الفصل الثالث

الجسيم في الصندوق

The Particle in Box

يوجد فقط بعض المواقع من حيث الحل التام لمعادلة شرودنجر يمكن الحصول عليها وبعض من هذه الإفتراضات فحسب تقترب إلى الأوضاع الحقيقية وأيضاً تخدم الغرض للشرح التطبيقى لمعادلة شرودنجر للمسألة الإفتراضية الإعتبارية وكذلك أيضاً بعض المفاهيم لميكانيكا الكم سيستفاد منها.

إعتبار جسيم فى أحد أبعاد الصندوق — Particle in one-dimensional box

فلنفترض جسيم ذات كتلة (m) يتحرك فى إتجاه واحد فى أحد أبعاد الصندوق على طول المحور السينى (x). ونفترض ايضاً التحرك بين x=o ، x=a وأن طاقة الوضع بصفر وخارج هذه المنطقة طاقة الوضع لا نهائية. وبرسم طاقة الوضع مقابل المسافة تحت تلك الظروف سوف يتم تخطيطها كما فى الشكل (1). وخارج الحدود x=0 إلى x=a فإن الجسيم سوف يأخذ طاقة وضع لا نهائية. هذا بوضوح غير ممكن وأن إحتمالية وجود الجسيم خارج هذا النطاق المحدد للمنطقة بصفر. ولهذا السبب المشكلة فى بعض الأحيان تعرف بالجسيم فى مسألة الصندوق، ومثلما يكون الجسيم فى داخل الصندوق فقط هو حاصل ضرب $\psi\psi^*$ ومن هنا ψ يجب أن تكون بصفر عندما $(0 \geq x \geq a)$.

ففى داخل الصندوق (v=0)، وشكل أحد الأبعاد لمعادلة شرودنجر ستصبح فى المعادلة (72) فى الفصل الثانى على النحو التالى :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\,\psi = 0 \qquad -1$$

ومن المعادلة (72) للفصل الثانى، فالحل للمعادلة (1) يمكن كتابتها كما يلى:-

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx \qquad -2$$

حيث

$$k^2 = 8\,\pi^2\, m\, E/h^2 \qquad -3$$

وتكون المعادلـة (2) الحل العام للمعادلـة (1) حيـث A , B ثوابت إختيارية، ولكن لكى توجد دالـة ذاتـية eigen function للـنظام، فسوف ندخل قيود علـى المعادلـة (2) وهـذه النشـأة مـن الظروف المحددة للمشكلة. كمثال

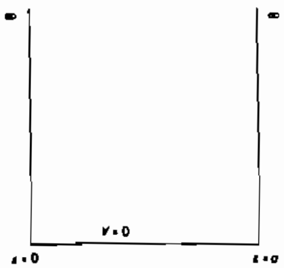

Fig. (1): one-diemnsional potential box

من المعروف أنه عندما x = 0 ، ψ=0 وبوضع x=0 فى المعادلة (2) نحصل على:

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

فمثلما sin 0 = 0 ، cos 0 = 1 ، ψ = B. المشكلة الخاصة، على اى حال. تحتاج أن ψ=0 عندما x=0 ، ومن هذه فمن الواضح أن القيمة الثابتة B تكون بصفر. والمعادلة (2) قد تختصر إلى : -

$$\psi = A \sin k x \qquad -4$$

الحيثيات الأخرى للمشكلة وهى أن ψ = 0 عندما x = a وبالإستبدال لتلك القيم فى المعادلة (4) لتعطى :

$$A \sin k a = 0 \qquad -5$$

وعليه فان جيب الزاوية تكون فقط بصفر عندما تكون الزاوية نفسها بصفر أو مساوية للعدد الصحيح مضروب π - النصف قطرية. ولو أن الزاوية نفسها بصفر ثم ψ تصبح بصفر لأى مكان داخل الصندوق وهذه الحيثية ليست مقبولة مثلما الجسيم فى أى مكان فى الصندوق. ومن الواضح من المعادلـة (5) وبناءاً عليه فإن Ka = nπ حيث (n) تأخذ الأرقام .(1, 2, 3, ...)

ومن هنا k = nπ/a إحتياطات ضرورية للحل لمعادلة الموجه لتكون مقبولة. بمعنى تكون دالة ذاتية للنظام eigen function. وبتطبيق هذه الظروف للمعادلـة (4) فإن دالة ذاتية ψ للنظام تعطى بواسطة :

$$\psi_n = A \sin \frac{n\pi}{a} x \qquad -6$$

إذاً الآن يمكن تعيين الطاقة الكلية.. المعادلة (3) يمكن كتابتها كما يلي :-

$$E = k^2 h^2 / 8\pi^2 m$$

وبالإستبدال $(n\pi/a)$ للمقدار (k)، قيمة ذاتية (E_n) تكون : -

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m\,a^2} \qquad -7$$

والعدد (n) يعرف بعدد الكم ويجب أن نلاحظ أن طاقة الجسيم لا يأخذ مدى مستمر للقيم ولكن مكمه فى وحدة المقدار $h^2/8m\,a^2$. والمضروب يصبح $1, 4, 9, 16,...n^2$.

ولنا أن نشير لما سبق من أن (n) لا تأخذ صفر، مثلما بالتالى طاقة الجسيم لا تأخذ صفر وأقل قيمة كانت $h^2/8m\,a^2$ عندما $n=1$: كما أن هذه تعرف بطاقة نقطة الصفر للنظام وهذه صورة لكل الأنظمة حيثما تكون الحركة إهتزازية. وصورة الجسيم فى الصندوق يكون نظامه إهتزازى، وله أن يتحرك للإتجاه الأمامى والخلفى على طول المحور السينى بين النهايات $x = 0$, $x = a$ والرسم البيانى لمستوى الطاقة للجسيم كما فى الشكل (2) لأول أربع مستويات. فدالة ذاتية مثل ψ وإحتمالية التوزيع ψ^2 يمكن أيضاً رسمها فى الشكل (2)، حيث مستويات الطاقة المناسبة المستخدمة للمحور السينى لتلك الدلات.

وبالنسبة للحالة ذات الطاقة الأقل يكون من الملائم نصف الطول الموجى لدالة الموجه فى الصندوق، كما لا يوجد نقطة داخل الصندوق، حيث ستصبح السعة لدالة الموجه بصفر، مثل تلك النقط تعرف بالعقدة ويمكن أن تراها من الشكل (2). عدد العقد كثيرة، وكمية الطاقة الحركية كثيرة وفى هذه الحالة المحددة يكون مجموع الطاقة $(v=0)$ للنظام.

ولأى قيمة لأعداد الكم فإن طاقة الجسيم تتناسب عكسياً لكتلة الجسيم ولمربع طول الصندوق. أيضاً لنا أن نقدر كلما الجسيم يصبح أكثر جسامه أو الصندوق طويل فإن مستويات الطاقة تصبح أكثر متقاربة المسافة. هذه النتيجة وهى أن الكلاسيكية (التقليدية) الميكانيكية سوف تعطى لمشكلة مشابهه على تدريج واسع. كمثال: فى كرة المضرب ترتد للخلف أو للأمام بين حائطين حيث يمكن إمتلاك أى طاقة.

