كلية العلوم

القسم : **الفيزياء**

السنة : **الثالثة**

المادة : ميكانيك الكم ١

المحاضرة : الرابعة/نظري/

المسلمات الأساسية في ميكانيك الكم

يبنى ميكانيك الكم على مجموعة من المسلمات نوجزها فيما يلي

١- **المسلمة الأولى**: حالة الجملة والتابع الموجي:

يقابل كل جملة فيزيائية فراغ من التوابع الموجية يرتبط بـ t إذ تمثل الحالة الفيزيائية للجملة بتابع من هذا الفراغ ولنكن $\psi(r,t)$ وتعتبر الكمية $|\psi(r,t)|^2$ أنها كثافة احتمال وجود الجسيم عند النقطة r في اللحظة t وبالتالي تمثل الكمية $|\psi(r,t)|^2 d\tau$ احتمال أن تعطي تجريبياً قياس قيماً لإحداثيات الإلكترون واقعة ضمن المجال $d\tau$ حول النقطة r أي احتمال وجود الإلكترون في المجال $d\tau$.

واضح أن مجموع كل القيم الممكنة لإحداثيات الجملة يساوي الواحد بمعنى آخر أن احتمال وجود الجسيم (الالكترون مثلاً) في الفراغ يساوي الواحد أي:

$\int_{R^3} |\psi(r,t)|^2 d\tau = 1$ وهو شرط الاستنظام وهذا الشرط ضروري حتى يكون التفسير الاحتمالي للتابع الموجي ψ واضحاً.

أما إذا لم تكن هذا الشرط محققاً عندها نميز حالتين

١- التكامل متقارب أي محدود $\int_{R^3} |\psi(r,t)|^2 d\tau = c^{te}$ عندها يمكن تنظيم التابع الموجي $\psi(r,t)$ بقسمته على نظيمه وبالتالي يكون $\frac{\psi(r,t)}{\|\psi(r,t)\|}$ مستنظماً

تسمى مثل هذه الحالات حالات مرتبطة (جسيم غير حر أو جسيم في الذرة أو هزاز توافقي)

٢- التكامل متباعد $\int_{R^3} |\psi(r,t)|^2 d\tau = \infty$ عندها لا نستطيع التكلم عن احتمال وجود الجسيم عند نقطة معينة ولكن بإمكاننا الكلام عن احتمال وجود الجسيم عند نقطة بالنسبة لاحتمال الجسيم عند نقطة بالنسبة لاحتمال وجوده عند نقطة أخرى أي الاحتمال النسبي

$$P_r = \frac{|\psi(r_1,t)|^2}{|\psi(r_2,t)|^2}$$

وعندها تسمى هذه الحالات حالات مفتوحة أو جسيم حر (غير مرتبطة)

٢- **المسلمة الثانية**: تمثيل الملحوظات الفيزيائية بمؤثرات

١- نسلم بأن المتحولات (الموضع والدفع) تمثل بمؤثرات هرميتية تحقق العلاقات التبادلية التالية:

$[x_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$ ، $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$ ، $[\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0$

٢- نسلم بأن المؤثرات المقابلة للملحوظ الفيزيائي $f(x_i, P_i)$ نحصل عليه بأن نستبدل المتحولات القانونية x_i, P_i بالمؤثرات التي تحقق العلاقات التبادلية السابقة بشرط أن يكون المؤثر الناتج $f(\hat{x}_i, \hat{P}_i)$ هرميتياً

مثلاً الهاملتوني

$$H(q, P) = \hat{H}(q, P)$$

حيث $q \rightarrow \hat{q} = i\hbar\nabla_p$ ، $P \rightarrow \hat{P} = -i\hbar\nabla_r$ الاسكلي

حيث q هي الإحداثيات المعممة & p الدفع (الاندفاع، كمية الحركة) المعممة

٣- المسلمة الثالثة: طيف الملحوظات الفيزيائية ـ مبدأ التراكب

١- كل ملحوظ فيزيائي A يمثل بمؤثر هرميتي $\hat{A}$ يؤثر في حالة الجملة والنتائج المحتملة للقياس $\hat{A}$ هي مختلف القيم الخاصة λ_n. نسمي مجموعة القيم الخاصة لـ $\hat{A}$ طيفه وهي قيم حقيقية لأن $\hat{A}$ هرميتي. أي لا يمكن أن يأخذ الملحوظ الفيزيائي قيماً ~~كيفية~~ كيفية وذلك بسبب ربط القيم الناتجة عن القياس بالقيم الخاصة.

