كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الثانية

المادة : فيزياء كمومية

المحاضرة : الخامسة /نظري/ د.أصف يوسف

{{ مكتبة A to Z }}

Facebook Group : مكتبة A to Z

2025

يمكنكم طلب المحاضرات برسالة نصية (SMS) أو عبر (What's app-Telegram) على الرقم 0931497960

الفصل الخامس
معادلة شرودنغر وتطبيقاتها
Schrödenger Equation And Their Application

1- مقدمة:

لقد مرّ معنا في الفصل الثاني أن الإلكترون مثل سائر الجسيمات الصغيرة يسلك سلوك الأمواج فمن المتوقع إمكانية التعبير عن حركته بمعادلة موجية كما هو الحال في معادلة الحركة الموجية على وتر مشدود:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0 \qquad (1)$$

حيث يرمز (v) إلى سرعة انتشار الموجة ويمثل التابع (φ) انزياح الوتر أو سعة الاضطراب وهو تابع للموضع المتحول (x) والزمن (t). إن المعادلة الموجية السابقة تنطبق على جميع أشكال الحركات الموجية بما فيها الأمواج الكهرطيسية.

إن التابع الموجي (φ) الذي يحقق المعادلة الموجية السابقة ويعدُّ حلاً لها فله الشكل التالي:

$$\varphi = A\sin\omega\left(\frac{x}{c} - t\right) \qquad (2)$$

أو بشكل عام:

$$\varphi = Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad (3)$$

حيث أن:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad (4)$$

وحيث λ طول موجة دي بروي.

أما معادلة انتقال الاضطراب في الفراغ فإنها تأخذ الشكل الموجي التالي:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}=\nabla^2\varphi \qquad (5)$$

حيث يعرف ∇^2 مؤثر لابلاس وهو يمثل عملية الاشتقاق من الدرجة الثانية بالنسبة للإحداثيات الديكارتية أي:

$$\nabla^2=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad (6)$$

وبالتلي يكون التابع الموجي الذي تحققه المعادلة (5) من الشكل التالي:

$$\varphi=Ae^{i(kr-\omega t)} \qquad (7)$$

حيث:

$$r=\left(x^2+y^2+z^2\right)^{1/2}$$

2- معنى التابع الموجي:

بالرغم من أننا لا نعرف بعد كيف سنعبر عن الطبيعة الموجية للإلكترون إلا أننا متأكدون من أن ذلك سيكون بوساطة معادلة موجية حيث يستعمل تابع موجي لوصف بعض خواص الإلكترون. وفيما يتعلق بالأشكال المألوفة من الحركات الموجية يمكن تقديم تفسير ومعنى فيزيائي مقبول ومفيد للتابع الموجي ولكن بالنسبة لتابع موجي لجسيمة كالإلكترون فالأمر أكثر صعوبة.

يمكن التوصل إلى مفهوم مفيد للمعنى الفيزيائي للتابع الموجي (ψ) لإلكترون بالإستفادة من الطبيعة المزدوجة للضوء. فالنظرية الجسيمية للضوء تربط بين شدة الضوء وكثافة الفوتونات، فالعدد الكبير من الفوتونات

في واحدة الحجم يولد بقعة شديدة الإضادة. و لكن حسب النظرية الموجية للضوء فإن شدة الضوء تتناسب مع مربع سعة اهتزاز تابعه الموجي. فإذا استعملنا النظرية الموجية لحساب تغيرات شدة الإضاءة في تجربة إنعراج كان بإمكاننا شرح النتائج أيضاً بدلالة النظرية الجسيمية وذلك بتعويض مربع سعة الإهتزاز بكثافة الفوتونات. إن النظرية الكوانتية الحديثة تصف سلوك حزمة من الإلكترونات بنفس الطريقة، فالحلقات المظلمة على لوحة تصويرية في تجربة انعراج الإلكترونات تكشف عن الأماكن التي تكون فيها الكثافة الإلكترونية مرتفعة. والكثافة الإلكترونية تتعلق أيضاً بمربع سعة التابع الموجي الممثل لحركة الإلكترونات. ليس من السهل دراسة سلوك إلكترون وحيد وذلك لأن مفهوم الكثافة الجسيمية يفقد أكثر معناه عند وجود إلكترون واحد فقط.

أن التابع الموجي (ψ) للإلكترون يشبه التابع الموجي (φ) الذي يمثل سعة اهتزاز وتر مشدرد ولذا يمكن الاشارة إلى (ψ) على أنه تابع سعة. وكما ذكرنا سابقاً فإن مربع (ψ) يتناسب مع الكثافة الإلكترونية أو مع احتمال إيجاد إلكترون في عنصر حجم (dV). وهكذا نتوصل إلى معنى فيزيائي للتابع (ψ) بحيث يقيس المقدار $(\psi^2 dV)$ أو $(\psi^2 dxdydz)$ احتمال إيجاد إلكترون في عنصر الحجم (dV) المحيط بالنقطة التي إحداثياتها (x, y, z).

بما ان التابع (ψ) يحوي غالباً العدد التخيلي (i) الذي يساوي مربعه (-1) وبما أن مربع (ψ) هو مقدار احتمال وجود الإلكترون في الحجم (dV) وهو مقدار حقيقي موجب كان لا بد من استعمال $(\psi\psi^*)$ بدلاً من (ψ^2) حيث أن (ψ^*) يمثل التابع العقدي المرافق للتابع (ψ). ان جداء $(\psi\psi^*)$ هو مقدار حقيقي دوماً بينما قد يكون (ψ^2) عقدياً. إذا مُثل التابع (ψ) بالمقدار $(A \mp iB)$ مثلاً أمكن الحصول هلى التابع العقدي المرافق

بتبديل (i) بـ $(-i)$ أي $(A \pm iB)$ ويكون الجداء $(\psi\psi^*)$ عندئذ $(A^2 + B^2)$ وهو مقدار حقيقي. اما إذا كان (ψ) مقداراً حقيقياً في الأصل فإن (ψ) وتابعه المرافق يكونان متطابقين.

3- مبدأ التركيب الخطي للحركات الموجية:

ان المعادلة (1) الممثلة للحركات الموجية هي معادلة خطية، ومبدأ التركيب الخطي ينص على أنه إذا كان φ_1 و φ_2 حلين للمعادلة (1) فإن:

$$a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2$$

حيث a_1 و a_2 ثابتان اختياريان – يعتبر حلاً أيضاً لهذه المعادلة ويمكن التأكد من ذلك كما يلي:

$$\frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial^2 (a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2)}{\partial x^2} = a_1\frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial x^2}$$

$$= \frac{1}{c^2}\left(a_1\frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial t^2} + a_2\frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial t^2}\right)$$

$$= \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial^2 a_1\varphi_1}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 a_2\varphi_2}{\partial t^2}\right)$$

فمثلاً من أجل المعادلة الموجية:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + K^2\varphi = 0$$

حيث يتبع (φ) المتحول (x)فقط. ويرمز K^2 إلى ثابت.