وطاقة الكم فى الحالة تعطى نفس النتيجة. للطاقة الكلاسيكية وذلك لنظام يأخذ مثلاً الأبعاد $8m\ a^2 >> n^2 h^2$ هذا التفسير للأساس المتناظر الذى ينص على أن فى الحد الأقصى (النهائى) عندما تصف أعداد الكم لنظام ما تصبح أكثر، فإن نتيجة ميكانيكا الكم يجب أن تصبح متماثلة مع النتيجة التقليدية.

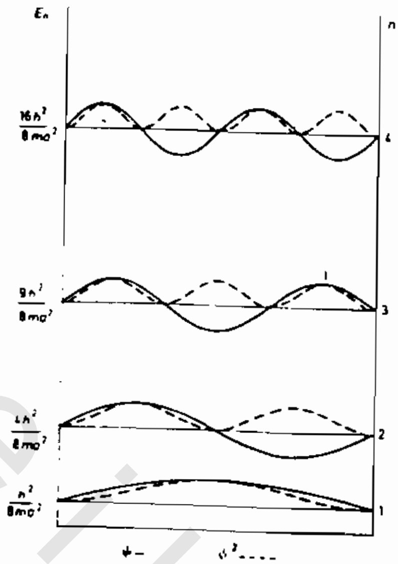

Fig. (2): Energy level diagram with eigen functions and probability distributions.

معادلة دالة الموجه : Normalisation of wave functions

لقد لاحظنا فى الفصل الأخير أن الإحتمالية لإيجاد الجسيم فى إحدى النقاط (dx) ستتناسب لحاصل ضرب ψ فى ψ°. فى حالة الجسيم فى الصندوق التى تعطى دالة ذاتية بالمعادلة (6) لا تحتوى على الحد [$\sqrt{(-1)}$]= i، وهكذا فأن المقابل أو المناظر ψ° يأخذ نفس ψ وأن:-

$$\psi\psi^\circ dx = \psi^2\ dx$$

ومن المفيد أيضاً لو الحد الأيمن من المعادلة $\psi^2 dx$. ليست بالضبط تتناسب مع الإحتمالية ولكن حقيقة مساوية لها. ففى معادلة الموجه التى أعطيت بالمعادلة (6) وهى:

$$\psi_n = A \sin \frac{n\pi}{a} x \qquad - 6$$

حيث A- ثابت إحتياطى (Arbitrary constant) وتكون قيمته حيث تختار لتطابق أى ظرف شريطة القيم الذاتية لا تتأثر (eigen values) وقيمة الثابت (A) ربما تختار بحيث أن ($\psi^2 dx$) تكون مساوية للإحتمالية لإيجاد الجسيم فى إحدى النقاط dx.

ويكون الجسيم فى إحدى الأمكنة أو فى أى مكان بين تلك النهايات $x=0$، $x=a$، بحيث أن الإحتمالية لوجود هذا الجسيم بين تلك النهايات تكون الوحدة، ومن هنا: -

$$\left\{ \int_0^a \Psi^2 dx = 1 \right\} \qquad -8$$

بفرض تلك الظروف مع ملازمة النتائج للقيم لأى ثوابت فى معادلة الموجه والتى تعرف بمعادلة أو مساواة معادلة الموجه.

المعادلة (8) تعتبر الحالة العامة التى تأخذ الشكل : -

$$\int \psi\psi^{\circ} d\tau = 1$$

حيث يشير التكامل بأنه تكامل على كل الأمكنة حيثما يوجد الجسيم وفى أى مكان.

وبالنسبة لجسيم فى الصندوق فالمعادلة (8) تصبح:

$$\int_0^a \left[A \sin \frac{n\pi}{a} x \right]^2 dx = 1$$

or
$$A^2 \int_0^a \left[\sin^2 \frac{n\pi}{a} x \right] dx = 1 \qquad -9$$

حيث $\sin^2 \alpha = \frac{1}{2}(1-\cos 2\alpha)$ والمعادلة (9) تكتب :

$$\frac{1}{2} A^2 \int_0^a \left[1 - \cos \frac{2n\pi}{a} x \right]^2 dx = 1$$

من حيث
$$\frac{1}{2} A^2 \int_0^a \left[x - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{a} x \right]_0^a dx = 1$$

$$\frac{1}{2} A^2 \int_0^a \left[a - \frac{a}{2n\pi} \sin 2n\pi \right] = 1$$

متذكرين أن (n)- عدد صحيح، الشق الثانى فى الأقواس فى المعادلة السابقة تحتوى حيث الزاوية العدد الصحيح (n) مضروبة فى 2π النصف قطرية. فأى زاوية التى تشبه تلك لجيب الزاوية بصفر بحيث أن التعبير السابق يصبح : -

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

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

ومعادلة دالة الموجه تعطى بواسطة

$$\psi_n = \left\{ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \right\} \qquad -10$$

وإحتمالية إيجاد الجسيم عند قيمة محددة لـ (x) تعطى بهذه العلاقة :

$$\psi_n^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \qquad -11$$

ويمكن أن نرى من الشكل (2) أن إحتمالية إكتشاف الجسيم عند العقدة تكون صفر والمعادلة (11) تشير إلى أن الإحتمالية تأخذ أعلى قيمة (2/a) بين العقد. ونلاحظ أنه بالنسبة لمستوى الطاقة الأقل فأعلى إحتمالية تحدث عند نهاية المطاف للجسيم. علاوة على ذلك، فكلما يصبح عدد الكم كبير جداً، ستصبح نقاط أعلى الإحتمالية عديدة جداً وتكون متقاربة. وكلما كانت المسافة بين النقاط أعلى إحتمالية فتصبح كذلك صغيرة على قياسها وتكون منتظمة على طول الصندوق حيث أنها تعتبر نتيجة تقليدية.

التعامديات : (الإحصائية المستقلة) Orthogonality

هذه صفة رياضية للدلات الذاتية وهى لو أن إثنين من الدلات الذاتية كانتا حلول تامة لدالة الموجه بعدئذ يصبحان مستقلين. وهذا يعنى أنهما مستقلين واحد عن الآخر. والناتج الصحيح على كل المساحات فى ذلك النظام المتواجد يكون مساوياً صفر. فبالنسبة للحالة العامة الآتية : -

$$\int \psi_n \psi_m \, d\tau = 0 \quad \text{حيث} \quad n \neq m$$

أو وبالنسبة للحالة الخاصة للجسيم فى الصندوق

$$\int_0^a \psi_n \psi_m \, dx = 0 \quad \text{حيث} \quad n \neq m$$

وحيث أن كلاً من الرموز (n, m) مختلفين فى القيمة لعدد الكم. والإستقلالية نموذج من الدوال الذاتية لجسيم فى صندوق، من السهل جداً أن نراها فى الرسم لدوال الموجه فى حالات عندما واحد لأعداد الكم يكون عدد زوجى ولا يكون عدد مفرد. شكل (3) يبين الدوال الذاتية بالنسبة لعدد الكم n=1 ستكون m=2. نفترض القيم ψ_2, ψ_1 عند قيمتين لـ (x) حيث أنهما منتظمان أو متماثلان وموضوعين حول نقطة منتصفة فى الصندوق. هذه القيم سنرمز لهما بالرموز $x=x_1$، $x=(a-x_1)$.