٢- كل ملحوظ فيزيائي يملك مجموعة كاملة من التوابع الخاصة $\{\psi_n\}$ يمكن استعمالها وبالتالي يمكن نشر كل تابع حالة ψ كيفي بدلالة عناصر هذه المجموعة بالشكل

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n = \sum \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n$$

فإذا كان ψ تابع خاص للمؤثر A نسميه تابع حالة خاص ونقول أن الجملة في الحالة الخاصة ψ. إن تمثيل حالة كيفية كتركيب خطي في الحالات الخاصة لمؤثر هو تعبير عن مبدأ تراكب الحالات وبالتالي كل المعادلات التي يحققها التابع الموجي يجب أن تكون خطية

٤- المسلمة الرابعة: تحضير الجملة في حالة معلومة.

إن القياس فعلياً للملحوظ فيزيائي $\hat{A}$ ينقل تابع حالة الجملة إلى تابع حالة خاص للملحوظ المدروس وبالتحديد ينقل القياس تابع الحالة إلى تابع حالة خاص يقابل القيمة الخاصة الناتجة من عملية القياس بشكل آخر: لتكن حالة الجملة قبل القياس معينة بالتابع ψ (تابع حالة عام) ولنفرض أن $\{\psi_n\}$ مجموعة التوابع الخاصة لـ $\hat{A}$ و $\{\lambda_n\}$ طيفه. إذا أجرينا عملية قياس لـ $\hat{A}$ فإننا نحصل على إحدى القيم الخاصة λ_k.

$$\psi = \sum \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n \xrightarrow[\text{تنتج } \lambda_k]{\text{عملية قياس}} \psi_n$$

إن أهم نتيجة لهذه المسلمة ~~هي~~ هي أنه لا يمكن قياس جميع الملحوظات الفيزيائية معاً إلا إذا كانت الملحوظات متآلفة.

٥- المسلمة الخامسة: القيمة المتوقعة لملحوظ فيزيائي:

رأينا أن نتيجة القياس لا يمكن التنبؤ بها ولا تقود بالضرورة إلى قيمة معينة إذ أنها تنتج أي قيمة ولكن باحتمالات مختلفة.

إن القيمة المتوقعة (الوسطى) لنتيجة قياس ~~...~~ $\hat{A}$ عندما تكون الجملة في حالة كيفية ψ هي

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$ عندما يكون ψ مستنظم

وإذا كان غير مستنظم

$$\langle A \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | A \psi \rangle}{\| \psi \|^2}$$

واضح أن $\langle A \rangle$ عدد حقيقي

15

- إذا حدث أن تابع حالة هو أحد التوابع الخاصة ψ_n فإن $\langle A\rangle_{\psi_n}$ هي تماماً القيمة الخاصة λ_n لأن

$$\langle A\rangle_{\psi} = \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \lambda_n \psi_n \rangle = \lambda_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \lambda_n$$

- أما إذا كانت الجملة في حالة كيفية ψ حيث

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n = \sum_n \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n$$

فإن الحصول على λ_n يحصل باحتمال يحسب كما يلي

$$\langle A\rangle_{\psi} = \langle \psi | A \psi \rangle = \langle \sum_n c_n \psi_n | \hat{A} \sum_n c_n \psi_n \rangle$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle \psi_n | A \psi_m \rangle$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle \psi_n | \lambda_m \psi_m \rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \lambda_m \delta_{nm}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \lambda_n$$

ملاحظة: إحصائياً تعطى القيمة المتوقعة لمتحول عشوائي بالعلاقة

$$\langle A\rangle_{\psi} = \sum_n P_{\psi}(\lambda_n) \cdot \lambda_n$$

بالمقارنة مع النتيجة السابقة نجد أن

$$P_{\psi}(\lambda_n) = |c_n|^2 = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$$

وهذا الاحتمال ليس إلا احتمال إنتقال الجملة من الحالة ψ إلى الحالة ψ_n أي

$$P(\psi \to \psi_n) = P_{\psi}(\lambda_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$$

يدل على إذا كانت الجملة قبل القياس في الحالة ψ_n فإن الاحتمال للحصول على λ_n مؤكد أما إذا كانت الجملة في الحالة $\psi_m \neq \psi_n$ فإن الاحتمال الحصول على λ_n معدوم