إن لهذه المعادلة حلول من الشكل:

$$\varphi_1 = A_1 \sin Kx$$
$$\varphi_2 = A_2 \sin Kx$$
$$\varphi_3 = A_3 e^{iKx}$$

وحسب مبدأ التركيب الخطي فإن:

$$\varphi = A_1 \sin Kx + A_2 \sin Kx$$

4- معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن:

إن معادلة شرودينغر الموجية هي المعادلة الأساسية في الميكانيك الكوانتي وتناظر قانون نيوتن الثاني في الميكانيك اللاسيكي. وهناك أكثر من طريقة للحصول على هذه المعادلة وسنتبع هنا طريقة ايزبيرغ وريزنيك (Esiberg and Resinick) مع ملاحظة أنه يجب أن تحقق معادلة شرودينغر الشروط (أو الفرضيات) التالية:

1- يجب أن تتفق هذه المعادلة مع النظريات والفروض التي أمكن التوصل إليها خلال الربع الأول من القرن العشرين وتأكدت صحتها مثل النظرية الموجية الجسيمية لدي بروي وفرضية الفوتونات لأينشتاين أي أن معادلة شرودينغر يجب أن تتفق مع المعادلتين:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad ; \quad E = h\nu \qquad (8)$$

حيث: λ هي طول الموجة المرافقة للجسيم الذي كمية حركته p، و E طاقة الفوتون الذي تردده (υ). و h هو ثابت بلانك.

2- يجب أن تتفق معادلة شرودينغر مع المعادلة الأساسية التي تعطي الطاقة الكلية E للجسيم الذي كتلته (m) على الشكل التالي:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \qquad (9)$$

حيث p هى كمية حركة الجسيم و V هي طاقته الكامنة.

ويلاحظ ان المعادلة السابقة (9) صحيحة في حالة التقريب اللانسبي فقط وبالتالي فإن معادلة شرودينغر تكون صحيحة في حالة السرعات الصغيرة فقط أما في حالة السرعات العالية فيجب استخدام العلاقة العامة للطاقة النسبية حيث يمكن الحصول في هذه الحالة على معادلة شرودينغر النسبية، والمعالجة في هذه الحالة صعبة ولن تتعرض لها، وسوف نكتفي بمعادلة شرودينغر اللانسبية.

3- يجب أن تكون معادلة شرودينغر خطية في التابع الموجي $\psi(x,t)$ (في حالة البعد الواحد) ويعني هذا الشرط أنه إذا كان كل من $\psi_1(x,t)$ و $\psi_2(x,t)$ حل يحقق معادلة شرودينغر عند طاقة معينة كامنة فيكون:

$$\psi(x,t) = c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t) \qquad (10)$$

حيث c_1 و c_2 ثوابت، هو أيضاً حل يحقق معادلة شرودينغر. ويقال في هذه الحالة ان الحل $\psi(x,t)$ يشكل تجميعاً خطياً (لأن التابع الموجي خطي) اختيارياً (لأن c_1 و c_2 ثوابت اختيارية يمكن أن تأخذ أية قيمة) للحلين $\psi_1(x,t)$ و $\psi_2(x,t)$. ولقد وُضع هذا الشرط على التوابع الموجية ليمكن الحصول على تداخلات بناءة أو هدامة بين التوابع الموجية وذلك لأن تجربة دافيسون وجيرمير (Davisson – Germer) (وغيرها من التجارب) قد بيّنت أن الجسيمات تحقق ظاهرة التداخل هذه ولذلك فإن التوابع الموجية التي تمثل الجسيمات يجب أن تتداخل فيما بينها ليمكن التوفيق بين نظرية الكم والتجارب العملية.

إن الطاقة الكامنة تكون بصورة عامة تابعة إما للموضع (x) أو لكل من الموضع (x) والزمن (t)، وهناك حالة بسيطة وهامة وهي عندما تكون الطاقة الكامنة مقداراً ثابتاً أي:

$$V(x,t) = V_0 = Cte$$

ويكون الجسيم في هذه الحالة حراً (القوى المؤثرة عليه معدومة)

وتكون الطاقة الكلية للجسيم ثابتة وكذلك كمية حركته. ويكون طول الموجة الممثلة للجسيم أو ترددها في هذه الحالة أيضاً ثابتاً. ويمكن تمثيل الجسيم الحر بتابع موجي على صورة تابع جيبي بالشكل التالي:

$$\psi(x,t) = \sin(k\,x - \omega\,t) \qquad (11)$$

حيث k هو العدد الموجي ويساوي إلى $(k = 2\pi/\lambda)$، ω هي التردد الزاوي.

يمكن استخدام المعادلة (8) لكتابة المعادلة (9) على الشكل التالي:

$$\frac{h^2}{2m\,\lambda^2} + V(x,t) = hv \qquad (12)$$

ويمكننا كتابة المعادلة السابقة بدلالة العدد الموجي k والتردد الزاوي ω على الشكل التالي:

$$\frac{k^2\hbar^2}{2m} + V(x,t) = \hbar\,\omega \qquad (13)$$

تحقق هذه المعادلة الشرطين الأول والثاني، لكي تحقق معادلة شرودينغر الشرطين السابقين يجب أن تتفق مع المعادلة (13). أما الشرط الثالث – شرط الخطية – فيمكن تحقيقه إذا احتوت جميع حدود معادلة شرودينغر على التابع الموجي $\psi(x,t)$ أو إحدى مشتقاتها التفاضلية فقط. ولذلك فإن الحدود لا يمكن أن تحتوي مثلاً على $[\psi(x,t)]^n$ حيث $(n>2)$ لأن ذلك يلغي خاصية الخطية التي يجب توفرها في المعادلة. إذا حاولنا الحصول على معادلة شرودينغر التي تتفق مع المعادلة (13) وتحقق شرط الخطية، وإذا استرشدنا بالتابع الموجي للجسيم الحر فإننا نجد أن الحد الأول من المعادلة (13) يحتوي على العامل (k^2) ويمكن الحصول عليه من خلال المشتق الثاني للتابع الموجي بالنسبة إلى (x). أما الحد الثاني فيحتوي على الطاقة الكامنة $V(x,t)$. ولكي يتحقق شرط الخطية يجب أن يحتوي هذا الحد على التابع الموجي نفسه أي $\psi(x,t)$ (إذا احتوت المعادلة على

عدد ثابت فإنها لا تكون خطية). أما الحد الثالث في المعادلة (13) فيحتوي على التردد الزاوي ω والذي يمكن الحصول عليه بتفاضل التابع الموجي بالنسبة للزمن. إذا أخذنا كل ذلك بعين الاعتبار، ولكي تحقق معادلة شرودينغر جميع الشروط السابقة فإنه يمكن كتابتها بالشكل العام التالي:

$$\alpha \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\,\psi(x,t) = \beta \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \qquad (14)$$

حيث α و β ثوابت.