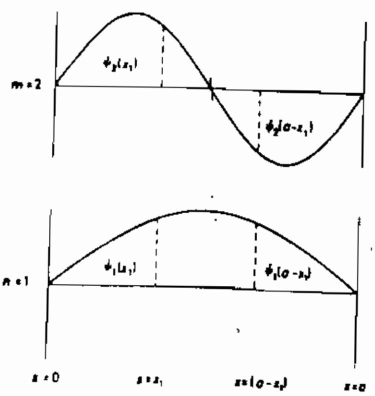

Fig. (3) orthogonality

والآن

$$\psi_2(x_1) = -\psi_2(a - x_1)$$

وكذلك

$$\psi_1(x_1) = \psi_1(a - x_1)$$

فمن الواضح نجد أن : -

$$\psi_2(x_1) \cdot \psi_1(x_1) = -\psi_2(a - x_1) \cdot \psi_1(a - x_1)$$

نتائج التكامل لحاصل ضرب $(\psi_1.\psi_2)$ لكل قيم (x) عبارة عن مجموع كل من $(\psi_1\psi_2)$ عند كل قيم (x)، ومن الإعتبارات السابقة، فلربما أن نفهم أن مجموع كل من $(\psi_1\psi_2)$ لكل قيم x ما بين $x=0$ ، $x=a/2$. الطرف الأيسر للصندوق سيكون سارياً لمجموع كل من $(\psi_1\psi_2)$ للطرف الأيمن من الصندوق لكل قيم (x) ما بين $x=a/2$ ، $x=a$. وتكامل حاصل الضرب من $x=0$ ، $x=a$ يجب على أى حال بصفر.

الوضع فى الإستقلالية لا نستطيع بيسر فهمها فى الأجزاء التخطيطية عندما تكون كل من (n, m) زوجى أو فردى، ولكن الإقتراح المفترض ربما يبرهن لأى قيمة لكل من (m, n).

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

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

بعد ذلك $2 \sin \alpha \sin \beta = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$، فالتكامل ربما يكتب كما يلى:-

$$\int_0^a \psi_n \psi_m \, dx$$

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

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

$$= \frac{1}{a} \int \left\{\frac{a}{(n - m)\pi} \sin\left((n - m)\pi\right) - \frac{a}{(n + m)\pi} \sin\left((n + m)\right)\pi\right\}$$

إذاً الفرق والجمع لكلا أعداد الكم (m , n) يجب أن يكون عدد صحيح، وحيث أن كل الزوايا بصفر، وبالتالى التكامل يصبح بصفر.

الدوال الموجبة المتعادلة (normalized) والمستقلة إحصائياً (orthogonal) والتى يقال عنهما بمفهوم التسوية (orthonormal) أو مصحح التعادل.

لقد بينا فيما سبق أن الدلات الذاتية فقط حلول تامة لمعادلة الموجه لزوجين مستقلين إحصائياً (orthogonal).وفى عديد من المسائل الكيميائية حلول تقريبية فقط وقد أعطيت أو تم الحصول عليها وهذه ليست بالضرورة مستقلة إحصائياً (orthogonal). وفى هذه الحالة يجب جعلها مستقلة إحصائياً.

معامل ميكانيكا الكم — Quantum mechanical operators

قبل أن نقر بمعامل ميكانيكا الكم من الأرجح أو الأفضل أن نوضع معنى جزئية المعامل (operators) من المفهوم الرياضى. وهكذا فالعلاقة $\sqrt{\ }$ تعتبر معامل، التعليمات أو الدرس هو أخذ الجذر التربيعى للكمية التابعة له مثال: -

$$\sqrt{x^4} = x^2$$

وعمل المعامل دائماً على الدوال المكتوبة على اليمين لها. وكمثال آخر لمعامل رياضى وهو التفاضل. فالرمز d/dx ما هو إلا عبارة معامل الذى يفيد أن الدالة الآتية يجب أن تفاضلها بالإحتفاظ لـ (x).وهكذا.

المضاعفات ربما تشير مثل المعامل ولهذا المعامل (x) وهكذا يعنى عملية ضرب الدالة الآتية فى (x) مثل :

$$x \cdot x = x^2$$

معاملات ربما تحدث أيضاً بالإرتباط. مثل هذه المعاملات (x (d / dx ، حيث تفيد أن الدالة القادمة يجب أولاً تفاضلها مع الأخذ فى الإعتبار للمقدار (x) ثم تضرب فى (x). وهكذا.

$$x \cdot \frac{d}{dx} x^4 = x.\ 4x^3 = 4x^4$$

ومع العمليات المرتبطة، يكون المعامل المستخدم. مبتدءاً بأخذ اليد اليمنى. ولنا أن نلاحظ أنه بالنسبة لمعامل التفاضل:

$$\frac{d}{dx}(x^5 + 2x^3) = \frac{d}{dx}x^5 + \frac{d}{dx^2}x^3$$

فالمعامل الذى يفيد فى هذه الحالة يعرف بالمعامل الخطى.

والمعامل ($\sqrt{\ }$) ليس بمعامل خطى ثم بعد ذلك

$$\sqrt{(16+25)} \neq \sqrt{(16)} + \sqrt{(25)}$$

بأخذ توضيح جزء المعامل. إعتبر أحد الأبعاد فى معادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\psi = 0$$

ربما يمكن كتابتها كما يلى :

$$\frac{-h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

أو

$$\left(\frac{-h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\right)\psi = E\psi \qquad -12$$

ولنا أن نقول أن الطاقة الكلية (E) للنظام هى عبارة عن مجموع الطاقة الحركية (T) والطاقة الوضعية (V).

$$E = T + V \qquad -13$$

وبمقارنة المعادلة (13) بالمعادلة (12) فإننا نتوقع أنه يوجد بعض المتناظرات بين الشق الأول فى القوس للمعادلة (12) والطاقة الحركية للنظام. وتتعين الطاقة الحركية بواسطة:-

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{P^2}{2m}$$

حيث P- العزم الزاوى ولهذا فالمعادلة (13) ربما تكتب فى الشكل.

$$\frac{P^2}{2m} + V = E \qquad -14$$

وبمقارنة المعادلة (12) بالمعادلة (14). فإننا نلاحظ أن P^2 فى المعادلة 14 قد استبدلت بالمعامل فى المعادلة (12).

$$- \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2}$$

فيما بعد لنا أن نقول أن (P) قد إستبدلت بالمعامل

$$\frac{h}{4\pi i} \cdot \frac{d}{dx}$$

إذا

$$P^2 = P.P$$

and
$$\frac{h}{4\pi i} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{h}{4\pi i} \cdot \frac{d}{dx}\right) = - \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2}$$

تلك الإستبدالية للكميات الملاحظة فيزيائياً بواسطة المعامل تكون جزء للنظرية العامة لميكانيكا الكم وتجسد فىالتقريب الإفتراضى لميكانيكا الكم والتى سوف نتناولها فيما بعد.

إفتراضات ميكانيكا الكم — The postulates of quantum mechanics

فى هذا الكتاب قد أعطيت معادلة شرودنجر Schrodinger equation من العلاقة الكلاسيكية وذلك للموجه القائمة التوافقية ومعادلة دى بروجلى de Broglie equation. هذا التقارب المستخدم قد يؤخذ لتفسير بعض المفاهيم الأساسية، ولكن على العموم، الأساس لميكانيكا الكم هو الأفضل إتخاذه لعمل مجموعة إفتراضات من تلك المعادلات للحركة المشتقة. والإفتراضات العامة بعد ذلك تؤهل لمسائل هذه المعادلات لتطابق العملى. هذا التقريب البديهى، ربما يكون مصاحب للقارىء فى مراجع أخرى، ولكن ربما يستخدم لإعطاء مثال بسيط هنا وذلك لشرح هذه النقطة.