مثال: أوجد القيمة المتوقعة لـ x إذا كان $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ipx}$ منتظم

الحل:

$$\langle x\rangle_{\psi} = \langle \psi | x \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} e^{-ipx} x e^{ipx} dx$$

$$= \lim_{a\to\infty} \frac{1}{2} \int_{-a}^{a} x \, dx = \lim_{a\to\infty} \frac{x^2}{4} \Big|_{-a}^{a} = \lim_{a\to\infty} \left[\frac{1}{4}(a^2 - a^2)\right] = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{P}_x] = i\hbar \qquad [\hat{x}, \hat{P}_y] = [\hat{x}, \hat{P}_z] = 0$$

$$[\hat{y}, \hat{P}_y] = i\hbar \qquad [\hat{y}, \hat{P}_x] = [\hat{y}, \hat{P}_z] = 0$$

$$[\hat{z}, \hat{P}_z] = i\hbar \qquad [\hat{z}, \hat{P}_y] = [\hat{z}, \hat{P}_x] = 0$$

تمرين: أحسب $[\hat{x}, \hat{P}_x^2]$

$$[\hat{x}, \hat{P}_x^2] = [\hat{x}, \hat{P}_x \hat{P}_x] = [\hat{x}, \hat{P}_x]\hat{P}_x + \hat{P}_x[\hat{x}, \hat{P}_x]$$

$$= i\hbar \hat{P}_x + \hat{P}_x i\hbar = 2i\hbar P_x = i\hbar \frac{\partial P_x^2}{\partial P_x}$$

المسألة السادسة:

يوصف التطور الزمني للملحوظات الفيزيائية وتوابع الحالة بإحدى الصورتين التاليتين:

1- صورة هايزنبرغ Heisenberg

تمثل الملحوظات الفيزيائية وإن كانت لا تتبع الزمن صراحة بمؤثرات هرميتية متعلقة بالزمن بينما تمثل الحالة بتابع موجي مستقل عن الزمن $\psi(r)$ وتكتب

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}$$

إذا كان F لا يتبع الزمن صراحة تؤول هذه المعادلة إلى معادلة هايزنبرغ

$$i\hbar \frac{d\hat{F}}{dt} = [\hat{F}, \hat{H}]$$

2- صورة شرودنجر:

تمثل الملحوظات الفيزيائية التي لا تتعلق بالزمن بمؤثرات هرميتية مستقلة عن الزمن في حين تمثل الحالة بتابع موجي متعلق بالزمن $\psi(r,t)$ ويتغير هذا التابع مع الزمن وفق العلاقة:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

و $\hat{H}$ مؤثر هاملتون

وهاتين الصورتين متكافئتين وهذا يعني:

1- لكل منها القيمة الخاصة نفسها في الصورتين $\hat{A}(t)\psi(r) = \hat{A}\psi(r,t)$

2- القيمة المتوقعة لأي ملحوظ نفسها في الصورتين $\langle \hat{A} \rangle_{\psi(r,t)} = \langle \hat{A}(t) \rangle_{\psi(r)}$

3- كل معادلة محققة في إحدى الصورتين يقابلها معادلة وحيدة في الصورة الأخرى

تمرين :
أوجد التغير الزمني لمركبة العزم الحركي L_x لجسيم حر كتلته m إذا علمت أن $H = \frac{P^2}{2m}$

الحل :

$$\frac{d\hat{L}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{L}_x, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{L}_x}{\partial t}$$

ولكن $\hat{L}_x$ لا يتعلق بالزمن صراحة أي أن

$$\frac{\partial L_x}{\partial t} = 0 \Rightarrow i\hbar \frac{d\hat{L}_x}{dt} = [\hat{L}_x, \hat{H}] \quad ; \quad \hat{H} = \frac{P^2}{2m} = \frac{P_x^2}{2m}$$

$$= [yP_z - zP_y, \frac{P_x^2}{2m}] \quad ; \quad L_x = yP_z - zP_y$$

$$= [yP_z, \frac{P_x^2}{2m}] - [zP_y, \frac{P_x^2}{2m}] = 0 \Rightarrow \hat{L}_x = cte.$$

