من التيار الكلي للجسيمات سوف يخترق حاجز الجهد .

ومن الناحية الكلاسيكية : فإن كل الجسيمات ذات الطاقة $E < V_0$ سوف تنعكس عن $x = 0$ وهذه نتيجة تخالف النتيجة التي حصلنا عليها باستخدام ميكانيكا الكم .

التطبيق الثاني : دراسة بعض الأنظمة الذرية البسيطة
(Simple atomic systems)

في هذا الجزء سوف نختار بعض الأمثلة على معادلة شرودنجر والتي نقوم فيها بدراسة بعض الأنظمة الذرية البسيطة ، مثل المتذبذب التوافقي البسيط ، وذرة الهيدروجين وغيرها ، وفي كل من هذه الأنظمة يكون المطلوب هو إيجاد :

(١) طاقة النظام .

(٢) الدالة الموجية المعايرة للنظام .

المثال الأول : المتذبذب التوافقي البسيط (S.H.O)
(Simple Harmonic Oscillator)

يعرف المتذبذب التوافقي البسيط بأنه جسيم كتلته m يتحرك حركة توافقية بسيطة (في بعد واحد) .

القوة المؤثرة على جسيم يتحرك كمتذبذب توافقي بسيط هي $F=-kx$ ، حيث k ثابت

معادلة الحركة :

$$m\ddot{x}=-kx$$

$$\therefore \ddot{x}=-\frac{k}{m}x=-w^2x$$

حيث

$$w^2=\frac{k}{m}\rightarrow w\sqrt{\frac{k}{m}}$$

طاقة الجهد :

$$V=-W=-\int_0^x Fdx=-\int_0^x(-kx)dx=k\int_0^x xdx=\frac{1}{2}kx^2$$

أيضاً :

$$V=\frac{1}{2}mw^2x^2 \leftarrow k=mw^2$$

$$\therefore V=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}mw^2x^2$$

<u>في ميكانيكا الكم</u> : نكتب معادلة شرودنجر للمتذبذب .

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

$$\therefore\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}kx^2\right)\psi=0$$

$$\therefore\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{mk}{\hbar^2}x^2\right]\psi=0$$

بوضع $\alpha=\frac{2mE}{\hbar^2}$, $\beta=\frac{\sqrt{mk}}{\hbar}\leftarrow\beta^2=\frac{mk}{\hbar^2}$

$$\therefore\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\alpha-\beta^2x^2\right)\psi=0 \qquad \_\_\_\_\_\_\_\_ (1)$$

<u>حل المعادلة رقم (1) (طريقة سومر فيلد)</u>

باستخدام متغير جديد η حيث :

$$\eta^2=\beta x^2$$

$$\therefore\eta=\sqrt{\beta}\,x \qquad \therefore x=\frac{\eta}{\sqrt{\beta}} \quad \therefore dx=\frac{d\eta}{\sqrt{\beta}}$$

$$\frac{d}{dx}=\frac{d}{d\eta}\cdot\frac{d\eta}{dx}=\sqrt{\beta}\frac{d}{d\eta}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\right)=\left[\frac{d}{d\eta}\underbrace{\left(\frac{d\eta}{dx}\right)}\right]\left[\frac{d}{d\eta}\underbrace{\left(\frac{d\eta}{dx}\right)}\right]=\beta\frac{d^2}{d\eta^2}$$

أيضاً بوضع :

$$\frac{\alpha}{\beta} = \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} = \frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar w}$$

بالتعويض في (1) :

$$\beta \frac{d^2\psi}{d\eta^2} + \left(\alpha - \beta\eta^2\right)\psi = 0$$

بالقسمة على β :

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + \left(\lambda - \eta^2\right)\psi = 0$$

$$\therefore\ \psi'' + \left(\lambda - \eta^2\right)\psi = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

الحل العام لهذه المعادلة التفاضلية يمكن كتابته بالصور :

$$\psi = f(\eta) e^{-\frac{1}{2}\eta^2}$$

$$\therefore\ \psi' = \frac{d\psi}{d\eta} = f \cdot \left(-\eta e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\right) + e^{-\frac{1}{2}\eta^2}(f') = (f' - \eta f)e^{-\frac{1}{2}\eta^2}$$

$$\psi'' = (f' - \eta f) \cdot \left(-\eta e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\right) + e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\left[f'' - \left(\eta^2 f' + f \cdot 1\right)\right]$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\left[f'' - 2\eta f' + \left(\eta^2 - 1\right)f\right]$$

بالتعويض في (2) :

$$e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\left[f'' - 2\eta f' + \left(\eta^2 - 1\right)f\right] + \left(\lambda - \eta^2\right)f \cdot e^{-\frac{1}{2}\eta^2} = 0$$

$$\therefore\ f'' - 2\eta f' + \left(\eta^2 - 1 + \lambda - \eta^2\right)f = 0$$

$$\therefore\ f'' - 2\eta f' + (\lambda - 1)f = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (3)}$$

بمقارنـــــة هــــــذه المعادلـــــــة بمعادلـــــــة هيرميـــــــت التفاضـــــلية [Hermite Differential Eauat.] وصورتها :

$$H_n'' - 2\eta H_n' + 2nH_n = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_}(4)$$

حيث $H_n(\eta)$ هي كثيــرة حــدود هيرميــت (.Hermite polyn) نجــد أنهمــا متكافئتان بشرط أن :

$$f(\eta) = H_n(\eta) \quad , \quad 2n = \lambda - 1$$

حيث .... , n = 0 , 1 , 2

<u>لإيجاد طاقة المتذبذب</u> :

حيث أن

$$2n = \lambda - 1$$
$$\therefore \lambda = 2n + 1$$

ولكن

$$\lambda = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{2E}{\hbar w}$$

$$\therefore \frac{2E}{\hbar w} = 2n + 1 \qquad \therefore 2E = (2n+1)\hbar w$$
$$\therefore E = (2n+1)\hbar w$$

أي أن الطاقة تعتمد على العدد n .

فإذا كان n = 0 : ← $E_0 = \frac{1}{2}\hbar w$

وهـــي أقـــل قيمـــة ممكنـــة لطاقـــة المتذبـــذب ، وتســـمى بالطاقـــة الأرضـــية (Ground Energy) .

وإذا كانت n=1 ← $E_1 = \frac{3}{2}kw$

وتعرف بطاقة الحالة المثارة الأولى (First excited state) ، ...... هكذا

وتصبح القيم الذاتية للطاقة :

$$\therefore \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar w$$

<u>ملحوظة</u> : القيمة المستنتجة من معادلة شرودنجر للطاقة الأرضية للمتذبذب ، وجد أنها هي القيمة المتفقة مع التجارب المعملية .

<u>لإيجاد الدالة الموجية للمتذبذب :</u>

الدالة الموجية هي :

$$\psi = f(\eta)e^{-\frac{1}{2}\eta^2} = H_n(\eta)e^{-\frac{1}{2}\eta^2}$$

وتكون الدالة الموجية المعايرة (Normalized wave function) بالصورة :

$$\psi_n = C_n\psi$$

حيث C_n يعرف بثابت المعايرة .

$$\therefore \quad \psi_n = C_n H_n(\eta)e^{-\frac{1}{2}\eta^2}$$

<u>ولإيجاد</u> C_n : ـ نستخدم شرط المعايرة للدالة ψ_n

$$\eta = \sqrt{\beta}\ x$$

$$x = \frac{\eta}{\sqrt{\beta}}$$

$$dx = \frac{\eta}{\sqrt{\beta}}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dx$$

$$\therefore 1 = \int_{-\infty}^{\infty} C_n^* H_n(\eta)e^{-\frac{1}{2}\eta^2} \cdot C_n H_n(\eta)e^{-\frac{1}{2}\eta^2} \cdot \frac{d\eta}{\sqrt{\beta}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\beta}}|C_n|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} [H_n(\eta)]^2 e^{-\eta^2} d\eta}$$

ومن خاصية العيارية لكثيرة حدود هيرميت فإن :

$$\int_{-\infty}^{\infty} [H_n(\eta)]^2 e^{-\eta^2} d\eta = 2^n n! \sqrt{\pi}$$

$$\beta = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

$$\omega = \sqrt{k/m}$$

$$k = m\omega^2$$

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

$$\therefore 1 = \frac{1}{\sqrt{\beta}}|C_n|^2 .2^n n! \sqrt{\pi} = C_n^2 .2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$\therefore C_n^2 = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}} = \frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}$$

$$\therefore \quad C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

وتصبح الدالة الموجبة المعايرة :

$$\psi_n = C_n H_n(\eta) e^{-\frac{1}{2}\eta^2} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} H_n(\sqrt{\beta}x) e^{-\frac{1}{2}\beta x^2} \quad \Big| \quad \eta = \sqrt{\beta}\,x$$

$$\therefore \psi_n = \left[\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\right]^{\frac{1}{2}} \quad H_n(\sqrt{\beta}\,x) e^{-\frac{1}{2}\beta x^2}$$

وهو المطلوب .