وإنه من المناسب أن نرمز إلى x. x. x. x. x. x. x. x مثل x^8 ولهذا نفترض أن:

$$x^8 = x.\ x.\ x.\ x.\ x.\ x.\ x.\ x$$

على العموم (x^n) تعنى أن x مضروبة عدة مرات للرقم (n) نفسه.

ربما تلك الملاحظة أن تمدد لتلك الإعتبارات : -

$$\frac{y.y.y.y}{y.y} = y.\ y$$

or $$\frac{y^6}{y^4} = y^2 \quad or \quad \frac{y^m}{y^n} = y^{m-n}$$ -15

ففرضنا أن m > n، ولو أن تلك الحقيقة جسدت فى المعادلة (15) وطبقت عندما (n=m) فإنها تعطى: -

$$\frac{x^m}{x^n} = \frac{x^m}{x^m} = x^0$$ -16

وهذا يعنى أن :

$$\frac{x^m}{x^m} = 1 = x^0$$

بمفهوم الإفتراض الثانى للمعادلة (15) تكون الآن بالنسبة $m \geq n$

ولو أن المعادلة (15) حيث $m < n$ فمعنى آخر نتيجة تعطى من تلك المعادلة كمثال:

$$\frac{x^6}{x^8} = x^{-2}$$

وهذا يعنى لتلك المعادلة أن مضروب الحد الأيمن مضروب فى نفسه مرتين ولكن بالسالب وليس معنى يعطى فيه موجيه لمقلوب الحد الأيمن :-

$$\frac{x^6}{x^8} = \frac{1}{x^2} = x^{-n} = \frac{1}{x^n}$$

ومع تلك المعادلة فإنها تعطى إضافة تضامنية (15) لتساعد لأى قيمة من قيم (m,n).ولكى نستطيع أن نتناول مع المعاملات الداخلة للأسس للأعداد. فإننا نأخذ ثلاثة أساسيات والقادرة لتمكننا لمعاملات مختلفة لتؤدى المساعدة للمعادلة (15) لإيجاد نتائج متماسكة بنفسها.

وإفتراضات ميكانيكا الكم إلى حد كبير متماثلة فى الأساس. حيث أنها تتكون من عدة حقائق أو مجموعة حقائق بحيث لو أجريت، تؤدى إلى نتائج متماسكة وقوية. وهذه الإفتراضات فى حد ذاتها ليست معقدة إلى حد كبير كما هو مبين من الأمثلة السابقة ولكن اعتبرت فيما بعد بعض المناقشات يجب أن تساعد لتوضيح معاملاتها. لأجل تلك الأغراض، سوف تعطى فى هذا الكتاب إفتراضين وهما :

الإفتراض الأول **Postulate 1.**

نظـام ميكانيكـا الكم للجسيمـات (n) يمكن وصفهـا كـاملاً بالدالـة $\psi(q_1, q_2 \ldots q_{3n-1}$ والتى تعرف بدالـة الموجه: حيث تعين كل الكميات المقاسـة للنظام. ودالـة الموجه المطلوبة يجب أن تكون محددة، دالـة مستمرة، أحاديـة القيمة والتى تصبح صفر عند لا نهاية. وأنها يجب أن تتضمـن أعداد صحيحـة مربعة والإشتقاق الأول للمقدار $(d\Psi/dq_1)$ أيضاً يجب أن تكون مستمرة وأن ψ تفسر فيزيائياً بالحد $(\psi\psi^\circ\, dq_1 \ldots dq_n)$ الواقع إحتماليـة وجود الجسيم بين المحاور للجسيم فى المدى $(q_1 \ldots q_{3n}$ and $q_1 + dq_1 \ldots q_n + dq_{3n})$.

من هنا كل جسيم يجب وجوده هنا فى الفراغ فى أى مكـان، وقوة إحتماليـة التكامل يجب أن يكون مساوياً الوحدة بمعنى

$$\int \psi\psi^\circ d\tau = 1$$

وهذا الإفتراض الأول يعطى المادة الإعتبارية فوق تلك النقطة وعلى الأصح النهايات الأساسية، وأنها تحتوى لبعض العوامل الإضافية التى يجب أن تكون هى دالة الموجه والتى تفى لو أنها تعتبر دالة ذاتية للنظام.

فبالنسبة لجسيم منفرد فى أحد محاور الصندوق وهذا يعنى أحد الإحداثيات فقط، بمعنى المحور (x) هو المطلوب لهذا المثال لتلك المسألة المحددة، فإن دالة الموجه هى الدالة فقط لأحد الإحداثيات $\psi(x)$. ولو أن الجسيم الموجود حر الحركة ويتحرك فى ثلاث محاور. إذا المطلوب ثلاث إحداثيات. فبالنسبة لعدد (n) جسيم فإنه يلزم (3n) محاور ثم بعد ذلك (ψ) تكون دالة لكل من $(q_1, q_2 \ldots q_n)$ حيث الرمز (q) يرمز للإحداثيات، والأهم فى ذلك الكتاب زمن الإحداثيات (t)- الغير مشتمل، لأن الزمن المستقل فقط هو الإعتبارى فى معادلة شرودنجر.

فلو أن $\psi\psi^\circ$ قد أولت كإحتمالية فإنه من المعقول إحتياج ψ أن تكون محددة، وبطريقة أخرى. وجود إحتمالية محددة لإيجاد الجسيم فى أى مكان. بمعنى آخر، وجود إحتمال إثنين أو أكثر من الإحتماليات لإيجاد الجسيم عند نقطة محددة، وفى نفس الوقت وهذه ليست ذات معنى. كما أنه أيضاً من الصعب التفهم كيف يكون الجسيم عند لا نهاية؟، لهذا فإن دالة الموجه المطلوبة تصبح صفر عند لا نهاية: قيود أخرى يمكن فرضها من الإفتراض الأول هو أن ψ وأول الإشتقاق لها مع الإحتفاظ لأى إحداثى آخر $(\partial\psi/\partial q)$ موجب

الإستمرارية. (ليس من الوهلة الأولى) لماذا يكون ذلك؟، ولكن التجربة ترى أن تلك الظروف ضرورية.

والتفسير للدالة (ψ) المشتمل فى الفرض الأول، الذى يمكن تبسيطه بإعتبار جسيم واحد فى أحد الإحداثيات للصندوق، حيث يكون أحد المحاور هو المفترض. فى هذا المحيط فإن ψ تفسر فيزيانياً بالحد المضروب $\psi\psi^{\circ}dx$، وهذا يعنى أن هذه الإحتمالية وهو وجود الجسيم فى المنطقة ما بين (x)، $x + dx$. ويمكن أن نقول أن تلك الإحتمالية لإيجاد الجسيم فى المسافة (dx).