$$= y[P_z, \frac{P_x^2}{2m}] + [y, \frac{P_x^2}{2m}]P_z$$

متآلفان

مبدأ هايزنبرغ في الشك :
ليكن $\hat{A}, \hat{B}$ مؤثرين غير متآلفين هذا يعني أنه لا يمكن قياسهما معاً أي لا يمكن الحصول على قيمتين مؤكدتين لنتيجة القياس متوافقة للمؤثرين لكن إذا أوجدنا بالتجربة أن قيمة $\hat{A}$ هي α_i فعند ذلك يمكن أن نحسب احتمال أن نجد في تجربة قياس $\hat{B}$ القيمة الخاصة β_k والذي هو احتمال انتقال الجملة من حالة إلى خاصة $\hat{A}$ والمقابلة للقيمة الخاصة α_i إلى حالة خاصة لـ $\hat{B}$ والمقابلة لـ β_k أي

$$P(f_i \longrightarrow g_k) = |\langle g_k | f_i \rangle|^2$$

ما دامت نتيجة القياس لملحوظين غير متآلفين تحصل باحتمال فقط إذاً عندما تكون الجملة موصوفة بتابع حالة ما فإنه يمكن قياس أياً من الملحوظين بارتياب أو بشكل له انتشار معين ليدعى هذا الارتياب التشتت المتعلق بالملحوظ (متوسط الانحراف التربيعي) والذي يعطى بالعلاقة

$$(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle$$

$$= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

حيث $\langle A^2 \rangle$ القيمة المتوقعة لمربع A

$\langle A \rangle^2$ مربع القيمة المتوقعة لـ A

فإذا كانت الجملة في حالة خاصة لـ $\hat{A}$ مقابلة للقيمة الخاصة α فإن

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle_{\psi_n} - \langle A \rangle_{\psi_n}^2 = \alpha^2 - \alpha^2 = 0$$

وهي نتيجة متوقعة لأنه عندما تكون الجملة في حالة خاصة لـ $\hat{A}$ فإن نتيجة القياس تكون معروفة ومؤكدة ولا تقبل الشك

ليكن المؤثرين $\hat{A}, \hat{B}$ خطيين وهرميتيين وغير متآلفين ولكن $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$
حيث $\hat{C}$ مؤثر هرميتي ونفرض أن الجملة في حالة ما ψ فيكون

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle_\psi = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 \psi \rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle (B-\langle B\rangle)^2\rangle_\psi = \langle \psi | (B-\langle B\rangle)^2 \psi\rangle$$

ولكن $A-\langle A\rangle$ و $B-\langle B\rangle$ هرميتيان لأن $\hat{A}$ و $\hat{B}$ هرميتيان

إذاً

$$(\Delta A)^2 = \langle (A-\langle A\rangle)\psi | (A-\langle A\rangle)\psi\rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle (B-\langle B\rangle)\psi | (B-\langle B\rangle)\psi\rangle$$

بافتراض $(A-\langle A\rangle)\psi = \phi_1$

فيكون $(B-\langle B\rangle)\psi = \phi_2$

$$(\Delta A)^2 = \|\phi_1\|^2 \Rightarrow \Delta A = \|\phi_1\|$$

$$(\Delta B)^2 = \|\phi_2\|^2 \Rightarrow \Delta B = \|\phi_2\|$$

وحسب متراجحة شوارتز (الجداء الداخلي لأي عنصرين من فراغ جداء داخلي هو أصغر أو يساوي بالقيمة المطلقة لجداء نظيميهما أي

$$\|\phi_1\|\cdot\|\phi_2\| \geq |\langle \phi_1 | \phi_2\rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle \phi_1 | \phi_2\rangle - \langle \phi_2 | \phi_1\rangle|$$

بتعويض ϕ_1 ، ϕ_2 بقيمتهما نجد

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle (A-\langle A\rangle)\psi | (B-\langle B\rangle)\psi\rangle - \langle (B-\langle B\rangle)\psi | (A-\langle A\rangle)\psi\rangle|$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | (A-\langle A\rangle)(B-\langle B\rangle)\psi\rangle - \langle \psi | (B-\langle B\rangle)(A-\langle A\rangle)\psi\rangle|$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | (AB-BA)\psi\rangle|$$

$$\geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A,B]\psi\rangle|$$

$$\geq \frac{1}{2} |\langle \psi | ic\psi\rangle| = \frac{1}{2} |\langle c\rangle_\psi|$$ إذا $|c|=1$