وبما أن التابع الموجي للجسيم الحر لا يحقق المعادلة السابقة ويعود ذلك لخواص التابع الجيبي إذ أن التفاضل يحول الـ $\sin\alpha$ إلى $\cos\alpha$ وبالعكس، ويمكن التغلب على هذه المشكلة بكتابة التابع الموجي على الصورة العامة التالية:

$$\psi(x,t) = \cos(k\,x - \omega\,t) + \gamma \sin(k\,x - \omega\,t) \qquad (15)$$

حيث γ هو مقدار ثابت. وبتفاضل هذه المعادلة يمكن الحصول على ما يلي:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \psi}{\partial x} = -k \sin(k\,x - \omega\,t) + k\,\gamma \cos(k\,x - \omega\,t) \\
&\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \cos(k\,x - \omega\,t) - k^2\,\gamma \sin(k\,x - \omega\,t) \\
&\frac{\partial \psi}{\partial t} = +\omega \sin(k\,x - \omega\,t) - \gamma\,\omega \cos(k\,x - \omega\,t)
\end{aligned} \qquad (16)$$

وبالتعويض من المعادلة (16) في المعادلة (14) على اعتبار أن $[V(x,t) = V_0]$ نجد ما يلي:

$$\begin{aligned}
&\alpha\,k^2 \cos(k\,x - \omega\,t) - \alpha\,k^2 \gamma \sin(k\,x - \omega\,t) + \\
&+ V_0 \cos(k\,x - \omega\,t) + V_0\,\gamma \sin(k\,x - \omega\,t) = \\
&\qquad \beta\,\omega \sin(k\,x - \omega\,t) - \beta\,\gamma\,\omega \cos(k\,x - \omega\,t)
\end{aligned}$$

أو بالشكل التالي:

$$(-\alpha\, k^2 + V_0 + \beta\, \omega\, \gamma)\cos(k\, x - \omega\, t) + \\ + (-\alpha\, k^2 \gamma + V_0 \gamma - \beta\, \omega)\sin(k\, x - \omega\, t) = 0 \qquad (17)$$

ولكي تتحقق هذه المعادلة لجميع قيم المتغيرات x و t يجب أن تنعدم معاملات (أمثال)

$$\cos(k\, x - \omega\, t) \qquad \text{و} \qquad \sin(k\, x - \omega\, t)$$

ويمكن من ذلك الحصول على ما يلي:

$$-\alpha\, k^2 + V_0 = -\beta\, \omega\, \gamma \qquad (18)$$

$$-\alpha\, k^2 + V_0 = +\beta\, \frac{\omega}{\gamma} \qquad (19)$$

وبطرح المعادلتين السابقتين يمكن الحصول على النتيجة التالية:

$$\gamma^2 = -1 \Rightarrow \gamma = \sqrt{-1} = \pm i \qquad (20)$$

الآن من المعادلتين (20) و (18) يمكننا الحصول على ما يلي:

$$-\alpha\, k^2 + V_0 = \pm i \beta\, \omega \qquad (21)$$

بمقارنة المعادلة (21) بالمعادلة (13) يمكننا الحصول على العلاقتين التاليتين:

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \qquad (22)$$

$$\pm i\beta = \hbar \Rightarrow \beta = \mp\, i\, \hbar \qquad (23)$$

وتستخدم في العادة الإشارة الموجبة في العلاقة (20) (أي $\gamma = i$) ولذلك فإن المعادلة (23) تصبح ($\beta = i\,\hbar$) وتصبح معادلة شرودينغر بعد التعويض عن الثوابت على الشكل التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}.\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial\, x^2} + V(x,t)\, \psi(x,t) = i\, \hbar \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial\, t^2} \qquad (24)$$

تصف هذه المعالة حركة الجسيم من خلال التابع الموجي (ψ) عند الحركة في بعد واحد، ويمكن تعميمها للحصول على المعادلة في ثلاثة أبعاد على الشكل التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}.\nabla^2\psi(x,y,z,t)+V(x,y,z,t)\,\psi(x,y,z,t)=i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t) \quad (25)$$

تعرف هذه المعادلة بمعادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن، وهي تحقق جميع الفرضيات السابقة ورغم أنها تصف الجسيم الحر (عندما تكون الطاقة الكامنة ثابتة) إلا أن التجارب العملية تدل على أنها صحيحة لجميع الأجسام.

ويصبح التابع الموجي المعطى بالعلاقة (15) وباستخدام العلاقة (20) على الشكل التالي:

$$\psi(x,t)=\cos(k\,x-\omega\,t)+\gamma\sin(k\,x-\omega\,t) \quad (26)$$
$$=e^{-i(k\,x-\omega\,t)}$$

ويتضح من ذلك أن التابع الموجي في الميكانيك الكوانتي هو في كثير من الحالات تابع عقدي وبالتالي فإن معادلة شرودينغر هي معادلة تفاضلية عقدية. وهذا يبيّن أنه لا يمكن قياس تابع الموجة عملياً ولا يمكن بالتالي التفكير أو التساؤل عن طبيعة أو المعنى الفيزيائي له. ويختلف هذا عن الفيزياء الكلاسيكية حيث يكون التابع الموجي حقيقي ويمكن قياسه ومعرفة المعنى الفيزيائي له.

5- معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن:

إن الطاقة الكامنة في الحالة العامة تابعة لاحداثيات المكان (x,y,z) ولإحداثي الزمن (t). وهناك الكثير من الحالات الهامة فيزيائياً التي تكون فيها الطاقة الكامنة تابعة لإحداثيات المكان فقط (أي لـ x,y,z) ولا تعتمد بالتالي على الزمن. وإذا اقتصرت الدراسة على الحالة البسيطة في بعد واحد أي $V(x)$ فإنه يمكن تبسيط معادلة شرودينغر لتصبح معادلة تفاضلية عادية في متغير واحد. ويمكن تحقيق ذلك بواسطة ما يعرف بفصل المتغيرات (المتحولات) وهي طريقة تستخدم بكثرة في حل المعادلات التفاضلية الجزئية. ويفترض فى هذه الحالة أنه يمكن كتابة حل المعادلة على شكل

حاصل ضرب تابعين موجيين يعتمد إحداهما على المتحول (x) فقط بينما يعتمد الآخر على (t) فقط، ويمكن بالتالي كتابة ما يلي:

$$\psi(x,t)=\psi_1(x).\psi_2(t) \qquad (27)$$

الآن بتفاضل هذه المعادلة للحصول على المشتقات التفاضلية الموجودة في معادلة شرودينغر وبالتعويض عن هذه المشتقات وعن التابع الموجي المعطى بالعلاقة (27) يمكن أن تتحول المعادلة (معادلة شرودينغر) إلى الشكل التالي:

$$i\hbar\psi_1(x)\frac{\partial\psi_2(t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2(t)\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2}+\psi_1(x)\psi_2(t)V(x) \qquad (28)$$

وبقسمة طرفي المعادلة السابقة على $\psi_1(x).\psi_2(t)$ يمكننا الحصول على المعادلة التالية:

$$\frac{i\hbar}{\psi_2(t)}\frac{\partial\psi_2(t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2}+V(x) \qquad (29)$$

ويلاحظ أن الطرف الأيمن لهذه المعادلة (29)، يعتمد على المتحول (x) فقط، بينما الطرف الأيسر يعتمد على المتحول (t) فقط، ولتتحقق هذه المعادلة بالنسبة لجميع قيم المتغيرين يجب أن لا تعتمد قيمة الطرفين على أي من (x) أو (t)، ويجب بالتالي أن تكون مقداراً ثابتاً وإذا افترضنا أن قيمة الثابت هي (A) مثلاً فإن:

$$\frac{i\hbar}{\psi_2(t)}\frac{d\psi_2(t)}{dt}=A \qquad (30)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_1(x)}.\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)=A \qquad (31)$$

ويلاحظ أن التفاضل الجزئي في معادلة شرودينغر قد تحول لتفاضل تام في المعادلتين السابقتي الذكر. ويسمى (A) بثابت الفصل. إن المعادلة (30) هي معادلة تفاضلية عادية، ويمكننا كتابتها على الشكل التالي:

$$\frac{d\psi_2(t)}{dt}+i\frac{A}{\hbar}\psi_2(t)=0 \qquad (32)$$

يمكن وضع الحل العام لها على شكل تابع جيبي كما يلي:

$$\psi_2(t)=\cos\alpha\, t+i\sin\alpha\, t=e^{i\alpha t} \qquad (33)$$

حيث $(\alpha=-A/\hbar)$.

ويمكننا التأكد بسهولة أن هذا الحل يحقق المعادلة (32) ويكون الحل بدلالة ثابت الفصل هو:

$$\psi_2(t)=e^{-iAt\hbar}=\cos\left(\frac{A\,t}{\hbar}\right)-i\sin\left(\frac{A\,t}{\hbar}\right)$$

$$\psi_2(t)=e^{-iAt\hbar}=\cos\left(2\pi\frac{A}{h}t\right)-i\sin\left(2\pi\frac{A}{h}t\right) \qquad (34)$$

وهذا هو تابع موجي دوري تردده $(\upsilon=A/h)$ ويكون بالتالي ثابت الفصل هو:

$$A=h\upsilon\Rightarrow A=E=h\upsilon \qquad (35)$$

وبالتالي يصبح حل المعادلة (32) على الشكل الهام التالي:

$$\psi_2(t)=e^{-iEt\hbar} \qquad (36)$$

ومنه فالمعادلة التفاضلية (31) تتحول إلى الشكل التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)\,\psi_1(x)=E\,\psi_1(x)$$

أو إلى اشلكل:

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar}[E-V(x)]\,\psi_1(x)=0 \qquad (37)$$

إلا أنه في الحالة العامة في ثلاثة أبعاد تصبح المعادلة السابقة على الشكل المشهور التالي:

$$\nabla^2\psi_1(x,y,z)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x,y,z)]\,\psi_1(x,y,z)=0 \qquad (38)$$

أو بشكل عام:

$$\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{8\pi^2 m}{h^2}[E-V(x,y,z)]\psi(x,y,z)=0 \qquad (39)$$

تعرف هه المعادلة بمعادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن، ويلاحظ أن هذه المعادلة وبعكس معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن لا تحتوي على العدد التخيلي (i)، وبالتالي فإن التوابع الموجية $\psi(x)$ و $\psi(x,y,z)$ ليست بالضرورة توابع عقدية.

سوف نبيّن في الفصل السادس أن هذه المعادلة تُكتب استناداً إلى المؤثرات على الشكل التالي:

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

حيث $\hat{H}$ هو مؤثر هاملتون (أو مؤثر الطاقة الكلية)، E هي الطاقة الكلية أو القيمة الخاصة للمؤثر $\hat{H}$.

6- خواص التوابع الموجية:

إن توابع الموجة أي حلول معادلة شرودينغر المقبولة فيزيانياً تملك الخواص التالية بالإضافة لكونها مستمرة ووحيدة التعيين ومحددة القيمة.

1- إن مربع التابع الموجي الممثل لحركة الإلكترون يتناسب – ولا يساوي – مع احتمال وجود الإلكترون في عنصر الحجم $(d\tau = dxdydz)$. يعود السبب في ذلك إلى أنه إذا قبلنا بأن ψ هو حل للمعادلة الموجية فإن $(A\psi)$ هو حل لها أيضاً. ولذا فليس من الضروري بشكل عام أن يكون $\left(\int\psi\psi^* d\tau\right)$ مساوياً إلى الاحتمالية وإنما يكون متناسب معها. وبما أن ضرب التابع بثابت ممكن، فمن المناسب أن نضرب التابع الثابت بحيث يكون مربع التابع الموجي الناتج مساوياً إلى الاحتمالية. إن الاحتمال المتعلق بمعلومات يقينة هو بالتعريف واحد، وبكلام آخر إذا كنا نعلم علم اليقين إن الإلكترون موجود في عنصر الحجم $(d\tau)$ يمكن آنذاك أن