وأخيراً: الجملة الأخيرة للإفتراض ببساطة التى تعتبر بيان كشرط للتسوية. ولنا أن نشير فى الفصل السابق أن الصفات الفيزيائية الملحوظة مثل العزم المصاحب مع المعامل وهذا الوضع سوف يقترح فى الإفتراض الثانى لميكانيكية الكم:

الإفتراض الثانى — Postulate (2)

لكل الصفات الفيزيائية الجديرة بالملاحظة للنظام فى تلك النقطة هناك تطابق لمعامل هيرميتيان الخطى (Hermitian)، والصفات الفيزيائية الملاحظة يمكن إستدلالها من الخاصية الرياضية للمعامل المتطابق:-

فلو أن الكمية الملحوظة محددة فإن قيمتها تعطى بواسطة العلاقة الآتية:

$$G\,\psi = g\psi \qquad -17$$

حيث (G) عبارة عن معامل، (g) ثابت حقيقى، حيث تكون القيمة الملحوظة. ولو أن القيمة الملحوظة ليست كمية غير محددة، فإن متوسط القيمة لها (g) سوف تعطى العلاقة:

$$g` = \frac{\int \Psi^{\circ} G \Psi d\tau}{\int \Psi^{\circ} \Psi d\tau} \qquad -18$$

ويحتوى هذا الإفتراض بعرض الفكرة الجديدة والتى يمكن توضيحها بإعتبار بعض الأمثلة. فأولى الأشياء للترسيخ هى طريقة تفسير معاملات ميكانيكا الكم.

والتعبير التقليدى للملاحظة المهمة أولاً تكتب فى جزئية المحاور، العزم والزمن، فكل المحاور والزمن (وكذلك الدوال التى تعتمد فقط على المحاور والزمن) فالطرف الأيسر لوحدة وأى مكان الذى يبين العزم فى التعبير سيستبدل بواسطة المعامل $(h/2\pi i).\ \partial/\partial q$.

ونفترض المثال الآتى وهو أن معامل ميكانيكا الكم المقابل لمجموع الطاقة المطلوبة. تقليدياً: وهو الطاقة الكلية (E) المساوية لمجموع الطاقة الحركية T. والطاقة الوضعية V، حيث التعبير التقليدى للطاقة E هـو :

$$E = T + V \qquad -19$$

وتعتمد فقط طاقة الوضع على وضعه ولهذا (V) عبارة عن دالـة فقط للإحداثيات وتكون الطاقة الكلية التى تعطى بهذه العلاقة هى : -

$$T = \frac{1}{2}\, m\, v^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{P}{2m}$$

والمعادلة (19) يمكن كتابتها فى جزنية المحاور والعزم كما يلى :

$$E = \frac{P^2}{2m} + v \qquad - 20$$

ولتفسيـر مجموع معامل الطاقة، الذى يعتبر فقط دالة للمحاور (حيث أن طاقة الوضع v فـى هـذه الحالـة علـى الجانـب الأيسر غير قابلـة للتغيير)، وجزنـية العزم (كمـية الـتحرك) تستبدل بمعامل العزم مثل $P^2 = P.P$ ويمكن إستبدالها بواسطة $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q}\right)$

فى هذه الحالة المعامل يحدث أثرا على نفسه، وبالتالى $(h/_{2\pi i}.\ \partial/_{\partial q})$ of $\partial/_{\partial q}$ هو:

$$\frac{h}{2\pi i} \quad \frac{\partial}{\partial q^2}$$

وبضرب تلك النتيجة بالمعامل المتبقى للمقدار $(h/_{2\pi i})$ لتعطى :

بينما $(i^2 = -1)$ $$-\frac{h^2}{4\pi^2}\quad \frac{d^2}{\partial q^2}$$

ولإيجاد الطاقة الكلية وذلك بإستبدال ذلك الجزء بالنسبة P^2 فىالمعادلة (20) والذى يعطى المعامل مثل :

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\ \frac{\partial^2}{\partial q^2} + v\right]$$

ويعرف المعامل المحدد للطاقة الكلية بمعامل هاميلتون Hamiltonian وعادة يرمز بالرمز (H).

لو الوضع الأهم في الطاقة الكلية للنظام يتضمن الإفتراض الثانى أى أن لو : -

$$H\psi = E\psi \qquad -21$$

حيث (E) عدد حقيقي وبعد ذلك القيمة للطاقة (E)- طاقة النظام عندما تكون فى الحالة الممثلة بواسطة ψ.

وقبل التصور للتطبيق لهذا المفهوم، لربما تستخدم لنؤكد أن ψ لا يمكن إهمالها فى المعادلة (21) ، لأن (H) عبارة عن معامل وليست ببساطة عامل مضاعف أو متكاثر. وأبسط الأمثلة توضح هذه النقطة، ولنعتبر العامل (d/dx) يعمل على الدالة e^{ax}، ثم بعد ذلك :-

$$\frac{d}{dx} e^{ax} = a\ e^{ax}$$

هذه العلاقة تشبه إلى حد كبير للمعادلة (21)، وليس من السهل إهمال تلك القيمة e^{ax}.

نقطة أخرى علاوة على ذلك باقية فى الإفتراض الثانى وهى أن شبيه المعادلة (21) سوف تعطى فقط قيمة المجموع الكلى للطاقة للنظام لو أنها كمية محددة، والقيمة المحددة هى أحد القيم التى تؤخذ لحالة النظام ولا تتأثر مع الإحداثيات وكمثال لتلك الكمية هى فى الحقيقة، طاقة الجسيم فى أحد المحاور للصندوق، وأننا نلاحظ مبدئياً لكل حالة خاصة للنظام (تعين بواسطة قيمة عدد الكم) فالطاقة تأخذ قيمة محددة، وعليه فإنه يجب أن نطبق المعادلة (21) للجسيم فى الصندوق لكى يتسنى إيجاد قيمة الطاقة للنظام.

ففى أحد المحاور للصندوق، فإن الجسيم يتحرك فى الإتجاه للمحور السينى ولهذا، يوجد فقط واحد للإحداثيات يمكن إعتباره، ومن هذا الجزء العام $(\partial^2/\partial q^2)$ تصبح d^2/dx^2 ومعامل هاميلتون يأخذ الشكل :

$$H = \left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \quad \frac{d^2}{dx^2} \ + \ v \right]$$

وبالنسبة للجسيم فى الصندوق على أى حال، طاقة الوضع بصفر ومعامل هاميلتون يختصر إلى :

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}$$

وبالإستبدال بالنسبة (H) فى المعادلة (21)

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\psi$$

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + E\psi = 0$$

حيث يمكنه كتابتها كما يلى :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0$$

وتكون هذه المعادلة بالطبع، معادلة شرودنجر للجسيم فى أحد المحاور للصندوق المعادلة (١) فى بدء هذا الفصل، والتى حلت سابقاً فى هذا الفصل أيضاً لإيجاد الدالة المناسبة للدالة (ψ_n) والطاقة المقابلة (E_n).

$$H\psi = E\psi$$

حيث يكون إذاً شكل لمعادلة شرودنجر والتى تعرف بمعادلة قيمة ذاتية حيث الدالة (ψ) هى دالة ذاتية للمعامل (H)، (E) تكون المقابلة لقيمة إيجن (ذاتية).

وللإختصار إلى حد كبير، لنا أن نقول أن الكمية الملاحظة المصاحبة لمعامل ميكانيكا الكم. عندما المعامل يؤثر على دالة الموجه، سيكون الناتج عدد حقيقى مضروب بدالة الموجه العامة لو أن : -

$$GH = g\psi$$

عموما يوجد عدة كميات مختلفة مكملة تقابل الحالات المختلفة للنظام.