17

تمرين : إذا كان $A = x$ ، $B = P_x$ أثبت أن $\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$

طريقة أولى

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \frac{1}{2} \Big| \langle (x - \langle x \rangle)\psi \mid (P_x - \langle P_x \rangle)\psi \rangle - \langle (P_x - \langle P_x \rangle)\psi \mid (x - \langle x \rangle)\psi \rangle \Big|$$

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi \mid (x P_x - P_x x)\psi \rangle \right| = \frac{1}{2} \left| \langle \psi \mid [x, P_x] \psi \rangle \right|$$

$$= \frac{1}{2} \langle \psi \mid i\hbar \psi \rangle = \frac{1}{2} \left| \langle i\hbar \rangle_\psi \right|$$

$$= \frac{\hbar}{2} \quad ; \quad |i| = 1$$

طريقة ثانية :

$$\left. \begin{array}{l} [\hat{x}, \hat{P}_x] = i\hbar \\ [\hat{A}, \hat{B}] = ic \end{array} \right\} \Rightarrow c = \hbar$$

وحسب مبدأ الشك $\Delta x \cdot \Delta P \geq \frac{1}{2} |\langle c \rangle_\psi|$

$$\Leftarrow \quad \Delta x \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$$

الهزاز التوافقي:

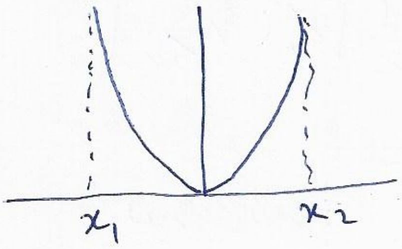
تحدث الحركة التوافقية عندما تهتز جملة حول موضع توازنها مثلاً جسم معلق بنابض أو جزيء ثنائي الذرة ولإعادة الجسم إلى موضع توازنه قوة إرجاع تعيد الجسم إلى الوضع التوازني وهذه القوة هي $-kx$

وبالتالي يخضع لقوة كامنة

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

حيث m كتلة الهزاز و $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$

ولنبحث عن حلول معادلة شرودنجر



$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(x)\right)=0 \quad (2)$$

و $V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

أي

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi=0 \quad (3)$$

ولنفرض

$$(4)\ \lambda=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{و} \quad (5)\ \alpha=\frac{m\omega}{\hbar}$$

فتصبح المعادلة

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+(\lambda-\alpha^2x^2)\psi=0 \quad (6)$$

ومن أجل قيم كبيرة لـ x يصبح $\alpha^2x^2 \gg \lambda$ ولذلك نهمل λ وتصبح المعادلة

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha^2x^2\psi=0 \quad (7)$$

ولها حلين خاصين

$$\psi_{\pm}=e^{\pm\frac{\alpha x^2}{2}} \quad (8)$$

الحل $e^{\alpha\frac{x^2}{2}}$ مرفوض فيزيائياً لأنه ينتهي إلى اللانهاية عندما $x\to\infty$

أما (9) $\psi=e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ ينتهي إلى الصفر عندما $x\to\infty$ وبالتالي نكتب حل (6) بالعلاقة

$$\psi(x)=e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}H(x) \quad (10)$$

حيث $H(x)$ تابع مجهول نختاره بحيث تحقق المعادلة (10) الحل للمعادلة (6)

وبالتالي

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\left(e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}H(x)\right)\right)$$

$$=\left(-\alpha H(x)-2\alpha x\frac{dH(x)}{dx}+\alpha^2x^2H(x)+\frac{d^2H(x)}{dx^2}\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \quad (11)$$

بالتعويض في (6) نجد

$$\left(-\alpha H-2\alpha x\frac{dH}{dx}+\alpha^2x^2H+\frac{d^2H}{dx^2}\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}+(\lambda-\alpha^2x^2)He^{-\frac{\alpha x^2}{2}}=0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2H(x)}{dx^2}-2\alpha x\frac{dH}{dx}+(\lambda-\alpha)H(x)=0 \quad (12)$$

لنفرض المتحول $y^2=\alpha x^2 \Leftarrow$

$$(13)\ y=\sqrt{\alpha}\,x$$

$$\frac{d}{dx}=\frac{d}{dy}\cdot\frac{dy}{dx}=\sqrt{\alpha}\frac{d}{dy} \quad (14) \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}=\alpha\frac{d^2}{dy^2} \quad (15)$$