<u>مثال :</u> أثبت أنه في حالة المتذبذب التوافقي البسيط حيث الدالة الموجية المعايرة

هي $\psi_n = C_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$

حيث

$$C_n = \left[\frac{\alpha}{2^n n!}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad , \qquad \alpha = \sqrt{\beta} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

فإن القيمة المتوقعة لمربع (x^2) يعطي بالعلاقة :

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

[استخدم العلاقة التكاملية الآتية لكثيرة حدود هيرميت :

$$[\int_{-\infty}^{\infty} [H_n(\alpha x)]^2 x^2 . e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{1}{\alpha^3} 2^n n! \left(n + \frac{1}{2}\right). \sqrt{\pi}$$

الحـل :

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* x^2 \psi_n dx \ = C_n^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}[H_n(\alpha x)]^2 . x^2 . e^{-\alpha^2 x^2} dx}$$

$$= C_n^2 . \frac{1}{\alpha^3} 2^n n!\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{\pi} = \left[\frac{\alpha}{2^n n!}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\cdot\frac{1}{\alpha^3}2^n \cdot n!\left(n+\frac{1}{2}\right)\cdot\sqrt{\pi}$$

$$= \frac{1}{\alpha^2}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\left(\frac{mw}{\hbar}\right)}\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}$$

وهو المطلوب .

مسألة : [على خواص كثيرة حدود هيرميت] :

(١) من تعريف كثيرة حدود هيرميت $H_n(\eta)$ بالصورة :

$$H_n(\eta) = (-1)^n e^{\eta^2}\frac{d^n\left(e^{-\eta^2}\right)}{d\eta^n} \quad , n = 0,1,2,....$$

وباستخدام الخاصية : $\frac{d^n H_n(n)}{d\eta^n} = 2^n n!$ ، أثبت أن

$$\int_{-\infty}^{\infty}[H_n(\eta)]^2 e^{-\eta^2} d\eta = 2^n n!\sqrt{\pi}$$

(٢) باستخدام خواص كثيرة حدود هيرميت وهي :

$$\eta H_n(\eta) = nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (i)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2 e^{-\eta^2} d\eta = 2^n n!\sqrt{\pi} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (ii)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n H_m e^{-\eta^2} d\eta = 0 \ (n \neq m) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (iii)$$

أثبت أن : $\eta = \alpha x$,

$$\int_{-\infty}^{\infty}[H_n(\alpha x)]^2 e^{-\alpha x^2}\cdot x^2 dx = \frac{1}{\alpha^3}\left[2^n n!\sqrt{\pi}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]$$

حل المسألة :

(١) من تعريف كثيرة حدود هيرميت :

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

التي هي حل لمعادلة هيرميت التفاضلية :

$$H_n''-2\eta H_n'+2nH_n=0$$

$$\therefore I=\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\eta)H_n(\eta)e^{-\eta^2}d\eta=(-1)^n\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\eta)\cdot\frac{d^n\left(e^{-\eta^2}\right)}{d\eta^n}d\eta$$

ولكن : $\upsilon^n=\dfrac{d^n\upsilon}{dx^n}$, $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}u\upsilon^n dx=(-1)^n\int_{-\infty}^{\infty}u^n\upsilon dx$

$$\therefore I=(-1)^n\cdot(-1)^n\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\eta^2}\frac{d^nH_n}{d\eta^n}d\eta$$

ومن خواص دالة هيرميت :

$$\therefore I=2^n\cdot n!\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\eta^2}d\eta=2^n\cdot n!\cdot 2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\eta^2}d\eta=2^n\cdot n!\cdot 2\left[\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\right]=2^n n!\sqrt{\pi}$$

وهو المطلوب أولاً .

(٢) حيث أن :

$$x^2=\frac{\eta^2}{\alpha^2}\ ,\ dx=\frac{d\eta}{\alpha}\leftarrow x=\frac{\eta}{\alpha}\leftarrow\eta=\alpha x$$

$$\therefore I=\int_{-\infty}^{\infty}H_n^2(\alpha x)e^{-\alpha^2x^2}x^2dx=\frac{1}{\alpha^3}\int_{-\infty}^{\infty}H_n^2e^{-\eta^2}\eta^2d\eta$$

ومن الخاصية (i) : $\eta H_n=nH_{n-1}+\dfrac{1}{2}H_{n+1}$

$$\therefore \eta^2H_n^2=\left(nH_{n-1}+\frac{1}{2}H_{n+1}\right)^2=n^2H_{n-1}^2+\frac{1}{4}H_{n+1}+nH_{n-1}H_{n+1}$$

$$\therefore I=\frac{1}{\alpha^3}\left[n^2\int H_{n-1}^2e^{-\eta^2}d\eta+\frac{1}{4}\int H_{n+1}^2e^{-\eta^2}d\eta+n\int H_{n-1}H_{n+1}e^{-\eta^2}d\eta\right]$$

وباستخدام العلاقتين (iii) ، (ii) :

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2 e^{-\eta^2} d\eta = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad , \int_{-\infty}^{\infty} H_n H_m e^{-\eta^2} d\eta = 0$$

$$\therefore I = \frac{1}{\alpha^3}\left[n^2 \left\{ 2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi} \right\} + \frac{1}{4} 2^{n+1}(n+1)! \sqrt{\pi} + 0 \right]$$

$$= \frac{1}{\alpha^3}\left[n^2 \left\{ \frac{2^n}{2}(n-1)! \sqrt{\pi} \right\} + \frac{1}{4}\left\{ 2 \cdot 2^n (n+1) \cdot (n-1)! \sqrt{\pi} \right\} \right]$$

$$= \frac{1}{\alpha^3}\left[\frac{2^n}{2}(n-1)! \sqrt{\pi} \left\{ n^2 + n(n+1) \right\} \right]$$

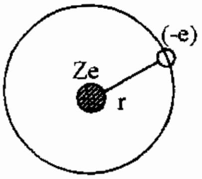
$$= \frac{1}{\alpha^3}\left[\frac{2^n}{2} \cdot \frac{n!}{n} \sqrt{\pi} \left\{ 2n^2 + 1 \right\} \right] = \frac{1}{\alpha^3} 2^n n! \sqrt{\pi}\left(n + \frac{1}{2} \right)$$

وهو المطلوب .

<u>المثال الثاني : الحركة في مجال متماثل كريا</u>

<u>[ذرة الهيدروجين Hydrogen atom]</u>

تتكون ذرة الهيدروجين من نواة شحنتها (Ze) ، وإلكترون يدور حول النواة وشحنته (-e) ، طاقة الجهد هي :



$$V = \frac{(Ze)(-e)}{r} = \frac{-Ze^2}{r}$$

واضح أن V = V (r)

أي أنها تعتمد على المسافة r في الفراغ الذي توجد فيه الذرة ويسمى المجال الذي فيه V = V (r) بالمجال المتماثل كريا :

(Spherically symmetric field)

ونبدأ هنا بدراسة معادلات هذا المجال بالتفصيل :

نكتب معادلة شرودنجر للمجال :

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\psi = 0 \quad \_\_\_\_ (1)$$

لحل تلك المعادلة نستخدم الإحداثيات القطبية الكروية (r,θ,ϕ)

حيث مؤثر لابلاس بأخذ الصورة :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$$= \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}$$

حيث :

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$\Delta_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

وبوضع $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]$ فتصبح المعادلة (1) : ـــ

$$\left(\Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}\right)\psi + k^2\psi = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(2)}$$

<u>حل المعادلة (2) بطريقة فصل المتغيرات :</u>

نفرض أن الدالة $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\cdot Y(\theta,\phi)$

ونعوض في (2) :

$$Y\Delta_r R + \frac{1}{r^2}R\Delta_{\theta,\phi}Y + k^2\cdot R\cdot Y = 0$$

بالقسمة على $R\cdot Y$:

$$\frac{1}{R}\Delta_r R + \frac{1}{r^2 Y}\Delta_{\theta,\phi}Y + k^2 = 0$$

بالضرب في r^2 :

$$\therefore \frac{r^2}{R}\Delta_r R + \frac{1}{Y}\Delta_{\theta,\phi}Y + r^2k^2 = 0$$

$$\therefore \underbrace{\frac{r^2}{R}\Delta_r R + r^2k^2}_{\text{يعتمد على r}} = \underbrace{-\frac{1}{Y}\Delta_{\theta,\phi}Y}_{\text{يعتمد على }(\theta,\phi)} = \lambda \quad \text{ثابت}$$

وبذلك نحصل على معادلتين :

$$(\mathrm{i})\frac{r^2}{R}\Delta_r R + r^2k^2 = \lambda$$

$$\therefore \Delta_r R + Rk^2 = \frac{\lambda R}{r^2} \qquad \therefore \quad \Delta_r R + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R = 0$$

تسمى هذه المعادلة بالمعادلة القطرية (Radial Equat.) أو بإختصار معادلة R (R-Equat.)

$$(\mathrm{ii}) - \frac{1}{\mathrm{Y}}\Delta_{\theta,\phi}\mathrm{Y} = \lambda$$

$$\therefore \quad \Delta_{\theta,\phi}\mathrm{Y} + \lambda\mathrm{Y} = 0$$

وتسمى هذه المعادلة بالمعادلة الزاوية (Angular Equation) وتسمى الدالة $\mathrm{Y}(\theta,\phi)$ بالدالة التوافقية الكروية (Spherical Harmonics) .