إذاً : -

$$G\psi_1 = g_1\psi_1$$

$G\psi_2 = g_2\psi_2 \ldots\ldots$ وهكذا

ومن الواضح نرى أنه بالنسبة لجسيم فى الصندوق يوجد عدة حالات ممكنة وكلها توصف بدالة الموجه (ψ_n) وأن كل حالة لها طاقة مستوى (E_n). ولهذا،

$$H\psi_1 = E_1\psi_1$$

$H\psi_2 = E_2\psi_2 \ldots\ldots$ وهكذا

ومفهوم معادلة قيمة إيجن (القيمة الذاتية) يمكن الآن لأن تطبق لنحاول إيجاد عزم الجسيم فى الصندوق. عند هذه الدرجة ليس معلوم ما إذا كان العزم كمية محددة أم لا، ولكن تلك سوف تنشأ أو تستنتج من الناتج الحادث على دالة الموجه مع معامل العزم.

ومعامل العزم هو $(h/_{2\pi i}).\partial/\partial q$ ولكن مثلما يتحرك الجسيم فى الصندوق فقط فى أحد المحاور وهو المحور السينى x، ولهذا الغرض المعامل يأخذا الشكل $(h/_{2\pi i}).d/_{dx}$، والآن، لو أن : -

$$(h/_{2\Pi i}).d/_{dx}\ (\psi) = (\text{a real function})\ \psi$$

إذاً العدد الحقيقى هو قيمة للعزم للجسيم. فبالنسبة للجسيم فى الصندوق

$$\psi_n = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\sin\ \frac{n\pi}{a}$$

بالعمل على هذه الدالة مع معامل العزم : -

$$\frac{h}{2\pi i}\cdot\frac{d}{dx}\left[\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\ \sin\ \frac{n\pi}{a}\chi\right] = \frac{h}{2\pi i}\ \frac{n\pi}{a}\ \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\ \cos\ \frac{n\pi}{a}\ x$$

ومن هذا نرى أن هذه النتيجة ليست عدد حقيقى مضروب بالمقدار ψ_n وأنها على أى حال ليست ممكنة، لإيجاد العزم للجسيم بهذه الطريقة. وعلاوة على ذلك، العزم لا يمكن أن يكون كمية محددة. وأنها تركيبه للعلم. وعلى أى حال، لمحاولة إيجاد مربع العزم. فالمعامل المستخدم هو :-

$$\frac{h}{2\pi i}\ \frac{d}{dx}\left(\frac{h}{2\pi i}\cdot\frac{d}{dx}\right) = -\ \frac{h^2}{4\pi^2}\ \frac{d^2}{dx^2}$$

وبالعمل على الدالة (ψ_n)

$$-\ \frac{h^2}{4\pi^2}\ \frac{d^2}{dx^2}\left[\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\ \sin\ \frac{n\pi}{a}\chi\right] = -\ \frac{h^2}{4\pi^2}\ \frac{n\pi}{a}\ \sqrt{\frac{d}{dx}}\left(\cos\ \frac{n\pi}{a}\chi\right)$$

$$= -\ \frac{h^2}{4\pi^2}\ \frac{n^2\pi^2}{a^2}\ \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\ \left(-\sin\ \frac{n\pi}{a}\chi\right)$$

$$= \frac{n^2h^2}{4a^2}\ \psi_n$$

هذا العمل يعطى فى النهاية عدد حقيقى (وليس تخيلى مثلما (i) لا تدخل) مضروبة فى (ψ_n). والعدد الحقيقى يكون مساويا لمربع العزم والذى يعتبر عدد تام. إذاً:

$$P^2 = n^2h^2 / 4\ a^2 \qquad -22$$

ملاحظة (n)- عدد الكم، P^2 تكون مكمله بالوحدة للمقدار $h^2/4a^2$. على الرغم. القيمة P لا يمكن ايجادها من معادلة قيمة ذاتية حيث أنها ليست كمية واضحة ولكن هى متوسط لقيمة يمكن إيجادها من المعادلة (18) التى قد أعطيت فى الإفتراض الثانى :

$$g` = \frac{\int_0^a \Psi^\circ G \Psi \Psi \tau}{\int_0^a \Psi^\circ \Psi d\tau} \qquad -18$$

بتطبيق هذه المعادلة فى الشكل المناسب لإيجاد قيمة عزم الجسيم فى الصندوق:

$$P^- = \frac{\int_0^a \Psi^\circ h_{\ 2\pi i}\ d/_{dx}\ \Psi\ dx}{\int_0^a \Psi^\circ \Psi\ dx} \qquad -23$$

كما أن دالة الموجه تعين بالمعادلة (10) ولا تحتوى على أى كميات معقدة ويكون المقابل للدالة هو نفسه مثلما للدالة نفسها والمعادلة (23) ربما تكتب على الصورة :

$$P^- = \frac{\int_0^a \Psi\ h/_{2\pi i}\ d/_{dx}\ \Psi\ dx}{\int_0^a \Psi^2\ dx} \qquad -24$$

ولو دالة الموجه المعدلة قد تستخدم : -

$$\int_0^a \psi^2\ dx = 1$$

والمعادلة (24) تصبح :

$$\bar{P} = \left\{ \int_0^a \left[\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\ \sin\ \frac{n\pi}{a}\chi\right] \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{d}{dx} \left[\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\ \sin\ \frac{n\pi}{a}\chi\right]\right\} dx$$

وبأخذ المعامل المضاعف وهو $\sqrt{(2/_a)}$، $(h/_{2\pi i})$ خارج علاقة التكامل.

$$\bar{P} = \frac{2}{a} - \frac{h}{2\pi i} \int_0^a \left[\left(\sin\ \frac{n\pi}{a}\chi\right) \frac{d}{dx}\left(\cos\ \frac{n\pi}{a}\chi\right)\ \right] dx$$

وعمل التفاضل فى داخل الأقواس المربعة تتجزأ أولاً ، وتعطى : -

$$\bar{P} = \frac{h}{2\pi i} \int_0^a \left(\sin \frac{n\pi}{a}\chi\right) \frac{n\pi}{a} \left(\cos \frac{n\pi}{a}\chi\right) \Big] dx$$

أو

$$\bar{P} = \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{n\pi}{a} \int_0^a \left(\sin \frac{n\pi}{a}\chi\right)\left(\cos \frac{n\pi}{a}\chi\right) \Big] dx \qquad -25$$

حيث $\sin 2\alpha \frac{1}{2} = \sin\alpha \cos\alpha$ والمعادلة 25 تختزل إلى : -

$$\bar{P} = \frac{n\,h}{2\,a^2 i} \int_0^a \left(\sin \frac{n\pi}{a}\chi\right) dx$$

حيـث

$$\bar{P} = \frac{a}{2n\pi} - \frac{n\,h}{2a_2 i} \left[\cos \frac{2n\pi}{a}\chi\right]_0^a$$