وبالتالي

وباعتبار $H(x) \longrightarrow H(y)$ فيصبح

$$\alpha \frac{d^2H}{dy^2} - 2\alpha \frac{y}{\sqrt{\alpha}} \cdot \sqrt{\alpha}\frac{dH}{dy} + (\lambda - \alpha) H = 0$$ و $\frac{dH}{dx} = \sqrt{\alpha}\frac{dH}{dy}$

$$\Rightarrow \frac{d^2H}{dy^2} - 2y\frac{dH}{dy} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) H = 0 \qquad (16)$$

نحل هذه المعادلة نحصل على H ونسميه كثير حدود هيرميت وذلك بطريقة فروبينوس (أي أن الحل على شكل سلسلة قوى)

$$H(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \qquad (17)$$

$$\Rightarrow H' = \frac{H(y)}{dy} = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k y^{k-1}$$

$$H'' = \frac{d^2H}{dy^2} = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k y^{k-2}$$

نعوض في المعادلة (16) فنحصل على

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k y^{k-2} - \sum_{k=1}^{\infty} 2k a_k y^k + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k = 0$$

ولتوحيد الأس نعوض في الحد الأول كل k بـ $k+2$ فتصبح العلاقة

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} y^k - \sum_{k=1}^{\infty} 2k a_k y^k + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k = 0$$

وتصبح

$$\left(2a_2 + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) a_0\right) y^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{(k+2)(k+1) a_{k+2} - \left(2k - \frac{\lambda}{\alpha} + 1\right) a_k\right\} y^k = 0$$

حتى تتحقق هذه المعادلة يجب أن تكون الأمثال معدومة أي

$$2a_2 + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) a_0 = 0 \Rightarrow a_2 = \frac{-(\lambda - \alpha)}{2\alpha} a_0 \qquad (19)$$

وأيضاً

$$(k+2)(k+1) a_{k+2} - \left(2k + 1 - \frac{\lambda}{\alpha}\right) a_k = 0 \Rightarrow a_{k+2} = \frac{2k+1-\frac{\lambda}{\alpha}}{(k+2)(k+1)} a_k \qquad (20)$$

حيث $k \geq 1$ وهي علاقة التكرار (*) ولتصبح محدودة يجب أن تنقطع $a_{k+2} = 0$ بحيث $a_k \neq 0$ ومن أجل ذلك يجب أن تكون أمثال $a_k = 0$ أي البسط معدوم $2k + 1 - \frac{\lambda}{\alpha} = 0$ عند قيمة ما ولتكن n أي $2n + 1 - \frac{\lambda}{\alpha} = 0 \Leftarrow$

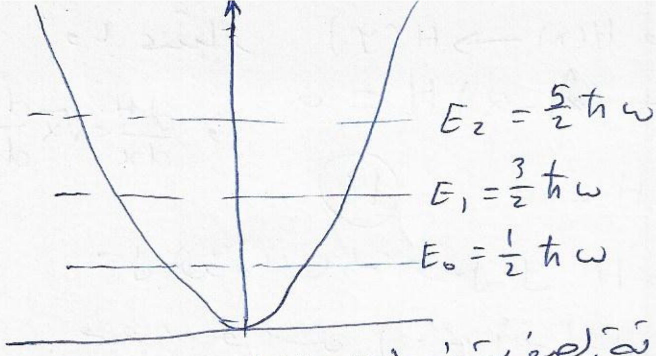
$$2n + 1 = \frac{\lambda}{\alpha} \qquad (23)$$

بتعويض قيم λ و α بعد العلاقة نجد

$$2n + 1 = \frac{2\cancel{m} E/\hbar^2}{\cancel{m}\,\omega/\hbar} \Rightarrow \frac{2E_n}{\hbar} = 2\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (24)$$

وهي القيم الخاصة لطاقة الهزاز التوافقي والمقابلة للتوابع الخاصة

ومن هذه العلاقة نحصل على الشكل



نلاحظ أن طاقة الهزاز التوافقي مكممة
والفصل بين كل سوية وأخرى مقداره $\hbar\omega$
ومن أجل $n=0$ نجد أن $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ وهي الطاقة الصفرية أو طاقة التوازن مع محيطه
وتشير هذه العلاقة تفسير بلانك لإشعاع الجسم الأسود والذي اعتبر بلانك
بموجبه الحادث عبارة عن مجموعة من الهزازات التوافقية يحصل الامتصاص
أو الإصدار كماً من الطاقة مقداره $\hbar\omega$
عند التوازن فإن طاقة الهزاز E_0 وليس $E=0$