<u>حل المعادلة</u> Y :

$$\Delta_{\theta,\phi}\mathrm{Y} + \lambda\mathrm{Y} = 0$$

نضع

$$\Delta_{\theta,\phi} = \Delta_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\Delta_\phi$$

حيث

$$\Delta_\theta = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \quad , \qquad \Delta_\phi = \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\therefore \left(\Delta_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\Delta_\phi\right)\mathrm{Y} + \lambda\mathrm{Y} = 0$$

وبوضع :

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\phi)\cdot\Phi(\phi)$$

$$\therefore \Phi\Delta_\theta\Theta + \frac{\Theta}{\sin^2}\Delta_\phi\Phi + \lambda\Theta\Phi = 0$$

بالقسمة على $\Theta\Phi$:

$$\therefore \frac{1}{\Theta}\Delta_\theta\Theta + \frac{1}{\Phi\sin^2\theta}\Delta_\phi\Phi + \lambda = 0$$

بالضرب في $\sin^2\theta$:

$$\therefore \frac{\sin^2\theta}{\Theta}\Delta_\theta\Theta + \frac{1}{\Phi}\Delta_\phi\Phi + \lambda\sin^2\theta = 0$$

$$\therefore \underbrace{\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\Delta_\theta\Theta + \lambda\sin^2\theta}_{\text{دالة في } \theta \text{ فقط}} = \underbrace{-\frac{1}{\Phi}\Delta_\phi\Phi}_{\text{دالة في } \phi \text{ فقط}} = \beta \quad (\text{ثابت})$$

وبذلك نحصل على معادلتين :

$$\text{(i)}\ \frac{\sin^2\theta}{\Theta}\Delta_\theta\Theta + \lambda\sin^2\theta = \beta$$

$$\therefore \quad \Delta_\theta\Theta + \left(\lambda - \frac{\beta}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة θ .

$$\text{(ii)} -\frac{1}{\Phi}\Delta_\phi\Phi = \beta$$

$$\therefore \Delta_\phi\Phi + \beta\Phi = 0$$

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة ϕ.

وبذلك نكون حصلنا على المعادلات الثلاثة الآتية، وهي المعادلات الناتجة عن فصل معادلة شرودنجر لحركة جسيم في مجال متماثل كريا :

معادلة R :

$$\text{(i)}\quad \Delta_r R + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R = 0$$

معادلة θ :

$$\text{(ii)}\quad \Delta_\theta\Theta + \left(\lambda - \frac{\beta}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

معادلة Φ :

$$\text{(iii)}\quad \Delta_\phi\Phi + \beta\Phi = 0$$

(١) حل معادلة Φ :

$$\Delta_{\phi}\Phi + \beta\Phi = 0$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \beta\Phi = 0 \qquad \Big| \qquad \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} = \frac{d^2}{d\phi^2}$$

وهي معادلة موجية ، حلها العام :

$$\Phi = C_1 e^{i\sqrt{\beta}\phi} + C_2 e^{-i\sqrt{\beta}\phi} = Ce^{\pm i\sqrt{\beta}\phi} = Ce^{im\phi}$$

حيث $m = \pm\sqrt{\beta} \quad \leftarrow \quad m^2 = \beta$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\ldots\ldots$$

ولإيجاد الثابت C : نستخدم شرط المعايرة للدالة Φ :

$$1 = \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi = \int_0^{2\pi} C^* e^{-im\phi} \cdot Ce^{im\phi} \cdot d\phi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = C^2(2\pi)$$

$$\therefore C^2 = \frac{1}{2\pi}$$

$$\therefore C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

ويصبح حل معادلة Φ بالصورة [حيث Φ تعتمد على m] :

$$\boxed{\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}} \qquad , \ m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\ldots\ldots$$

(٢) حل معالة Θ :

$$\Delta_{\theta}\Theta + \left(\lambda - \frac{\beta}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

ولكن $\beta = m^2$

$$\Delta_{\theta}\Theta + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0 \qquad \_\_\_\_\_\_ (1)$$

نستخدم متغير جديد $\mu = \cos\theta$ حيث $(-1 \le \mu \le 1)$ فتتحول المعادلة (1) إلى معادلة لجندر المرافقة (Associated Legendre Equation) ، وذلك كالتالي :

$$\mu = \cos\theta \quad \therefore d\mu = -\sin\theta d\Theta$$

$$\frac{d\mu}{d\theta} = -\sin\theta$$

$$1-\mu^2 = 1-\cos^2\theta = \sin^2\theta$$

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{d\Theta}{d\mu}\cdot\frac{d\mu}{d\theta} = -\sin\theta\frac{d\Theta}{d\mu}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} = -\frac{d}{d\mu}$$

$$\therefore \frac{1}{\sin\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} = -\frac{d\Theta}{d\mu}$$

$$\therefore \Delta_\theta = \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) = -\frac{d}{d\mu}\left[\sin\theta\cdot\left(-\sin\theta\frac{d}{d\mu}\right)\right]$$

$$= \frac{d}{d\mu}\left[\sin^2\theta\frac{d}{d\mu}\right] = \frac{d}{d\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\frac{d}{d\mu}\right]$$

بالتعويض في (1) :

$$\frac{d}{d\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\frac{d\Theta}{d\mu}\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right)\Theta = 0$$

$$\left(1-\mu^2\right)\frac{d^2\Theta}{d\mu^2} - 2\mu\frac{d\Theta}{d\mu} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right)\Theta = 0$$

وبمقارنة هذه المعادلة بمعادلة لجندر المرافقة وصورتها :

$$\left(1-\mu^2\right)P_\ell''^m(\mu) - 2\mu P_\ell'^m(\mu) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right]P_\ell^m(\mu) = 0$$

نجد أن المعادلتين متكافئتين بشرط أن :

$$\lambda = \ell(\ell+1) \quad ، \quad \Theta = P_\ell^m(\mu)$$

حيث $P_\ell^m(\mu)$ هي دالة لجندر المرافقة

$$\ell = 0,1,2,\ldots\ldots$$
$$m = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell$$
$$m \le \ell$$

وعلى ذلك يكون الحل العام للدالة Θ المعايرة هو :

$$\Theta_{\ell,m} = C_{\ell,m}P_\ell^m(\mu) = C_{\ell,m}P_\ell^m(\cos\theta)$$

حيث $C_{\ell,m}$ هو ثابت المعايرة للدالة $\Theta_{\ell,m}$

<u>إيجاد ثابت المعايرة</u> $C_{\ell,m}$:

باستخدام شرط المعايرة على الدالة Θ :

$$1 = \int_{-1}^{1}\Theta^*(\mu)\Theta(\mu)d\mu \qquad (-1 \le \mu \le 1)$$

$$\therefore 1 = \int_{-1}^{1} C_{\ell m}^* P_\ell^m(\mu)\cdot C_{\ell m}P_\ell^m(\mu)d\mu = |C_{\ell m}|^2\int_{-1}^{1}\left[P_\ell^m(\mu)\right]^2 d\mu$$

ومن خاصية المعايرة للدالة $P_\ell^m(\mu)$:

$$\int_{-1}^{1}\left[P_\ell^m(\mu)\right]^2 d\mu = \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}$$

$$\therefore 1 = |C_{\ell m}|^2\cdot\frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}$$

$$\therefore C_{\ell m}^2 = \frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}$$

$$\therefore C_{\ell m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}$$

وتصبح دالة Θ المعيرة بالصورة :

$$\boxed{\Theta_{\ell,m}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\,P_\ell^m(\cos\theta)}$$

الدالة $Y(\theta,\phi)$:

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\cdot\Phi(\phi)=\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)\cdot e^{im\phi}$$

تعرف هذه الدالة بالدالة التوافقية الكروية (Spherical Harmonic)
ونخضع لخاصية المعايرة الآتية :

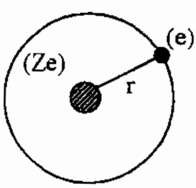
$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left[Y_{\ell,m}(\theta,\phi)\right]^2\sin\theta d\theta d\phi=1$$

(٤) حل معادلة R(r) :

لحل معادلة R وصورتها :

$$\Delta_r R+\left[k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R=0$$

حيث $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]$ ، يجب أن يكون شكل V(r) محددا حتى يمكن حل المعادلة . ولذلك نعتبر أحد الأمثلة الهامة والبسيطة في ميكانيكا الكم وهو ذرة الهيدروجين (Hydrogen atom) حيث



$$V(r)=\frac{(Ze)(-e)}{r}=\frac{-Ze^2}{r}$$

وتصبح معادلة R بالصورة :

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r}\right)\right]R=0$$

$$\frac{1}{r^2}\left[r^2\frac{d^2R}{dr^2}+2r\frac{dR}{dr}\right]+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2mZe^2}{\hbar^2 r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R=0$$

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[-A^2+\frac{2B}{r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R=0 \qquad (1)$$

حيث :

$$A^2=-\frac{2m}{\hbar^2}E \quad , \quad B=\frac{mZe^2}{\hbar^2}$$

في الميكانيكا الكلاسيكية : الطاقة السالبة (E<0) تناظر المدارات القطع ناقصة والتي تمثل حالات مرتبطة أو مقيدة (Bound states) ، بينما الطاقة الموجبة (E>0) تناظر المدارات القطع زائدة والتي تمثل حالات غير مرتبطة أو غير مقيدة (unbound state) .

وفي حالتنا : فإن الإلكترون يكون دائماً مرتبطاً في ذرة الهيدروجين وبالتالي فإن E<0

وباعتبار متغير جديد هو ρ حيث : $\rho = 2Ar$

$$r = \frac{\rho}{2A} \rightarrow \frac{1}{r} = \frac{2A}{\rho} \qquad \therefore \frac{d}{dr} = 2A\frac{d}{d\rho}$$

$$\therefore \frac{d^2}{dr^2} = (2A)^2\frac{d^2}{d\rho^2} \qquad \therefore \frac{d^2}{dr^2} = 4A^2\frac{d^2}{d\rho^2}$$

وتؤول المعادلة (1) إلى :

$$4A^2\frac{d^2R}{d\rho^2} + 2\cdot\frac{2A}{\rho}\cdot 2A\frac{dR}{d\rho} + \left[-A^2 + 2B\cdot\frac{2A}{\rho} - \frac{4A^2}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right]R = 0$$

بالقسمة على $4A^2$:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{A\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R = 0$$

وبوضع $\frac{B}{A} = \lambda =$ عدد صحيح = n

حيث n = 1, 2, 3, ...