متذكرين أن (n)- عدد صحيح وربما نرى أنه، عندما ندخل نهاية التكامل:

$$\bar{P} = 0$$

وبالطبع، متوسط العدد الكبير للقياسات للحد (P) أيضاً بصفر. ويمكننا فهم ذلك على إعتبار أن مربع العزم المعطى بالمعادلة (22) هو : -

$$P^2 = n^2 h^2 / 4\,a^2 \qquad -22$$

حيث $P = \pm\ n\,h / 2\,a$

وبالتالى: فمـع العدد الكبير للقياسات: النصف الملاحظ سوف يعطى القيمة $P = +\,nh\,/\,2a$، والنصـف الآخــر سوف يعطى $P = -\,nh/2a$. وذلك من المعلوم مقدماً ما إذا كانت النتيجة للقياس المنفرد للحد P سوف يعطى القيمة $+nh/2a$ أو $-nh/2a$. وهذا يدل على أن الجسيم له الحركة إما للأمام أو للخلف على طول الخط للمحـور السينى x. فبينما يرتحل الجسيم ناحية المحـور اليميـن يكـون بالموجـب فـتكون السـرعة وكذلـك العزم بالكمـيات الموجـيه. والعكـس فتكون السرعة والعزم بالكميات السـالبة. وعليه فإن النـاتج لكلاهمـا سوف يعتمد إتجاه حركة الجسيم عند الزمـن وقت قـياس إتجـاه الجسيم.وبـناءاً على تلك النتيجة يوجد عدم تـأكد فـى المعرفة لعزم الجسيم وعندما يكون متساو للرحلة بين القيمتين. مشيراً لعدم التأكد مثلما ΔP

$$\Delta P = nh / a$$

وأيضاً يكون عدم التأكد فى الوضع للجسيم، وهو فقط معلوم أن الجسيم فى أى لحظة فى مكان ما داخل الصندوق، بمعنى، يبين نهايتين $x = 0$ ، $x = a$. وعدم التأكد فى الوضع Δx إذاً سوف يعطى بالعلاقة :

$$\Delta x = a$$

وبالتالى سيكون حاصل الإثنين معاً هو حاصل عدم التأكد فى الحركة وعدم التأكد فى الوضع على النحو التالى :

$$\Delta P \,.\, \Delta x = (nh / a)(a) = n\,h$$

فأقل قيمة لهذا الناتج يمكن الحصول عليها عندما $n = 1$. لنحصل على

$$\Delta P \,.\, \Delta x \simeq h$$

وهذا الإستنتاج يعرف فيما بعد بمبدأ عدم التأكد لهيسنبرج Heisenberg Uncertainity Principle

والمفهوم الباقى فى الإفتراض الثانى حيث مازال يحتاج إلى توضيح وهو معنى جزنية هيرميتيان لتطبيقها لمعامل ميكانيكا الكم. فمن المطلوب أن متوسط القيم المحسوبة من المعادلة (18) عبارة عن أعداد حقيقية. وبتساوى دالة الموجه، للمعادلة (18) يمكن كتابتها كما يلى :

$$g` = \int \psi^{\circ} G \psi d\tau \qquad -26$$

بأخذ المناظر المعقد أو المقابل المعقد

$$g`^{\circ} = \int \psi G^{\circ} \psi^{\circ} d\tau \qquad -27$$

ولو كانت ('g) عدد حقيقى على أى حال، إذا $g^{`}=g^{`*}$، ومن المعادلة 26، والمعادلة 27 عند التساوى : -

$$\int \psi^{\circ} G \psi d\tau = g` = \int \psi G^{\circ} \psi^{\circ} d\tau \qquad -28$$

فمن المعادلة (28) تعطينا عدد حقيقى لمتوسط القيمة، والمعامل الذى يحقق المطلوب المعطى فى المعادلة (28) والمسمى بمعامل هيرميتيان.

فعندما ينشأ معامل ميكانيكا الكم فإنه من الضرورى ضمان أن ذلك هو معامل هيرميتيان. كمثال فلو كان التعبير التقليدى هو (x.p) ثم بعد ذلك الإستبدال المباشر للمقدار $(h/_{2\pi i} . d/_{dx})$ والخاص بجزء العزم سوف يعطى المعامل: -

$$x \cdot \frac{h}{2\pi i} \quad \frac{d}{dx}$$

حيث، ولو أختبرت بواسطة المعادلة (28) فإنها لا تكون معامل هيرميتيان. وعلى أى حال، فإن التعبير التقليدى يكتب على النحو:-

$$\frac{1}{2}\ (xp + Px)$$

ويكون ناتج المعامل :

$$\frac{1}{2} \quad x \left[\frac{h}{2\pi i} \ (\frac{d}{dx}) + \frac{h}{2\pi i} \ (\frac{d}{dx})\ x \right]$$

أو

$$\frac{h}{2\pi i} \quad \left[x\ (\frac{d}{dx}) + (\frac{d}{dx})\ x \right]$$

إذاً المعامل الأخير يعتبر المعامل لهيرميتيان، والآن سيستخدم لنراعى مشكلة أخرى إفتراضية علاوة على ذلك، والذى سوف يدخل تقنية أخرى ويفهم داخل ميكانيكا الكم.

ولنفترض جسيم لـه كتلـه (m) مقيد لثلاثى محاور صندوق، ذات الجوانب a_x, a_y, a_z وطاقة الوضع الداخلية للصندوق بصفر، وفى أى مكان خارج الصندوق تعتبر لا نهائية. وبالتالى الجسيم يجب أن يبقى دائماً داخل الصندوق. ويكون الثلاث محاور لمعادلة شرودنجر الموجودة فى الفصل الثانى للمعادلة (71) هى :

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\ (E - V)\ \psi = 0$$

لتلك المشكلة المحددة،حيث $v = 0$ داخل الصندوق.فإن المعادلة تأخذ الشكل:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\ E\ \psi = 0$$

أو

$$\frac{\partial^2 \psi}{dx^2} + \frac{\partial^2 \psi}{dy^2} + \frac{\partial^2 \psi}{dz^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\ E\ \psi = 0 \qquad - 29$$

فى تلك المعادلة الدالة (ψ) عبارة عن دالة لثلاث متغيرات (x, y, z)، طريقة واحدة من المحاولات تؤخذ لحل المعادلة ويمكن أن تراها ممكنة لكتابة (ψ) عبارة عن ناتج للثلاث دوال كل واحد منهم يعتمد على واحد فقط من المتغيرات. ومن المفترض لهذا من أول وهله أن :

$$\psi\ (x, y, z) = X\ (x)\ .\ Y\ (y)\ .\ Z\ (z) \qquad - 30$$

وهذا يعنى أن الدالة (ψ) دالة للمتغيرات z , y, x وتكون مساوية لحاصل ضرب الثلاث دوال z, y, x ، حيث X دالة فقط لـ x، Y دالة فقط لـ y وأخيراً Z دالة لـ z. وكذلك يمكن كتابة المعادلة 30 على الصورة المبسطة الآتية :

$$\psi = XYZ \qquad - 31$$

حيث فى تلك المتغيرات ليست ظاهرة أو مبينة.بعد ذلك الدوال (Z , Y) مستقلين عن (x). وبتفاضل المعادلة 31 بالإحتفاظ للمحور x تعطى :-

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = YZ\frac{dX}{dx}$$

وبالتفاضل مرة ثانية مع الإحتفاظ للمحور x نحصل على :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = YZ\frac{d^2X}{dx^2} \qquad - 32$$

وبالمثل للمحورين الآخريين :-

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = XZ\frac{d^2Y}{dy^2} \qquad - 33$$

and

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = XY\frac{d^2Z}{dz^2} \qquad - 34$$

بالإستبدال من المعادلات (33, 32, 31) والمعادلة 34 فى المعادلة (29) نحصل على:

$$YZ\frac{d^2X}{dx^2} + XZ\frac{d^2Y}{dy^2} + XY\frac{d^2Z}{dz^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}EXYZ = 0$$

بالقسمة على المقدار $XYZ\,(8\pi^2 m/h)$

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}\right) + E = 0 \qquad - 35$$