التوابع الخاصة للهزاز التوافقي :

كتبنا سابقاً في (10) أن

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

أو

$$\psi_n(y)=C_n e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) \qquad (26)$$

وهو التابع الموجي الذي يقابل القيمة الخاصة E_n حيث C_n ثابت التنظيم
و $H_n(y)$ كثيرات حدود من المرتبة n وهي زوجية أو فردية حسب قيمة n
وبالتالي يمكن كتابتها بالشكل

$$H=\sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k = H_k^{p}(y)+H_k^{m}(y) \qquad (27)$$

n زوجية $\Rightarrow$ $H_n^{p}(y)=a_n y^n + a_{n-2}y^{n-2}+\cdots+a_2y^2+a_0 \qquad (28)$

n فردية $\Rightarrow$ $H_n^{m}(y)=a_n y^n + a_{n-2}y^{n-2}+\cdots+a_3y^3+a_1$

يمكن حساب الأمثال a_n إذا عُرف واحداً منها والذي يجب أن يكون اختيارياً
من علاقة التكرار وذلك بعد تعويض $\frac{\lambda}{\alpha}$ بقيمتها فنحصل على

$$a_{k+2}=\frac{2k+1-2n-1}{(k+1)(k+2)}a_k=\frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)}a_k \qquad (29)$$

لحساب a_{n-2} نعوض في (29) كل k بـ $n-2$ فنحصل على

$$a_n=\frac{-2^2}{(n-1)n}a_{n-2} \Rightarrow a_{n-2}=-\frac{n(n-1)}{2^2}a_n \qquad (30)$$

ولحساب a_{n-4} نعوض كل k بـ $n-4$ في (29) فنحصل

$$a_{n-2}=\frac{-2^3}{(n-3)(n-2)}a_{n-4} \Rightarrow a_{n-4}=-\frac{(n-3)(n-2)}{2^3}a_{n-2}$$

أو

$$a_{n-4}=\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2\cdot 2^4}a_n \qquad (31)$$

إذا عوضنا (30) و (31) في $H_n(y)$ نجد

$$H_n(y)=a_n\left(y^n-\frac{n(n-1)}{2^2}y^{n-2}+\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2\cdot 2^4}y^{n-4}+\cdots\right) \qquad (32)$$

وبما أن أحد الأمثال إختياري فإننا نختار $a_n = 2^n$ فيكون

$$H_n(y) = 2^n\left(y^n - \frac{n(n-1)}{2^2}\, y^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2\cdot 2^4}\, y^{n-4} + \cdots\right) \quad (33)$$

وبالتالي

$$\psi_n(y) = C_n\, e^{-\frac{y^2}{2}}\, H_n(y)$$

ويمكن كتابة (33) بالشكل

$$(34) \quad H_n(y) = (-1)^n\, e^{y^2}\, \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

وباستخدام أحد الصياغتين (33) أو (34) نستطيع أن نحصل على كثيرات حدود من المراتب المختلفة:

$$n=0 \Rightarrow H_0(y) = 1$$
$$n=1 \Rightarrow H_1(y) = 2y$$
$$n=2 \Rightarrow H_2(y) = 4y^2 - 2$$
$$n=3 \Rightarrow H_3(y) = 8y^3 - 12y$$

بتعويض كثيرات الحدود في علاقة ψ_n نجد

$$\psi_0 = C_0\, e^{-y^2/2} H_0(y) = C_0\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

$$\psi_1 = C_1\, e^{-\frac{y^2}{2}} H_1(y) = C_1 \cdot 2\sqrt{\alpha}\, x\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

$$\psi_2 = C_2\, e^{-\frac{y^2}{2}} H_2(y) = C_2 (4\alpha x^2 - 2)\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

ويمكننا تنظيم هذه التوابع لإيجاد C_0 ، C_1 فمثلاً من أجل تنظيم ψ_0 نكتب

$$\|\psi_0\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\, \psi_0(x)\, dx = |C_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= 2|C_0|^2 \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = 2|C_0|^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}} = 1$$

$$\Rightarrow |C_0|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \Rightarrow C_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac14} \Rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac14} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