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} = R'' \qquad , \qquad \frac{dR}{d\rho} = R'$$

$$\therefore \qquad R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R = 0 \quad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (2)$$

وهذه المعادلة التفاضلية لها الحل العام الآتي :

$$R(\rho)=g(\rho)e^{-\frac{\rho}{2}} \qquad \text{(3)}$$

حيث الدالة $g(\rho)$ يمكن إيجادها بدلالة كثيرة حـدود لاجيـر المرافقـة (L_p^q) (Associated Lagaurre polyn.) كالتالي :

من (3) بالتفاضل :

$$R'=g\left(-\frac{1}{2}e^{-\frac{\rho}{2}}\right)+e^{-\frac{\rho}{2}}g' =e^{-\frac{\rho}{2}}\left[g'-\frac{1}{2}g\right] \qquad , \quad g'=\frac{dg}{d\rho}$$

$$R''=e^{-\frac{\rho}{2}}\left[g''-g'+\frac{1}{4}g\right]$$

وبالتعويض في (2) :

$$g''+\left(\frac{2}{\rho}-1\right)g'+\left[\frac{n-1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]g=0 \qquad \text{(4)}$$

وهي المعادلة التفاضلية للدالة g .

<u>**ولحل هذه المعادلة**</u> :

نعرف الدالة $g(\rho)$ بدلالة دالة أخرى ولتكن $F(\rho)$ بالصورة الآتية :

$$g(\rho)=\rho^s F(\rho)$$

ونوجد الصورة العامة لمعادلة الدالة $F(\rho)$ حيث :

$$\frac{dg}{d\rho}=\rho^s\frac{dF}{d\rho}+s\rho^{s-1}F=g'$$

$$\frac{d^2g}{d\rho^2}=\rho^s\frac{d^2F}{d\rho^2}+2s\rho^{s-1}\frac{dF}{d\rho}+s(s-1)\rho^{s-1}F=g''$$

وبالتعويض في (4) :

$$\rho^s\frac{d^2F}{d\rho^2}+\left[2s\rho^{s-1}+2\rho^{s-1}-\rho^s\right]\frac{dF}{d\rho}+\left[s(s-1)\rho^{s-2}+2s\rho^{s-2}-s\rho^{s-1}\right.$$
$$\left.+n\rho^{s-1}-\ell(\ell+1)\rho^{s-2}-\rho^{s-1}\right]F=0$$

وبالقسمة على ρ^{S-2} :

$$\rho^2 \frac{d^2F}{d\rho^2} + [(2s+2-\rho)\rho]\frac{dF}{d\rho}$$
$$+[s(s+1)-\ell(\ell+1)+(n-s-1)\rho]F = 0 \qquad (5)$$

وهذه المعادلة تتحقق لسائر قيم ρ بما فيها $\rho = 0$

ولكي نجد قيمة s : نضع $\rho = 0$ في (5) فنحصل على :

$$s(s+1)-\ell(\ell+1)=0$$
$$\therefore s(s+1)=\ell(\ell+1)$$

وهذه المعادلة تعطي قيمتين ل s هما : $s=\ell\ ,\ s=-(\ell+1)$

والقيمة $s=-(\ell+1)$ هي قيمة مرفوضة لأنها تجعل الدالة $g(\rho)$ تؤول إلى قيمة غير محدودة (ما لا نهاية) ، ولذلك نأخذ القيمة $s=\ell$

$$\therefore g(\rho)=\rho^{\ell}F(\rho)$$

وبالتعويض عن $s=\ell$ في المعادلة (5) نحصل على :

$$\rho^2 \frac{d^2F}{d\rho^2} + [(2\ell+2-\rho)\rho]\frac{dF}{d\rho} + [\ell(\ell+1)-\ell(n-\ell-1)\rho]F = 0$$

وبالقسمة على ρ ووضع :

$$\frac{dF}{d\rho} = F' \qquad , \qquad \frac{d^2F}{d\rho'} = F''$$

$$\therefore \quad \rho F'' + [2(\ell+1)-\rho]F' + (n-\ell-1)F = 0 \qquad (6)$$

وبمقارنة هذه المعادلة بمعادلة لاجير المرافقة (Associated Laguere Eq.).

وصورتها :

$$\rho\left(L_p^q\right)'' + (q+1-\rho)\left(L_p^q\right)' + (p-q)L_p^q = 0$$

حيث الدالة $L_p^q(\rho)$ هي كثيرة حدود لاجير المرافقة من الدرجة (p-q) والرتبة q .

نجد أنهما متكافئتان بشرط أن :

$$F(\rho) = L_p^q(\rho) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(7)}$$

$$2(\ell+1) - \rho = q + 1 - \rho \rightarrow 2\ell + 2 = q + 1$$

$$\therefore\ q = 2\ell + 1$$

$$p - q = n - \ell - 1 \rightarrow p = n - \ell - 1 + q = n - \ell - 1 + (2\ell + 1) = n + \ell$$

$$\therefore\quad p = n + \ell$$

بالتعويض في (7) :

$$F(\rho) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

ويصبح الحل $g(\rho)$ هو :

$$g(\rho) = \rho^{\ell} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

ويصبح الحل العام لمعادلة R هو :

$$R(\rho) = g(\rho) e^{-\frac{\rho}{2}} = \rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

وتكون الدالة القطرية المعايرة بالصورة :

$$R_{n\ell}(\rho) = C_{n\ell} R(\rho) = C_{n\ell}\rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

حيث $C_{n\ell}$ هو ثابت المعايرة .

<u>ولإيجاد طاقة ذرة الهيدروجين :</u>

حيث أن :

$$n = \frac{B}{A}$$

$$n^2 = \frac{B^2}{A^2} = \frac{m^2 Z^2 e^4}{\hbar^4} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2mE}\right) = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 E}$$

$$\therefore E = -\frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(I)}$$

حيث $\frac{\hbar^2}{me^2} = a_0$ هي نصف القطر لبوهر (Bohr radius) .

وبأخذ $\Re = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ وتعرف بثبات ريدبرج (Rydberg constt.)

$$\therefore E = -\Re \frac{Z^2}{n^2} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(II)}$$

حيث $n = 1,2,3,\ldots\ldots\ldots$

من $(I),(II)$ يتضح أن E تعتمد على n (العدد الكمي الرئيسي) .

<u>ولإيجاد ثابت المعايرة</u> $C_{n\ell}$ في معادلة R :

نطبق شرط المعايرة على الدالة $R_{n\ell}(r)$

$$1 = \int_0^\infty [R_{n\ell}]^2 r^2 dr$$

حيث

$$R_{n\ell} = C_{n\ell}\,\rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

العلاقة بين r, ρ :

$$\rho = 2Ar = 2\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}\cdot r$$

$$= 2\sqrt{\frac{-2m}{\hbar^2}\left(\frac{-Z^2e^2}{2a_0n^2}\right)}\cdot r = 2\sqrt{\frac{Z^2}{a_0^2n^2}}\cdot r = 2\frac{Z}{a_0 n}r$$

$$\therefore r = \frac{a_0 n}{2Z}\rho \rightarrow dr = \frac{a_0 n}{2Z}d\rho$$

وبالتعويض في شرط المعايرة :

$$1 = C_{n\ell}^2\left(\frac{a_0 n}{2Z}\right)^3 \underbrace{\int_0^\infty \rho^{2\ell+2} e^{-\rho}\left[L_{n+\ell}^{2\ell+1}\right]^2 d\rho}$$

$$= C_{n\ell}^2\left(\frac{a_0 n}{2Z}\right)^3 \ I_{n\ell} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(1)}$$

حيث

$$I_{n\ell} = \int_0^\infty \rho^{2\ell+2} \cdot e^{-\rho} \cdot \left[L_{n+\ell}^{2\ell+1}\right]^2 d\rho$$

ومن خواص دالة (كثيرة حدود) لاجير المرافقة :

$$\int_0^\infty \rho^{q+1} e^{-\rho} \left[L_p^q\right]^2 d\rho = \frac{(p!)^3}{(p-q)!}\left[2p-q+1\right]$$

$$p = n+\ell \quad , \quad q = 2\ell+1$$

وبأخذ :

$$\therefore I_{n\ell} = \frac{[(n+\ell)!]^\rho}{(n-\ell-1)!}(2n)$$

وبالتعويض في (1) :

$$1 = C_{n\ell}^2 \left(\frac{a_0 n}{2Z}\right)^3 \cdot \frac{[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}(2n)$$

$$\therefore C_{n\ell}^2 = \left(\frac{2Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{1}{2n} \frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3} = \left(\frac{Z}{a_0 n}\right)^3 \frac{4(n-\ell-1)!}{n[(n+\ell)!]^3}$$

$$\therefore C_{n\ell} = 2\left(\frac{Z}{a_0 n}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{(n-\ell-1)!}{n[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$R_{n\ell} = C_{n\ell} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

$$= 2\left(\frac{Z}{a_0 n}\right)^3 \left[\frac{(n-\ell-1)!}{n[(n+\ell)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

وتكون الدالة الموجية الكاملة لذرة الهيدروجين هي :

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r) \cdot \Theta_{\ell m}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)$$

أمثلة محلولة :

مثال(١) : ــ أحسب القيمة المتوقعة $\langle \frac{1}{r} \rangle$ ، حيث r هي نصف قطر ذرة الهيدروجين ، وذلك باستخدام الدوال المعايرة لتلك الذرة .