نقول أن احتمال وجوده فيه يساوي الواحد وهذا يقودنا إلى العلاقة:

$$\int \psi \psi^* d\tau = 1 \qquad (40)$$

2- إنها توابع تتمتع بخاصة التنظيم أي أنها تحقق العلاقة التالية:

$$\int \psi_n \psi_n^* d\tau = 1 \qquad (41)$$

حيث (ψ_n^*) التابع المرافق العقدي للتابع (ψ_n). إذا كان (ψ) هو حل للمعادلة الموجية فإن $(A\psi)$ هو حل لها أيضاً لذلك إذا لم يكن التابع (ψ_n) منظماً فإننا نضربه بثابت كيفي (A) للحصول على تابع موجي $(A\psi)$ يعتبر حلاً لها وتحقق خاصة التنظيم التالية:

$$\int A\psi_n \; A\psi_n^* d\tau = 1 \qquad (42a)$$

وبما أن (A) ثابت فيمكن وضعه خارج إشارة التكامل ونحصل على:

$$A^2 \int \psi_n \psi_n^* d\tau = 1 \qquad (42b)$$

وفي هذه الحالة يعرف (A) بثابت التنظيم، ويمكن تعيينه من المعادلة السابقة. وبعد معرفة (A) نحصل على التابع الموجي الجديد $(A\psi)$ الذي يعرف بالتابع الموجي المنظم.

3- خاصة التعامد: لنرمز لتابعين موجيين مقبولين لجملة معينة بـ ψ_i و ψ_j يكون هذان التابعان متعامدين بشكل متبادل إذا كان:

$$\int \psi_i \psi_j^* d\tau = 0 \qquad \int \psi_i^* \psi_j d\tau = 0 \qquad (43)$$

إن التوابع المتعامدة فيما بينها هي التوابع المقابلة لمستويات طاقة مختلفة. ويمكننا أن نلخّص شرطي التنظيم والتعامد بالعلاقة اتالية:

$$\int \psi_n \psi_m^* d\tau = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, n = m \\ 0, n \neq m \end{cases} \qquad (44)$$

حيث أن شرط التنظيم هو من أجل $n = m$، وشرط التعامد من أجل $n \neq m$، و δ_{mn} يُدعى برمز كرونيكر.

4- أن تتصف توابع الموجة فيها بخواص تناظرية لها علاقة بالجملة المدروسة، وتختلف هذه الخواص التناظرية باختلاف الجملة. إذا بدلنا فاصلة نقطة ما على المحور $\vec{ox}$ بفاصلة النقطة المناظرة لها بالنسبة إلى المبدأ O، فإن القيمة المطلقة لتابع الموجة ψ_n لا تتغير ولكن إشارته قد تتغير فتصبح $(-\psi_n)$ أو قد تبقى على حالها، وذلك تبعاً لكون العدد الصحيح (n) زوجياً أو فردياً. نسمي بصورة عامة التوابع ψ_n التي تحقق العلاقة التالية:

$$\psi(x) = \psi(-x)$$

توابع تناظرية، والتوابع التي تحقق العلاقة:

$$\psi(x) = -\psi(-x)$$

توابع غير تناظرية. وقد تحتوي الجملة المدروسة عدة عناصر تناظرية مثل المستوي أو المحور... إلخ.

إذا كان أحد التوابع الموجية ψ_n متناظراً بالنسبة لعنصر تناظر معين، وكان تابع آخر ψ_m غير متناظر بالنسبة لعنصر التناظر نفسه، يكون هذان التابعان متعامدين. هكذا نرى أن كل تابعين ψ_n و ψ_m يكونان متعامدين إذا تحقق أحد الشرطين التاليين:

a- مستوي الطاقة الذي يقابل ψ_n يختلف عن مستوي الطاقة الذي يقابل ψ_m.

b- الخواص التناظرية لـ ψ_n و ψ_m بالنسبة إلى أحد عناصر تناظر الجملة مختلفة فيما بينها.

5- مبدأ السببية: إذا عرف التابع الموجي في اللحظة الزمنية الإبتدائية (t_0) أمكن بمساعدة حل معادلة شرودينغر التابعة للزمن تعيين قيمته لأية لحظة زمنية تالية. وهكذا فإن معادلة شرودينغر تعبر عن مبدأ السببية في الميكانيك الكوانتي.

6- مبدأ انضمام الحالات: إذا كان ψ_1 و ψ_2 حلان لمعادلة شرودينغر الخطية فإن:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \qquad (45)$$

هو أيضاً حل لهذه المعادلة. وحيث c_1 و c_2 ثابتان اختياريان وهما في الحالة العامة عقديان.

إن المعادلة السابقة تعبر عن مبدأ انضمام الحالات في الميكانيك الكوانتي، تطابق من حيث شكلها المعادلة التي تعبر عن مبدأ انضمام الحالات في الميكانيك التقليدي، لكن المعنى الفيزيائي مختلف في الحالتين والفرق بينهما ينحصر فيما يلي:

(1) في الفيزياء الإتباعية المقدار الفيزيائي الناتج عن الإنضمام عبارة عن تركيب المقادير التي تدخل في الإنضمام. فإذا أخذنا مثلاً شدة الحقل الكهربائي الناتج بفعل الإنضمام في أية نقطة فإنه يساوي إلى مجموع شدات الحقول التي تدخل في الإنضمام. أما الحالة في الميكانيك الكوانتي فهي على العكس. فإذا فرضنا أننا ندرس مقداراً فيزيائياً بحيث أنه في الحالة (ψ_1) يساوي (L_1) وفي الحالة (ψ_2) يساوي إلى (L_2)، وبحسب معنى الإنضمام في الميكانيك التقليدي ينبغي أن نتوقع ان تكون قيمة المقدار المدروس في الحالة (ψ) عبارة عن تركيب (L_1) و (L_2) والتنبؤ بالحصول على أحد المقدارين هو مقدار احتمالي.

(2) إن تركيب اهتزازتين في الفيزياء الإتباعية هو اهتزازة جديدة أما في الميكانيك الكوانتي فإن جمع حالتين متماثلتين يساوي حاصل ضرب التابع الموجي بثابت أي تعود إلى الحالة نفسها. ونتيجة لصحة مبدأ إنضمام الحالات في الميكانيك الكوانتي تظهر معادلة شرودينغر الصفات الخطية التي تتمتع بها.