ملاحظة: استخدمنا تكاملات أويلر والتي تعطى بالشكل التالي:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2} dx = 2\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2} dx = 2\, \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2\, \alpha^{\frac{n+1}{2}}}$$

حيث

$$\Gamma(n+1) = n\,\Gamma(n) \quad ; \quad \Gamma\left(\tfrac12\right) = \sqrt{\pi} \quad \& \quad \Gamma(1) = 1$$

وبشكل عام تعطى ثابتة التنظيم بالصيغة

$$C_n = \sqrt{\frac{\alpha^{\frac12}}{\pi^{\frac12}\cdot n!\cdot 2^n}} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac14} \left(n!\, 2^n\right)^{-\frac12}$$

أي

$$C_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac14} \qquad C_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac14} \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad C_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac14} \frac{1}{2^{3/2}}$$

فتكون التوابع الموجية

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2}\, x\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

$$\psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2^2} (2\alpha x^2 - 1)\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

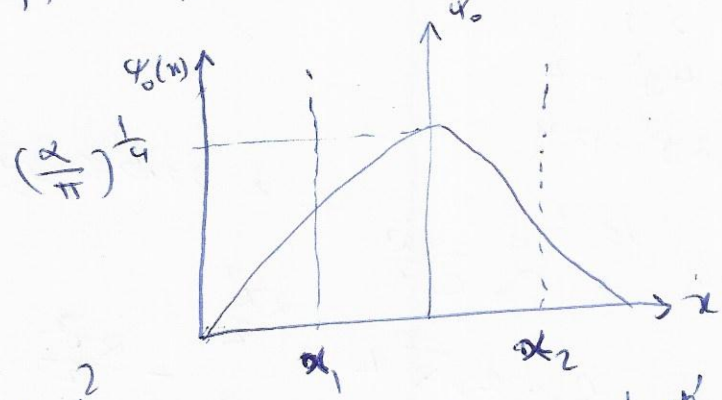
وبالتالي

فإن كثافة الاحتمال

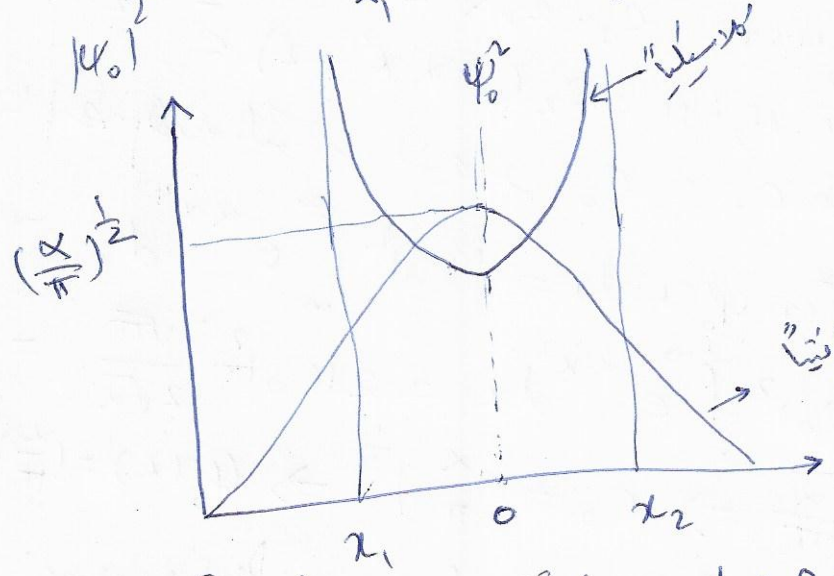
$$|\psi_0|^2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha x^2}$$

$$|\psi_1|^2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot 2x^2 e^{-\alpha x^2} \cancel{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{2}/x}$$

نرسم الآن $\psi_0(x)$



ونرسم $|\psi_0(x)|^2$



نلاحظ من الشكل أن احتمال وجود الجسيم عند نقطة التوازن أكبر ما يمكن بعكس الحالة الكلاسيكية حيث يكون الاحتمال عند هذه النقطة أصغر ما يمكن. كما يمكن أنه في الحالة الكوانتية يمكن للجسيم (الهزاز) أن يوجد خارج حدود المنطقة وهذا ممنوع كلاسيكياً