[استخدم العلاقة التكاملية الآتية لدالة لاجير المرافقة :

$$[\int_0^{\infty} \rho^q e^{-\rho} \left[L_p^q\right]^2 d\rho = \frac{(p!)^3}{(p-q)!}$$

الحــل :

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \langle r^{-1} \rangle = \int \psi_{n\ell m}^* \left(r^{-1}\right) \psi_{n\ell m} d\tau$$

$$= \int\int\int \psi_{\ell m}^* R_{n\ell}^* \left(r^{-1}\right) \mathrm{Y}_{\ell m} R_{n\ell} \cdot r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$$

$$= \underbrace{\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{Y}_{\ell m}^* \mathrm{Y}_{\ell m} \sin\theta d\theta d\phi}\cdot \int_0^{\infty} [R_{n\ell}]^2 r dr$$

ولكن من خاصية العيارية للدوال التوافقية الكرية $\mathrm{Y}_{\ell m}$

$$\int\int [\mathrm{Y}_{\ell m}]^2 \sin\theta\, d\phi = 1$$

$$\therefore \langle \frac{1}{r} \rangle = \int_0^{\infty} [R_{n\ell}]^2 r dr$$

حيث :

$$R_{n\ell} = C_{n\ell} \rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1}$$

$$r = \frac{na_0}{2Z}\rho \qquad \rightarrow \qquad dr = \frac{na_0}{2Z} d\rho$$

$$\therefore \langle \frac{1}{r} \rangle = C_{n\ell}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2 \int_0^{\infty} \rho^{2\ell} e^{-\rho} \left[L_{n+\ell}^{2\ell+1}\right]^2 \cdot \rho d\rho$$

$$= C_{n\ell}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2 \underbrace{\int_0^{\infty} \rho^{2\ell+1} e^{-\rho} \left[L_{n+\ell}^{2\ell+1}\right]^2 d\rho} = C_{n\ell}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2 I_{n\ell}$$

$$I_{n\ell} = \int_0^\infty \rho^{2\ell+1} e^{-\rho} \left[L_{n+\ell}^{2\ell+1}\right]^2 d\rho \qquad \begin{array}{|l} p = n+\ell \\ q = 2\ell+1 \end{array}$$

$$= \int_0^\infty \rho^{q} e^{-\rho} \left[L_{p}^{q}\right]^2 d\rho = \frac{(p!)^3}{(p-q)!}$$

$$= \frac{[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}$$

$$\therefore \langle \frac{1}{r} \rangle = \underbrace{4\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{n[(n+\ell)!]^3}}_{(C_{n\ell}^2)} \cdot \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2 \cdot \underbrace{\frac{[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}}_{(I_{n\ell})}$$

$$= \left(\frac{Z}{na_0}\right) \cdot \frac{1}{n} = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

وهو المطلوب .

<u>مثال (٢) :</u> أحسب الدالة الموجية المعايرة للحالة الأرضية لذرة الهيدروجين بالصورة الآتية :

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a_0}r}$$

<u>الحل :</u> تعرف الحالة الأرضية لذرة الهيدروجين بأنها الحالة التي تتميز بالأعداد الكمية $m = 0$, $\ell = 0$, $n = 1$ ، وتكون الدالة الموجية لها هي ψ_{100} ، ولحسابها :

$$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell} \Theta_{\ell m} \Phi_m$$

$$R_{n\ell} = C_{n\ell} \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1} \quad , C_{n\ell} = 2\left(\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2} \left[\frac{(n-\ell-1)!}{n[(n+\ell)!]^3}\right]\right)^{1/2}$$

$$C_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \quad , \quad \rho = \frac{2Z}{a_0} r \quad , \quad L_1^1 = 1$$

$$\therefore \quad R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

$$\Theta_{\ell m} = \left[\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\right]^{\frac{1}{2}} p_\ell^m \qquad , p_0^0 = 1$$

$$\therefore \Theta_{00} = \left[\frac{1}{2}\right]^{1/2} p_0^0 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Phi_m = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right] e^{im\phi} \qquad \therefore \Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\therefore \psi_{100} = R_{10} \cdot \Theta_{00} \cdot \Phi_0 = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{Z}{a_0}r} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a_0}r}$$

وهو المطلوب .

مثال (٣) : إذا كانت الدالة الموجية للحالة الأرضية لـذرة الهيـدروجين هـي : $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{3/2}}} e^{-\frac{r}{a_0}}$ [حيـث Z = 1] ، أثبـت أن القيمـة المتوقعـة للمقدارين $r, \frac{1}{r}$ هما على التالي :

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0 \qquad , \qquad \langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{a_0}$$

الحـل :

حيث أن :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{3/2}}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$(\mathbf{i})\ \langle r\rangle = \int \psi^{*} r\, \psi d\tau = \int |\psi|^{2} r\cdot\left(r^{2}\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi\right)$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}}\cdot r^3 dr \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta}_{2}\underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi}$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}(2)(2\pi)\int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \frac{4}{a_0^3} I_r$$

ولكن :

$$\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\therefore I_r = \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{3\times 2}{2^4 / a_0^4} = \frac{3a_0^4}{8}$$

$$\therefore \langle r\rangle = \frac{4}{a_0^3}\cdot\left(\frac{3a_0^4}{8}\right) = \frac{3}{2}a_0$$

وهو المطلوب أولا .

$$(\mathbf{ii})\ \ \langle \frac{1}{r}\rangle = \langle r^{-1}\rangle = \int |\psi|^{2}\cdot r^{-1}\cdot\left(r^{2}\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi\right)$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}}\cdot r\, dr \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta}_{2}\underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi}$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}(4\pi)\int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \frac{4}{a_0^3} I_r$$

$$I_r = \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \frac{1!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^2} = \frac{a_0^2}{4}$$

[حيث $\int_0^{\infty} r^n e^{-\alpha r} dr = \dfrac{n!}{\alpha^{n+1}}$]

$$\therefore \langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{4}{a_0^3} \cdot \left(\frac{a_0^2}{4} \right) = \frac{1}{a_0}$$

وهو المطلوب ثانياً .

مثال (٤) :

باستخدام الدوال الموجية المعايرة لذرة الهيدروجين ، أثبت أن القيمة المتوقعة لنصف قطر تلك الذرة يعطي بالعلاقة :

$$\therefore \langle r \rangle = \left(\frac{a_0}{2Z} \right) \left[3n^2 - \ell(\ell+1) \right]$$

[استخدم العلاقة التكاملية الآتية لدالة لاجير المرافقة :

$$[\ \int_0^{\infty} \rho^{q+2} e^{-\rho} \left[L_p^q \right]^2 d\rho = \frac{(p!)^3}{(p-q)!} \left[6p(p-q+1) + q(q-3) + 2 \right]$$

الحـــل :

$$\langle r \rangle = \int \psi^* r \psi d\tau = \iiint R^* Y^* r\, RY \cdot r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$= \underbrace{\iint Y^* Y \sin\theta\, d\theta\, d\phi}_{1} \int_0^{\infty} [R]^2 r^3 dr = \int_0^{\infty} [R]^2 r^3 dr$$

حيث :

$$R = C_{n\ell} \rho^{\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+\ell}^{2\ell+1} \quad , r = \frac{na_0}{2Z} \rho \quad , \quad dr = \frac{na_0}{2Z} d\rho$$

$$\therefore \langle r \rangle = C_{n\ell}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^4 \int_0^{\infty} \rho^{2\ell} \cdot e^{-\rho} \left[L_{n+\ell}^{2\ell+1} \right]^2 \cdot \rho^3 d\rho$$

$$= C_{n\ell}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^4 \int_0^{\infty} \rho^{2\ell+3} e^{-\rho} \left[L_{n+\ell}^{2\ell+1} \right]^2 d\rho \;\; = C_{n\ell}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^4 I_{n\ell}$$

$$I_{n\ell}=\int_0^\infty \rho^{2\ell+3}e^{-\rho}\left[L_{n+\ell}^{2\ell+1}\right]^2 d\rho=\int_0^\infty \rho^{q+2}e^{-\rho}\left[L_p^q\right]^2 d\rho$$

$$=\frac{(p!)^3}{(p-q)\,!}\left[6p(p-q+1)+q(q-3)+2\right] \qquad \begin{array}{|l} p=n+\ell \\ q=n\ell+1 \end{array}$$

ولكن :

$$\begin{aligned}\left[6p(p-q+1)+q\,(q-3)+2\,\right]&=6\,(n+\ell)(n+1-2\ell-1+1)\\&\quad+(2\ell+1)(2\ell+1-3\,)+2\\&=6\,(n+\ell)(n-\ell)+(2\ell+1)(2\ell-1)+2\\&=6\,\left(n^2-\ell^2\right)+2\,(2\ell+1)(\ell-1)+2\\&=6\,\left(n^2-\ell^2\right)+2\,\left[(2\ell+1)(\ell-1)+1\right]\\&=6\,\left(n^2-\ell^2\right)+2\,\left[2\ell^2-2\ell+\ell-1+1\right]\\&=6\,\left(n^2-\ell^2\right)+4\ell^2-2\ell=6n^2-2\ell^2-2\ell\\&=2\,\left[3n^2-\ell^2-\ell\right]=2\,\left[3n^2-\ell(\ell+1)\right]\end{aligned}$$

$$\therefore I_{n\ell}=\frac{\left[(n+\ell)\,!\right]^3}{(n-\ell-1)\,!}\cdot 2\left[3n^2-\ell(\ell+1)\right]$$

$$\therefore \langle r\rangle=\left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{1}{2n}\frac{(n-\ell-1)\,!}{\left[(n+\ell)\,!\right]^3}\right]\cdot\left(\frac{na_0}{2Z}\right)^4\cdot\frac{\left[(n+\ell)\,!\right]^3}{(n-\ell-1)\,!}\cdot 2\left[3n^2-\ell(\ell+1)\right]$$

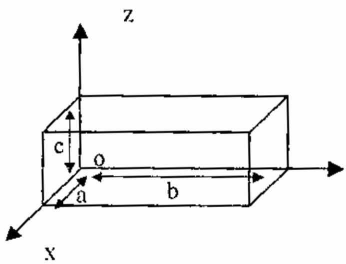
$$=\left(\frac{na_0}{2Z}\right)\cdot\frac{1}{2n}\cdot 2\left[3n^2-\ell(\ell+1)\right]=\left(\frac{na_0}{2Z}\right)\left[3n^2-\ell(\ell+1)\right]$$

وهو المطلوب .