7- التوابع الخاصة والقيم الخاصة: ان معادلة شرودينغر لا تقبل الحل من أجل اي قيمة للطاقة E بل فقط من أجل بعض القيم $(E_1, E_2, E_3, ...E_n)$ والتي من أجلها تقبل معادلة شرودينغر حلولاً تحقق الشروط التي ذكرناها سابقاً، وعندها تدعى القيم $(E_1, E_2, E_3, ...E_n)$ بالقيم الخاصة، بينما التوابع $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, ...\psi_n)$، والتي تعد حلول معادلة شرودينغر من أجل القيم الخاصة السابقة الذكر، تدعى التوابع الخاصة، العائدة إلى القيم الخاصة $(E_1, E_2, E_3, ...E_n)$ السابقة الذكر.

8- التوابع الخاصة المتوالدة (المتحللة): أي كأن تكون بعض القيم الخاصة تمثل أكثر من تابع وينتج عن ذلك تحلل في الخطوط الطيفية.

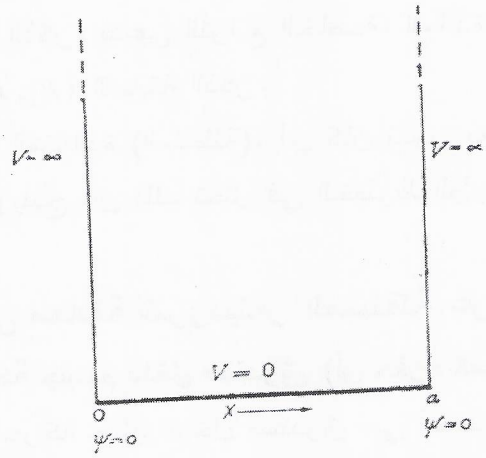
7- تطبيقات على معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن:

7-1- دراسه حركة جسيم داخل صندوق (أو حفرة كمون) وحيد البعد:

إن دراسة حركة جسيم داخل صندوق هي أبسط تطبيق للميكانيك الموجي. نختار عادة صندوقاً على شكل متوازي مستطيلات أبعاده a، b، c ممتدة على المحاور x، y، z على الترتيب، ونفترض أن الجسيم مقيد في حركته داخل الصندوق فقط، وبكلام آخر نفترض أنه لا وجود للجسيم خارج الصندوق. يمكن أن تكون حركة الجسيم مقصورة على داخل الصندوق فقط إذا بلغت طاقته الكامنة اللانهاية عند أوجه الصندوق وخارجها مما يؤدي إلى ارتداد الجسيم أثناء حركته على وجوه الصندوق بدلاً من اجتيازها. أما داخل الصندوق فنفترض أن الطاقة الكامنة تساوي دوماً الصفر ولهذا فإننا نسمي مثل هذا الصندوق بحفرة كمون.

من أجل التبسيط سندرس في البداية حركة جسيم في صندوق وحيد البعد كما في الشكل (1). ففي الصندوق الثلاثي الأبعاد يرمز للتابع الموجي

بـــ $\psi(x,y,z)$ وفي الصندوق الأحادي البعد يرمز له بـــ $\psi(x)$. وبمـــا أن الجسيم قد يكون إلكتروناً فإن التابع الموجي لا بد وأن يحقق أشـــياء فعليـــة نصادفها في الواقع. يسمى مثل هذا التابع بالتابع المميز ويتصف بأنه مستمر ومحدد ووحيد القيمة في كل نقطة. يمكن اعتبار حركة الإلكترون في ســـلك رفيع جداً مثالاً على حالة صندوق وحيد البعد.



الشكل (1): حركة جسيم في صندوق وحيد البعد.

بغية إيجاد حل أي مسألة في الميكانيك لموجي لا بد لنا مـــن حـــل المعادلة الموجية:

$$\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{8\pi^2 m}{h^2}[E-V(x,y,z)]\psi(x,y,z)=0 \qquad (46)$$

للحالة المدروسة. وبالنسبة لجملة وحيدة البعد تصبح المعادلة الـــسابقة علـــى الشكل التالي:

$$\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}[E-V(x)]\psi(x)=0 \qquad (47)$$

لقد فرضنا أن الطاقة الكامنة للجسيم تساوي الصفر طيلـــة وجـــوده

داخل الصندوق، ولذا فإن المعادلة الموجية السابقة تصبح على الشكل التالي:

$$\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\,\psi(x)=0 \qquad (48)$$

وبغية تبسيط المعادلة السابقة نكتبها على الشكل التالي:

$$\frac{d^2\psi(x)}{d\,x^2}+\alpha^2\,\psi(x)=0 \qquad (49)$$

حيث أن: $\left(\alpha^2=\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\right)$

إن للمعادلة السابقة حل من الشكل:

$$\psi(x)=A\sin\alpha\,x+B\cos\alpha\,x \qquad (50)$$

لكن هذا الحل عام والمعلومات التي يقدمها قليلة. ومن أجل تحويله إلى حل مفيد نطبق عليه القيود المعروفة ((الشروط الحدية)). بما أن الدقيقة (الجسيم) لا يمكن أن توجد خارج الصندوق فإن التابع $\psi(x)$ يجب أن يساوي الصفر عند جدران أو حدود الصندوق. ففي حالة صندوق وحيد البعد يكون $\psi(x)=0$ من أجل $x=0$. أي أن:

$$0=A\sin\alpha.0+B\cos\alpha.0$$

$$0=0+B\Rightarrow B=0$$

ويصبح التابع المقبول كحل من الشكل:

$$\psi(x)=A\sin\alpha\,x \qquad (51)$$

وعند الجدار أو الحد الآخر للصندوق يكون لدينا $(x=a)$ حيث a تمثل طول الصندوق ويكون $[\psi(x)=0]$ أيضاً. وبالتعويض يكون لدينا:

$$0=A\sin\alpha\,a$$

يمكن أن يتحقق الشرط السابق إذا جعلنا A مساوية للصفر لكن هذا لن يحقق حلاً مفيداً، ولذا لا بد أن يكون:

$$\sin\alpha\,a=0\Rightarrow\alpha\,a=n\pi$$

ومنه نجد أن:

$$\alpha = \frac{n\pi}{a}$$

وبالتالي فإن $\psi(x)$ يصبح على الشكل التالي:

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}\right)x \qquad (52)$$

بقي علينا الآن أن نجد قيمة الثابت A، ويمكن تحقيق ذلك بتنظيم التابع الموجي. بما أن الجسيم موجود حتماً داخل الصندوق فإن احتمال وجوده فيه يساوي الواحد وتبعاً للعلاقة (9) نكتب ما يلي:

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

التابع ψ حقيقي ولذا فهو يطابق ψ^*، وبالتعويض يكون لدينا:

$$\int_0^a A^2 \sin^2 \alpha\, x\, dx = 1$$

بإخراج A^2 خارج إشارة التكامل وإجراء التكامل نحصل على:

$$A^2 . \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

ويصبح الحل (22) من الشكل:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi}{a}x \qquad (53)$$