إعتبر الآن الحالة: عندما يتحرك الجسيم فى الصندوق وموازياً للمحور السينى x. فى هذا المبدأ سيكون كل من z, y ثابتة والمتغير الوحيد هو المحور x. تحت تلك الظروف سيكون كل من الطرف الثانى والثالث فى القوس فى المعادلة (35) يظلان ثابتان. علاوة على ذلك، الطاقة الكلية (E) للنظام ثابتة. ولهذا الأطراف الثلاثة الأخرى للمعادلة (35) كلهم ثابتين، ولنرمز لذلك الثابت بالحد $(-E_x)$ ، إذاً : -

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \; \frac{1}{X} \; \frac{d^2X}{dx^2} = -E_x \qquad -36$$

بالمثل

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \; \frac{1}{Y} \; \frac{d^2Y}{dy^2} = -E_y \qquad -37$$

وكذلك

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \; \frac{1}{Z} \; \frac{d^2Z}{dz^2} = -E_z \qquad -38$$

بمقارنة المعادلات الثلاث بالمعادلة (35) ، يمكن أن نرى أن :

$$E_x + E_y + E_z = E$$

والإفتراض الأساسى هو أن (ψ) هى ناتج للثلاث دوال المنفصلة.كل واحد يعتمد على واحد فقط، بمعنى كتابتها، لأن الثلاث معادلات المنفصلة 36, 37, 38 ، كل واحد يحتوى فقط واحد من المتغيرات حصلنا عليه. هذه العملية تعرف بفصل المتغيرات.

والمعادلة (36) يمكن كتابتها : -

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d^2X}{dx^2} = -E_x X$$

or

$$\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \; E_x X = 0 \qquad -39$$

هذه المعادلة (39) كما ترى نفس الشكل مثل معادلة الموجه والخاصة بأحادى المحور المعادلة (1) فى صدر هذا الفصل، ما عدا أن الدالة (X) تحدث على العكس غير ψ، والطاقة للطرف E_x تحدث على العكس غير E. والحل للمعادلة (39) تعتبر هى الحل نفس الشكل مثل الحل للمعادلة (1). وشكل التسوية بالنسبة للمعادلة (10) المعطاة إذاً:

$$X = \sqrt{\left(\frac{2}{a_x}\right)} \; \sin \; \frac{n_x \pi}{a_x} \; x$$

ملاحظة إلى طول الصندوق الموجود فى هذا الحل هو طول الجانب للصندوق فى الإتجاه (x). علاوة على ذلك عدد الكم (n) نرمز له بالرمز (n_x) مثلما يكون عدد الكم المناسب للدالة (x). قيمة الشق (E_x) سوف يعطى بواسطة التعبير مثل المعادلة (7)، بالمثل : -

$$E_x = \frac{n_x^2 h^2}{8 m a_x^2}$$

والحل للمعادلة (37) و (38) مع بعضها مع التعبيرات بالنسبة E_y و E_x أيضاً بالمثل بواسطة : -

$$Y = \sqrt{\left(\frac{2}{a_y}\right)} \sin \frac{n_y \pi}{a_y} y \quad , \quad E_y = \frac{n_y^2 h^2}{8 m a_y^2}$$

$$Z = \sqrt{\left(\frac{2}{a_z}\right)} \sin \frac{n_z \pi}{a_z} z \quad , \quad E_z = \frac{n_z^2 h^2}{8 m a_z^2}$$

ولنتذكر أن : -

$$\psi = XYZ \qquad - 31$$

$$\psi = \sqrt{\left(\frac{8}{v}\right)} \sin \left(\frac{n_x \pi}{a_x} x\right) \sin \left(\frac{n_y \pi}{a_y} y\right) \sin \left(\frac{n_z \pi}{a_z} z\right)$$

حيث

$$v = a_x . a_y . a_z$$

وأيضاً بالإعادة

$$E = E_x + E_y + E_z$$

وعليه فإن مجموع الطاقة الكلية للجسيم سوف تعطى بواسطة

$$E = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a_x^2} + \frac{n_y^2}{a_y^2} + \frac{n_z^2}{a_z^2}\right) \qquad - 40$$

وبالتالي يوجد ثلاث أعداد للكم مطلوبة بتحديد طاقة الجسيم. ففي حالة الجسيم باعتبار الصندوق مكعب وهذا يعنى الأطوال للمحاور متساوية

$$a_x = a_y = a_z$$

والمعادلة (40) تأخذ الشكل :

$$E = \frac{h^2}{8m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \qquad - 41$$

حيث (a) قيمة عامة لكل من a_x , a_y , a_z. والطاقة الآن للنظام تعتمد على مجموع مربعات الثلاث أعداد الكم، ويكون من الممكن للثلاث حالات المختلفة للنظام.

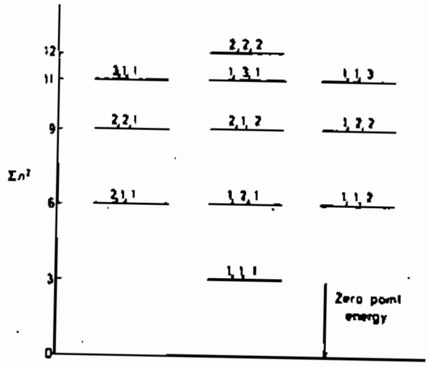

Fig. (4) Energy level for a cubic potential box

كما حددت بقيم خاصة لأعداد الكم، ولأخذ نفس الطاقة.

كمثال: لحالة واحدة للنظام سوف تخصص بواسطة $n_x=2$, $n_y=1$, $n_z=1$. كما تخصص الحالة بواسطة $n_x=1$, $n_y=2$, $n_z=1$، وكما هو ملاحظ مختلفة لأن القيم الفردية لأعداد الكم مختلفة، ولكن القيم لكل الحالات تكون متساوية

$$\Sigma n^2 = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

لكلا الحالتين متساوية.ولهذا فإن كلا الحالتين لهما نفس الطاقة. ومستويات الطاقة الأقل الأول بالنسبة للجسيم فى الصندوق المكعب كما هو مبين فى الشكل التخطيطى لمستويات الطاقة (4)، من حيث قيم أعداد الكم المنفردة n_x , n_y , n_z المبينة على مستويات الطاقة.

وكما هو ملاحظ من الشكل التخطيطى مع القيم للحد (Σn^2) للثلاث حالات الموجودة 6, 9, 11 عند كل مستوى بنفس الطاقة وعندما تكون لعدة حالات لهم نفس الطاقة فإننا نقول أنها متساوية الطاقة degenerate. ففى مشكلة الصندوق المكعب لبعض مستويات الطاقة ترى متلاشية ثلاثة أضعاف. وبسحب بعض التلاشيات لو أن إثنين فقط لجوانب الصندوق تكون متساوية الطول مع الجانب الثالث للصندوق وكل التلاشيات تزال لو أن كل الثلاث جوانب للصندوق مختلفة الأطوال. وتبعد بل طول أحد الجوانب للصندوق المكعب ليكون متشابه لمقطع النظام لإضطرابه وتعتبر هذا وثيق الصلة لتأثير زيمان Zeeman effect حيث المجال المغناطيسى يشوش أو يحدث إضطراب للذرة، حيث بعد ذلك تفقد بعض الطاقة لتعطى تصعيد لضغوط إضافية فى الطيف الذرى.