التطبيق الثالث : المسائل في ثلاثة أبعاد (Problems in 3-dimensions)

مسألة (١) جسيم في صندوق (في ثلاثة أبعاد) :

نعتبر حركة جسيم ذو كتله m في صندوق مستطيل الشكل أطوال أحرفه a,b,c وحجمه $\Delta = abc$



نفرض أن الجهد داخل الصندوق $V = 0$

أي أن الجسيم يكون حراً (Free particle)

$$V = 0 \begin{cases} 0 < x < a \\ 0 < y < b \\ 0 < z < c \end{cases}$$

معادلة شرودنجر لهذا النظام هي :

$$\nabla^2\psi(x,y,z) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x,y,z) = 0$$

$$\therefore \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (1)}$$

لحل هذه المعادلة نستخدم طريقة فصل المتغيرات وذلك بوضع

$$\psi(x,y,z) = X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$$

$$\therefore \frac{\partial\psi}{\partial x} = YZ\frac{\partial X}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y} = XZ\frac{\partial Y}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z} = XY\frac{\partial Z}{\partial z}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = YZ\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}, \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = XZ\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}, \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = XY\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}$$

وبالتعويض في المعادلة (1) نحصل على :

$$YZ\frac{d^2X}{dx^2} + XZ\frac{d^2Y}{dy^2} + XY\frac{d^2Z}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2}EXYZ = 0$$

وبالقسمة على ψ أي على XYZ نحصل على :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0$$

وهذه المعادلة تتحقق بشرط أن :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}=\alpha_1 \quad , \quad \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}=\alpha_2 \quad , \quad \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}=\alpha_3$$

حيث $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ ثوابت ، وبحيث :

$$\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=-\frac{2m}{\hbar^2}E$$

وبكتابة

$$E=E_x+E_y+E_z$$

$$\therefore \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=-\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_x+E_y+E_z\right)$$

$$\therefore \frac{d^2X}{dx^2}-\alpha_1X=0 \quad \Rightarrow \quad \therefore \frac{d^2X}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E_xX=0$$

$$\therefore \frac{d^2Y}{dy^2}-\alpha_2Y=0 \quad \Rightarrow \quad \therefore \frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E_y\ Y=0$$

$$\therefore \frac{d^2Z}{dz^2}-\alpha_3Z=0 \quad \Rightarrow \quad \therefore \frac{d^2Z}{dz^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E_z\ Z=0$$

وبأخذ

$$\frac{2m}{\hbar^2}E_x=\alpha^2 \ , \ \frac{2m}{\hbar^2}E_y=\beta^2 \ , \ \frac{2m}{\hbar^2}E_z=\gamma^2$$

$$\therefore \frac{d^2X}{dx^2}+\alpha^2X=o \ , \ \frac{d^2Y}{dy^2}+\beta^2Y=0 \ , \frac{d^2Z}{dz^2}+\gamma^2Z=o$$

$$\alpha^2+\beta^2+\gamma^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_x+E_y+E_z\right)=\frac{2m}{\hbar^2}E$$

المعادلات الثلاث السابقة لها الحل العام :

$$X=A\sin\alpha x \quad , \ Y=B\sin\beta y \quad , \ Z=C\sin\gamma z$$

وهذه الحلول الثلاثة تتمشى مع الخاصية الهامة وهي تلاشي الدالة الموجية عند الحدود .

$$x=0 \quad , \quad y=0 \quad , \quad z=0$$

ومن خاصية تلاشي الدالة الموجيــة عنــد الأحــرف $x=a\ ,\ y=b\ \ ,\ z=c$

نحصل على الآتي :

$$X=0\ =A\sin\alpha a \qquad \therefore \alpha a=n\pi \qquad \therefore \alpha=\frac{n\pi}{a}$$

$$Y=0\ =B\sin\beta b \qquad \therefore \beta b=\ell\pi \qquad \therefore \beta=\frac{\ell\pi}{b}$$

$$Z=0\ =C\sin\gamma c \qquad \therefore \gamma c=k\pi \qquad \therefore \gamma=\frac{k\pi}{c}$$

حيث : $n,\ell,k=0,1,2,........$

ويأخذ الحل العام الصورة :

$$X=A\sin\frac{n\pi}{a}x\ \ ,\ \ Y=B\sin\frac{\ell\pi}{b}y\ \ ,\ \ Z=C\sin\frac{k\pi}{c}z\ \ ,$$

<u>**ولإيجاد السعات A , B , C**</u> : نستخدم خاصية المعايرة للدوال الثلاثــة X , Y , Z كالتالي :

$$1=\int\psi^*\psi d\Delta=A^2B^2C^2\int_0^a\int_0^b\int_0^c\sin^2\alpha x\,dx\sin^2\beta y\,dy\sin^2\gamma z\,dz$$

$$d\Delta=dx\,dy\,dz$$

ولكن :

$$\int_0^a\sin^2\alpha\,x dx=\int_0^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\ dx=\frac{1}{2}\int_0^a\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)dx$$

$$=\frac{1}{2}\left[x-\frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi}{a}x\right]_0^a=\frac{a}{2}$$

وبالمثل فإن :

$$\int_0^b\sin^2\beta y\,dy=\frac{b}{2}\ \ ,\ \int_0^c\sin^2\gamma z\,dz=\frac{c}{2}$$

$$\therefore 1=A^2B^2C^2\cdot\frac{a}{2}\cdot\frac{b}{2}\cdot\frac{c}{2}=A^2B^2C^2\cdot\frac{abc}{8}$$

$$\therefore A^2B^2C^2 = \frac{8}{abc} \qquad \therefore ABC = \sqrt{\frac{8}{abc}}$$

ولإيجاد قيم الطاقة : حيث أن :

$$\frac{2m}{\hbar^2}E_x = \alpha^2 \quad , \quad \alpha = \frac{n\pi}{a} \quad \therefore E_x = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}E_y = \beta^2 \quad , \quad \beta = \frac{\ell\pi}{b} \quad \therefore E_y = \frac{\ell^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}E_z = \gamma^2 \quad , \quad \gamma = \frac{k\pi}{c} \quad \therefore E_z = \frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2mc^2}$$

وتكون الطاقة الكلية هي :

$$E = E_x + E_y + E_z \quad = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{b^2} + \frac{k^2}{c^2}\right)$$

وتصبح الدالة الموجية :

$$\psi = X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z) = ABC\sin\alpha x\,\sin\beta y\sin\gamma z$$

$$= \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n\pi}{a}x\cdot\sin\frac{\ell\pi}{b}y\cdot\sin\frac{k\pi}{c}z\cdot$$

وفي حالة إذا كان الصندوق مكعب الشكل فإن : $a = b = c = L$ ، حيث L طول حرف المكعب .

$$\therefore \quad E_{n,\ell,k} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(n^2 + \ell^2 + k^2\right)$$

$$, \quad \psi_{n,\ell,k} = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\frac{n\pi}{L}x \ \sin\frac{\ell\pi}{L}y \ \sin\frac{k\pi}{L}z$$

مثال : أوجد $\langle p^2\rangle , \langle x^2\rangle$ في حالة حركة جسيم حرفي صندوق ذي ثلاثة أبعاد حيث :

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x\sin\frac{n_y\pi}{b}y\sin\frac{n_z\pi}{c}z$$

الحـــل :

$$\langle x^2\rangle = \int \psi^* x \psi \, dx$$

$$= \frac{8}{abc}\int_0^a\int_0^b\int_0^c x^2 \sin^2\frac{n_x\pi}{a}x \sin^2\frac{n_y\pi}{b}y \sin^2\frac{n_z\pi}{c}z \, dx\, dy\, dz$$

$$= \frac{8}{abc}\int_0^a x^2 \sin^2\frac{n_x\pi}{a}x\, dx \int_0^b \sin^2\frac{n_y\pi}{b}y\, dy \int_0^c \sin^2\frac{n_z\pi}{c}z\, dz$$

$$= \frac{8}{abc}\left[\int_0^a x^2 \sin^2\frac{n_x\pi}{a}x\, dx\right]\cdot\frac{b}{2}\cdot\frac{c}{2}$$

$$\therefore \langle x^2\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a x^2 \sin^2\frac{n_x\pi}{a}x\, dx \qquad \text{———— (1)}$$

ولكن :

$$\int_0^a x^2 \sin^2\alpha x\, dx = \int_0^a x^2\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos 2\alpha x\right)dx$$

$$= \left|\frac{x^3}{6}\right|_0^a - \frac{1}{2}\int_0^a x^2 \cos\beta x\, dx \qquad \text{———— (2)}$$