لم يكن ضرورياً معرفة A من أجل معرفة طاقة الجسيم داخل الصندوق. فالطاقة تعرف مباشرة من α وذلك لأننا بينا في بداية هذه الفقرة أن:

$$\alpha^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2}E$$

وبتعويض α بعد تعيينها يكون:

$$\frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{8\pi^2 m}{h^2}E$$

ومنها نحصل على علاقة الطاقة التالية:

$$E = \frac{n^2 h^2}{8\, m\, a^2} \qquad (54)$$

من علاقة الطاقة السابقة هناك نقطتان بارزتان يمكن ملاحظتهما. فالطاقة كما يتضح خاضعة للقيود الكوانتية وذلك لأن (n) يمكن أن يأخذ فقط قيماً صحيحة، وبالتالي فالطاقة تأخذ قيماً متقطعة كما تفرض النظرية الكوانتية منذ ميلادها على يد بلانك في عام (1900). والنقطة الثانية هي وجود علاقة بين حجم وأبعاد الصندوق وطاقة الجسيم داخله حيث تتناسب طاقة الجسيم عكساً مع مربع طول الصندوق أحادي البعد.

وفيما يلي بيان لسويات الطاقة للجسيم داخل الصندوق وأشكال التوابع الموافقة لها:

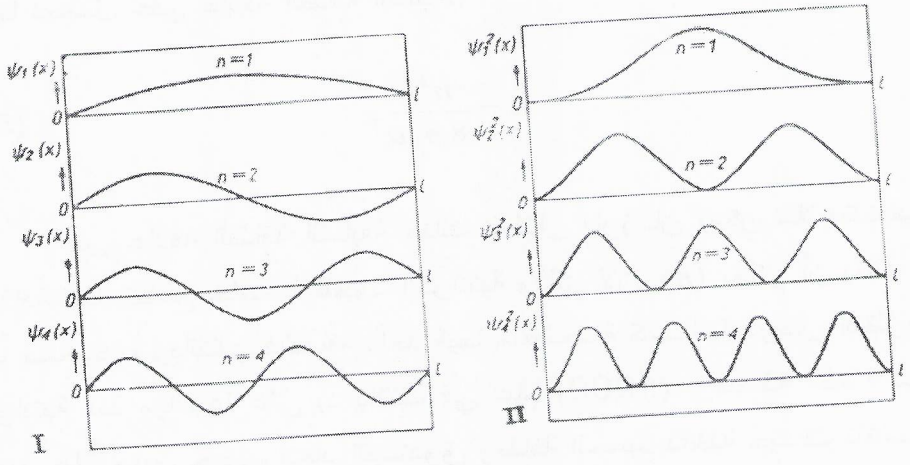
$$n=1 \;;\; E_1 = \frac{h^2}{8\, m\, a^2} \;;\; \psi_1 = A \sin \frac{\pi}{a} x$$

$$n=2 \;;\; E_2 = \frac{4h^2}{8\, m\, a^2} \;;\; \psi_2 = A \sin \frac{2\,\pi}{a} x$$

$$n=3 \;;\; E_3 = \frac{9h^2}{8\, m\, a^2} \;;\; \psi_3 = A \sin \frac{3\,\pi}{a} x$$

$$n=4 \;;\; E_4 = \frac{16h^2}{8\, m\, a^2} \;;\; \psi_4 = A \sin \frac{4\,\pi}{a} x$$

والشكل (2) يوضح الشكال الموافقة لهذه التوابع والكثافة الاحتمالية لتوزيع الجسيم ضمن الصندوق.

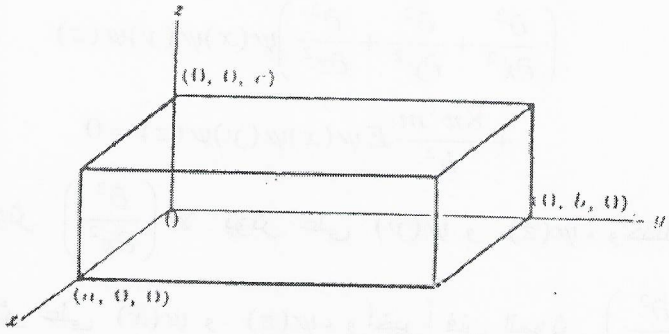


الشكل (2): I – التوابع الممثلة لحركة جسيم داخل صندوق وحيد البعد، II – توزيع الكثافة الاحتمالية للجسيم داخل الصندوق.

7-2- دراسه حركة جسيم داخل صندوق (أو حفرة كمون) ثلاثي الأبعاد:

عرضنا في بداية الفقرة السابقة شرحاً عن صندوق أو حفرة الكمون الثلاثي الأبعاد والأحادي البعد، ومن ثم درسنا حركة جسيم في صندوق أحادي البعد، أما الآن سندرس حركة جسيم داخل صندوق أو حفرة كمون ثلاثي الأبعاد.

عندما يتحرك جسيم في صندوق ثلاثي الأبعاد، شكل (3)، يكون التابع الموجي الممثل لحركته تابعاً للإحداثيات الفراغية الثلاث، والمعادلة الموجية لجسيم كهذا تتحرك في مجال طاقته الكامنة المساوية الصفر تكون:



الشكل (3): صندوق (حفرة كمون) ثلاثي الأبعاد.

$$\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\,\psi(x,y,z)=0 \qquad (55)$$

إن هذه المعادلة هي معادلة تفاضلية جزئية تحتوي على ثلاث متحولات. إن الخطوة الأولى هي أن نفترض أن المتحولات قابلة للفصل إلى ثلاث معادلات مميزة، تحوي كل معادلة منها متحولاً واحداً فقط. وكل من هذه المعادلات ستكون عندئذ معادلة تفاضلية تامة وذلك لاحتوائها على متحول واحد، وعندئذ سيكون بالامكان في الغالب إيجاد حلول لمثل هذه المعادلات. ليس من الممكن دائماً إيجاد طريقة رياضية تسمح بفصل المتحولات، ولكن الإفتراض بإمكانية تمثيل المعادلة الموجية الكلية بجداء عدة توابع موجية هي الطريقة الشائعة والمتبعة في البدء. فمن أجل جسيم في صندوق ثلاثي الأبعاد نفترض إذاً أن:

$$\psi(x,y,z)=\psi(x)\psi(y)\psi(z) \qquad (56)$$

حيث أن $\psi(x)$ يمثل تابعاً موجياً يتوقف فقط على المتحول (x) و $\psi(y)$ يمثل تابعاً موجياً يتوقف فقط على المتحول (y) وهكذا بالنسبة لـ $\psi(z)$ فهو يتوقف فقط على المتحول (z).