حيث $\beta = 2\alpha$, $\alpha = \dfrac{n_x\pi}{a}$

$$\int_0^a x^2 \cos\beta x\, dx = \frac{1}{\beta}\int_0^a x^2 d(\sin\beta x) = \frac{1}{\beta}\left[x^2\sin\beta x\Big|_0^a - 2\int_0^a x^2(\sin\beta x\, dx)\right]$$

$$= \frac{1}{\beta}\left[0 - 2\int_0^a x\sin\beta x\, dx\right] = \frac{-2}{\beta}\cdot\left[\frac{-1}{\beta}\int_0^a x d\cos\beta x\, dx\right]$$

$$= \frac{2}{\beta^2}\left[x\cos\beta x\Big|_0^a - \int_0^a \cos\beta x\, dx\right] = \frac{2}{\beta^2}\left[x\cos\beta x\Big|_0^a - \frac{1}{\beta}\sin\beta x\Big|_0^a\right]$$

$$= \frac{2}{\beta^2}[a-0] \quad = \frac{2a}{\beta^2}$$

بالتعويض في (2) نحصل على :

$$\int_0^a x^2 \sin^2 \alpha x\,dx = \frac{a^3}{6} - \frac{1}{2}\left(\frac{2a}{\beta^2}\right) \quad = a^3\left[\frac{1}{6} - \frac{1}{a^2\beta^2}\right]$$

$$= a^3\left[\frac{1}{6} - \frac{1}{4a^2\alpha^2}\right] = a^3\left[\frac{1}{6} - \frac{1}{4n_x^2\pi^2}\right]$$

وبالتعويض في (1) نحصل على :

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{a}\cdot a^3\left[\frac{1}{6} - \frac{1}{4n_x^2\pi^2}\right] = a^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x^2\pi^2}\right]$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{3}\left[1 - \frac{3}{2n_x^2\pi^2}\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (3)$$

ولإيجاد $\langle P^2 \rangle$:

$$\langle P^2 \rangle = \int \psi^* \hat{P}_x^2 \psi\,d\tau = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\,d\tau$$

$$= -\hbar^2\cdot\left(\frac{8}{abc}\right)\int_0^a\int_0^b\int_0^c\left(\frac{-n_x^2\pi^2}{a^2}\sin^2\frac{n_x\pi}{a}x\right)\cdot\ \sin^2\frac{n_y\pi}{b}y\cdot\sin^2\frac{n_z\pi}{c}z\,dxdydz$$

$$= \frac{8n_x^2\hbar^2\pi^2}{a^3bc}\left[\int_0^a \sin^2\frac{n_x\pi}{a}x\,dx\cdot\int_0^b \sin^2\frac{n_y\pi}{b}y\,dx\cdot\int_0^b \sin^2\frac{n_z\pi}{c}z\,dz\cdot\right]$$

$$= \frac{8n_x^2\hbar^2\pi^2}{a^3bc}\left(\frac{a}{2}\cdot\frac{b}{2}\cdot\frac{c}{2}\right) = \frac{n_x^2\hbar^2\pi^2}{a^2}$$

وبالمثل فإن :

$$\langle P_y^2 \rangle \quad = \quad \frac{n_y^2\hbar^2\pi^2}{b^2}$$

$$\langle P_z^2 \rangle \quad = \quad \frac{n_z^2\hbar^2\pi^2}{c^2}$$

$$\therefore \langle P^2 \rangle = \langle P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 \rangle = \hbar^2\pi^2\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_} (4)$$

مسألة (٢) :المتذبذب التوافقي البسيط في ثلاثة أبعاد (المتذبذب الأيزوتروبي) :

(The 3- dimenaional H.O – Isotropic Oscillator)

يتكون هذا المتذبذب من جسيم كتلته m يتحرك في الفراغ تحت تأثير قوة تتجه دائماً نحو مركز الحركة ولها ثلاث مركبات :

$$F_x = -k_x x \quad , \; F_y = -k_y y \quad , \quad F_z = -k_z z$$

وتكون طاقة الجهد لهذا النظام :

$$V = \frac{1}{2}\left(k_x x^2 + k_y y^2 + k_z z^2\right)$$

وتصبح معادلة شرودنجر لهذه المجموعة :

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

$$\therefore \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{1}{2}\left(k_x x^2 + k_y y^2 + k_z z^2\right)\right]\psi = 0$$

ولحل هذه المعادلة نضع $\psi = X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$

$$\therefore YZ\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + XZ\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + XY\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}$$

$$+\left[\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{mk_x}{\hbar^2}x^2 - \frac{mk_y}{\hbar^2}y^2 - \frac{mk_y}{\hbar^2}z^2\right]\cdot XYZ = 0$$

وبالقسمة على ψ أي على XYZ نحصل على .

$$\left(\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} - \frac{mk_x}{\hbar^2}x^2\right) + \left(\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} - \frac{mk_y}{\hbar^2}y^2\right)$$

$$+\left(\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} - \frac{mk_z}{\hbar^2}z^2\right) + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0$$

وهذه المعادلة تتحقق بحيث أن :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} - \frac{mk_x}{\hbar^2}x^2 = \alpha_1 \qquad , \; \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} - \frac{mk_y}{\hbar^2}y^2 = \alpha_2$$

$$\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}-\frac{mk_z}{\hbar^2}z^2=\alpha_3$$

وذلك تحت شرط أن :

$$\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=-\frac{2m}{\hbar^2}E$$

وبكتابة $E=E_x+E_y+E_z$ فإن

$$\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=\frac{-2m}{\hbar^2}\left(E_x+E_y+E_z\right)$$

$$\therefore \frac{d^2X}{dx^2}+\left(-\alpha_1-\frac{mk_x}{\hbar^2}x^2\right)X=0$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2}+\left(-\alpha_2-\frac{mk_y}{\hbar^2}y^2\right)Y=0$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2}+\left(-\alpha_3-\frac{mk_z}{\hbar^2}z^2\right)Z=0$$

وبالتعويض عن α_3 , α_2 , α_1 نحصل على الآتي :

$$\therefore \frac{d^2X}{dx^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E_x-\frac{mk_x}{\hbar^2}x^2\right)X=0$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E_y-\frac{mk_y}{\hbar^2}y^2\right)Y=0$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E_z-\frac{mk_z}{\hbar^2}z^2\right)Z=0$$

ويمكن كتابة هذه المعادلات في الصورة التالية :

$$\left.\begin{aligned}\therefore \frac{d^2X}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_x-\frac{1}{2}k_x x^2\right)X=0\\ \frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_y-\frac{1}{2}k_y y^2\right)Y=0\\ \frac{d^2Z}{dz^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_z-\frac{1}{2}k_z z^2\right)Z=0\end{aligned}\right\}\qquad\_\_\_\_\_(*)$$

وكل من هذه المعادلات الثلاث (*) تشكل معادلة متذبذب توافقي بسيط في بعد واحد في الإتجاهات الثلاثة z , y , z . وقد سبق حل تلك الحالة والحصول على نتائجها بالنسبة للطاقة والدالة الموجية .

الحل العام للمعادلات السابقة بالنسبة للطاقة هي :

$$E_x = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)h\upsilon_x \ , \ E_y = \left(n_y + \frac{1}{2}\right)h\upsilon_y \ , \ E_z = \left(n_z + \frac{1}{2}\right)h\upsilon_z$$

حيث :

$$\upsilon_x = \frac{\omega_x}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k_x}{m}} \ , \ \upsilon_y = \frac{\omega_y}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k_y}{m}} \ , \ \upsilon_z = \frac{\omega_z}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k_z}{m}}$$

$$n_x \ , n_y \ , \ n_z = 0 , 1 , 2 , 3 , \ldots\ldots$$

وتكون الطاقة الكلية للمتذبذب :

$$E = E_x + E_y + E_z = h\left[\left(n_x + \frac{1}{2}\right)\upsilon_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\upsilon_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\upsilon_z\right]$$

<u>حالة خاصة</u> : في حالة المتذبذب المتماثل(أو الأيزوتروبي)

(isotropic aocillitor)

حيث $\upsilon_x = \upsilon_y = \upsilon_z = \upsilon$ فإن :

$$E = h\left[\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\right]\upsilon$$

$$= h\upsilon\left[n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right] = h\upsilon\left(n + \frac{3}{2}\right) = \hbar\omega\left(n + {}^{3}\!/_{2}\right)$$

حيث $n = n_x + n_y + n_z$ يسمى العدد الكمي الكلي

(total quantum mumber)

وبالنسبة للدوال الموجية فإن :

$$X(x)=C_{nx}H_{nx}(\eta_x)e^{-\frac{1}{2}\eta_x^2}$$

حيث $\eta_x=\sqrt{\beta_x}\cdot x=\sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}}\cdot x$

$$C_{nx}=\frac{1}{\sqrt{2^{nx}n_x!}}\left(\frac{m\omega_x}{\pi\hbar}\right)^{1/4}=\frac{1}{\sqrt{2^{nx}n_x!}}\left(\frac{\beta_x}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$Y(y)=C_{ny}H_{ny}(\eta_y)e^{-\frac{1}{2}\eta_y^2}$$

حيث $\eta_y=\sqrt{\beta_y}\cdot y=\sqrt{\frac{m\omega_y}{\hbar}}\cdot y$

$$C_{ny}=\frac{1}{\sqrt{2^{ny}n_y!}}\left(\frac{m\omega_y}{\pi\hbar}\right)^{1/4}=\frac{1}{\sqrt{2^{ny}n_y!}}\left(\frac{\beta_y}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$Z(z)=C_{nz}H_{nz}(\eta_z)e^{-\frac{1}{2}\eta_z^2}$$

حيث $\eta_z=\sqrt{\beta_z}\cdot z=\sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}\cdot z$

$$C_{nz}=\frac{1}{\sqrt{2^{nz}n_z!}}\left(\frac{m\omega_z}{\pi\hbar}\right)^{1/4}=\frac{1}{\sqrt{2^{nz}n_z!}}\left(\frac{\beta_z}{\pi}\right)^{1/4}$$

وتكون الدالة الموجية الكاملة :

$$\begin{aligned}\psi_{n_xn_yn_z}&=X(x)Y(y)Z(z)\\&=C_{n_x}C_{n_y}C_{n_z}H_{nx}(\eta_x)H_{ny}(\eta_y)H_{nz}(\eta_z)\cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\eta_x^2+\eta_y^2+\eta_z^2\right)}\\&=C_{n_x,n_y,n_z}H_{nx}(\eta_x)H_{ny}(\eta_y)H_{nz}(\eta_z)\cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\beta_xx^2+\beta_yy^2+\beta_zz^2\right)}\end{aligned}$$

حيث :

$$C_{n_x,n_y,n_z} = C_{nx} \cdot C_{ny} \cdot C_{nz} \cdot$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^{nx+ny+nz} n_x! n_y! n_z!}} \left(\frac{\beta_x \beta_y \beta_z}{\pi^3} \right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\beta_x = \frac{m\omega_x}{\hbar}, \beta_y = \frac{m\omega_y}{\hbar}, \beta_z = \frac{m\omega_z}{\hbar}$$

<u>في حالة المتذبذب الأيزوتروبي (المتماثل) :</u>

$$\upsilon_x = \upsilon_y = \upsilon_z = \upsilon$$

$$\therefore \omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$$

$$\therefore \beta_x = \beta_y = \beta_z = \beta = \frac{m\omega}{\hbar}$$

العدد الكمي الكلي : $n_x + n_y + n_z = n$

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = C_{n_x,n_y,n_z} \cdot H_{n_x}(\eta_x) H_{n_y}(\eta_y) H_{nz}(\eta_z) e^{-\frac{1}{2}\beta(x^2+y^2+z^2)}$$

$$C_{n_x,n_y,n_z} = \frac{1}{\sqrt{2^n n_x! n_y! n_z!}} \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} = \frac{1}{\sqrt{2^n n_x! n_y! n_z!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}}$$

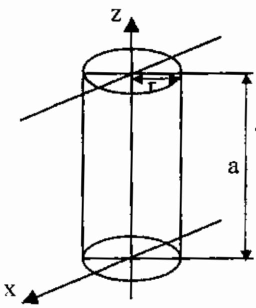
<u>**مسألة (٣) : ــ حركة جسيم داخل صندوق أسطواني**</u>

<u>**(Cylindrical pot. Box)**</u>

يتحرك جسيم كتلته m_0 داخل صندوق جهد أسطواني الشكل بحيث أن الجهد يساوي صفراً عند $r \geq (x^2 + y^2)$, $0 \leq z \leq a$ ويساوي مالا نهاية فيما عدا ذلك . (أنظر الشكل المرافق) .

(أ) أكتب معادلة شرودنجر لهذه المسألة مستخدماً الإحداثيات الإسطوانية وبين كيف تفصلها إلى ثلاث معادلات مستقلة تعتمد على (ρ, ϕ, z) .

(ب)كيف توجد الدوال الذاتية للمعادلات الخاصة بالمتغيرات الثلاثة (ρ,ϕ,z) .



(ت)استنتج القيم الذاتية للطاقة المسموح بها لهذا النظام في الحالة العامة وفي الحالة الأرضية (.ground State).

الحـل :

مؤثر لابلاس في حالة الإحداثيات الإسطوانية :

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

وتصبح معادلة شرودنجر في حالة صندوق الجهد الإسطواني : ـــ

$$\frac{-\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] = E\psi$$

لحل تلك المعادلة نستخدم طريقة فصل المتغيرات :

نفرض أن :

$$\psi(\rho,\phi,z) = R(\rho)\cdot\Phi(\phi)\cdot Z(z)$$

$$\therefore \frac{\Phi\cdot Z}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial R}{\partial\rho}\right) + \frac{R\cdot Z}{\rho^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + R\cdot\Phi\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E\psi$$

وبالقسمة على ψ أي على $R\Phi Z$ ووضع $\frac{2m_0}{\hbar}E = \varepsilon$

$$\therefore \frac{1}{\rho R}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial R}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\varepsilon$$

$$\therefore \frac{1}{\rho R}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial R}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = -\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + \varepsilon\right) = -\lambda^2$$

حيث λ^2 ثابت .

$$\therefore \frac{\rho}{R}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial R}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}=-\lambda^2\rho^2$$

$$\therefore \frac{\rho}{R}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial R}{\partial\rho}\right)+\lambda^2\rho^2=-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}=m^2$$

حيث m^2 ثابت آخر

وذلك لأنه عندما يكون هناك طرفان متساويان في معادلة وكل منهما يعتمد على متغير يختلف عن المتغير الذي في الطرف الأخر فإن كل طرف يجب أن يساوي نفس الثابت . وعلى هذا الأساس فإننا نحصل على المعادلات التفاضلية الأتية :

(معادلة Φ) $\qquad$ $$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+m^2\Phi=0 \qquad (1)$$

(معادلة Z) $\qquad$ $$\frac{d^2Z}{dz^2}+\left(\varepsilon-\lambda^2\right)Z=0 \qquad (2)$$

(معادلة R) $\qquad$ $$\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right)+\left(\lambda^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R=0 \qquad (3)$$

ولإيجاد الحلول لتلك المعادلات الثلاثة :

(١) <u>معادلة</u> Φ : وهي معادلة تفاضلية خطية ذات معاملات ثابتة حلها العام :

$$\Phi(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \qquad , m=0,1\pm,2\pm,\dots\dots$$

(٢) <u>معادلة</u> Z : والحل العام لها هو :

$$Z(z)=A\,e^{i\sqrt{\varepsilon-\lambda^2}\,z}+Be^{-i\sqrt{\varepsilon-\lambda^2}\,z}$$

وبتطبيق الشروط الحدية نجد أن :

$$Z(0) = A + B = 0 \qquad \therefore A = -B$$

$$Z(z) = C \sin \sqrt{\varepsilon - \lambda^2}\ z$$

وعندما $z = a$ فإن

$$Z(a) = C \sin \sqrt{\varepsilon - \lambda^2}\ a = 0$$

وهذا يستدعي أن تكون $\sqrt{\varepsilon - \lambda^2}\ a = \ell \pi$

حيث :

$$\ell = 1,2,3,\ldots\ldots$$

$$\therefore \sqrt{\varepsilon - \lambda^2} = \frac{\ell \pi}{a} \qquad \therefore Z(z) = C \sin\left(\frac{\ell \pi}{a} z\right)$$

ولإيجاد C :

$$1 = \int_{z=0}^{z=a} Z^2(z) dz = C^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\ell \pi}{a} z\right) dz = C^2 \frac{a}{2}$$

$$\therefore \quad C^2 = \frac{a}{2} \qquad \therefore C = \sqrt{\frac{a}{2}}$$

$$\therefore \quad Z(z) = \sqrt{\frac{a}{2}} \sin\left(\frac{\ell \pi}{a} z\right).$$

(٣) معادلة R : ـــ بوضع $\eta = \lambda \ell$ فإن معادلة R تأخذ الصورة :

$$\eta^2 \frac{d^2 R}{d\eta^2} + \eta \frac{dR}{d\eta} + \left(\eta^2 - m^2\right) R = 0$$

وتسمى هذه المعادلة معادلة بسل(Bessel's equation)والحل العام لها يكتب بالصورة :

$$R_m(\eta) = J_m(\lambda\rho)$$

حيث $J_m(\lambda\rho)$ تسمى دالة بسل (Bessel's function) وعندما $\rho = r$ فإن الشروط الحدية تتطلب أن تكون :

$$R_m(\lambda r) = J_m(\lambda r) = 0$$

وتعطي جذور هذه المعادلة قيم λ بدلالة r .

وتصبح الدالة الموجية الكاملة لهذه المسألة

$$\psi_{m,\ell}(\rho,\phi,z) = R(\rho)\cdot\Phi(\phi)\cdot Z(z)$$
$$= C_{m,\ell}\cdot J_m(\lambda\rho)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\ell\pi}{a}z\right)$$

حيث $C_{m,\ell}$ ثابت المعايرة للدالة $\psi_{m,\ell}$

<u>**ولإيجاد الطاقة :**</u> حيث أن :

$$\sqrt{\varepsilon-\lambda^2} = \frac{\ell\pi}{a}$$

$$\therefore \varepsilon-\lambda^2 = \frac{\ell^2\pi^2}{a^2}$$

$$\therefore \varepsilon = \frac{\ell^2\pi^2}{a^2}+\lambda^2 ; \ell = 1,2,3,....$$

ولكن :

$$\varepsilon = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$\therefore E = \frac{\hbar^2}{2m_0}\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\ell^2\pi^2}{a^2} + \lambda^2\right)$$

وتسمى الحالة التي تتميز بأن $m = 0, \ell = 1$ بالحالة الأساسيةأو الحالة الأرضية (ground State) وطاقتها هي :

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\pi^2}{a_2} + \lambda^2\right)$$

وتوجد λ في هذه الحالة من المعادلة $J_0(\lambda r) = 0$

وباستخدام الجداول الخاصة بتلك الدوال نجد أن $J_0(2\cdot 405) = 0$

ومنها نجد أن $\lambda r = 2\cdot 405$

$$\therefore \lambda = \frac{2\cdot 405}{r}$$

$$\therefore E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{(2\cdot 405)^2}{r^2}\right]$$

وهو المطلوب .