الآن بتعويض $\psi(x,y,z)$ بما يساويه – من المعادلة (56) – في المعادلة الموجية (55) نحصل على ما يلي:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x)\psi(y)\psi(z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi(x)\psi(y)\psi(z)=0 \quad (57)$$

وطالما أن المؤثر $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$ لا يؤثر على $\psi(y)$ و $\psi(z)$، وكذلك المؤثر $\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$ لا يؤثر على $\psi(x)$ و $\psi(z)$، وأخيراً فإن المؤثر $\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$ لا يؤثر على $\psi(x)$ و $\psi(y)$، فإنه بالإمكان إعادة ترتيب المعادلة السابقة على الشكل التالي:

$$\psi(y)\psi(z)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\psi(x)\psi(z)\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}+\psi(x)\psi(y)\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi(x)\psi(y)\psi(z)=0 \quad (58)$$

والآن بتقسيم طرفي المعادلة السابقة على $\psi(x)\psi(y)\psi(z)$ نحصل على:

$$\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{\psi(y)}\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}+\frac{1}{\psi(z)}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}=-\frac{8\pi^2 m}{h^2}E \quad (59)$$

يلاحظ من المعادلة السابقة أن كل حد من الطرف الأيسر من المعادلة السابقة يتبع متحولاً واحداً فقط وأن مجموع هذه الحدود يساوي المقدار الثابت $\left(-\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\right)$. إن الحد $\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ تابع لـ (x) ولا تتغير قيمته بتغير (y) و (z). فإذا غيرنا (x) نلاحظ أن المجموع لا يزال ثابتاً وهذا لا يتحقق بالطبع إلا إذا كان المقدار $\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ مستقلاً عن (x) وبالتالي فهو ثابت. يمكننا تعميم نفس المناقشة فيما يتعلق بحدي (y) و (z). وهكذا فإن كل متحول كما يلاحظ مستقل عن المتحولين الآخرين وبذا نكون قد نجحنا في فصل المتحولات. ليس من الغريب أن يكون

$\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ مستقلاً عن المتحول (x). فإذا عوضنا التابع $\psi(x)$ بعد قليل في الحد السابق وأجريت عملية الاشتقاق تأكدنا أن الحد مستقل عن (x).

الآن إذا رمزنا بـ $(-\alpha_x^2)$ للحد (x)، وبـ $(-\alpha_y^2)$ للحد (y) وبـ $(-\alpha_z^2)$ للحد (z) نحصل على المعادلات التالية:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}&=-\alpha_x^2\\ \frac{1}{\psi(y)}\frac{d^2\psi(y)}{dy^2}&=-\alpha_y^2\\ \frac{1}{\psi(z)}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}&=-\alpha_z^2\end{aligned}\qquad(60)$$

الآن من العلاقتين (59) و (60) يمكننا أن نكتب التالي:

$$\alpha_x^2+\alpha_y^2+\alpha_z^2=\frac{8\pi^2 m}{h^2}E$$

ومنه نجد:

$$E=\frac{h^2}{8\pi^2 m}(\alpha_x^2+\alpha_y^2+\alpha_z^2)\qquad(61)$$

الآن بعد أن فصلنا المتحولات لا بد من حل معادلة من المعادلات السابقة. ففي المسألة التي نعالجها تتشابه المعادلات الموجية الثلاث، ولذلك فإن حل إحداها كافٍ لتوضيح حل المعادلتين الباقيتين. فإذا أخذنا الحد المتعلق بالمتحول (x) وأعدنا الترتيب حصلنا على علاقة شبيهة بتلك التي مرت بنا أثناء دراسة حركة جسيم في صندوق وحيد البعد:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\alpha_x^2\psi(x)=0\qquad(62)$$

حيث يكون الحل المنظم حسب العلاقة (53) من الشكل التالي:

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x \qquad (63)$$

وبنفس الأسلوب نحصل على الحلين المتعلقين بالمتحولين (y) و (z) حيث نجد:

$$\psi(y)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_y\pi}{a}y \qquad (64)$$

$$\psi(z)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_z\pi}{a}z \qquad (65)$$

وبالاعتماد على العلاقة (56) نجد:

$$\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{a.b.c}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x.\sin\frac{n_y\pi}{b}y.\sin\frac{n_z\pi}{c}z \qquad (66)$$

حيث: a و b و c أبعاد حفرة الكمون المتوازية المستطيلات.

من المهم جداً أن نلاحظ وجود عدد كوانتي لكل درجة حرية أي لكل متحول. يلاحظ من المعادلة الأخيرة:

$$a_x=\frac{n_x\pi}{a},\quad a_y=\frac{n_y\pi}{b},\quad a_z=\frac{n_z\pi}{c}$$

ومنه فإن طاقة الجسيم في صندوق (حفرة كمون) ثلاثي الأبعاد تُعطى بالعلاقة التالية:

$$E=E_x+E_y+E_z=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right) \qquad (67)$$

ونلاحظ هنا أيضاً أن طاقة الجسيم مكممة (أي تخضع للشروط أو القيود الكوانتية).

الآن إذا كان الصندوق (حفرة الكمون) الذي ندرس حركة الجسيم داخله مكعباً فإن $(a=b=c)$ وبالتالي فإن علاقة الطاقة تصبح على الشكل التالي:

$$E=\frac{h^2}{8ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2) \qquad (68)$$

إن الأعداد الكوانتية n_x ، n_y و n_z تعبر عن كل الحالات الطاقية لحركة الجسيم، وكذلك تعبر عن التوابع الموجية الموافقة للحالات السابقة. فمن أجل أخفض سوية طاقية يكون لدينا:

$$n_x = n_y = n_z = 1$$

عند ذلك يُكتب التابع الموجي بالشكل $\psi(1,1,1)$ والسوية الطاقية بالشكل $E_{(1,1,1)}$ وتساوي إلى:

$$E_{(1,1,1)} = \frac{3h^2}{8ma^2} \qquad (69)$$

هناك مجموعة واحدة من الأعداد الكوانتية $(1,1,1)$ التي تعطي هذه الطاقة ولذا يُقال عن هذه السوية الطاقية بسوية غير متوالدة (غير متحللة). إذا أخذنا السوية الكوانتية الثانية نجد أن الأعداد الكوانتية الموافقة هي $(1,1,2)$ و $(1,2,1)$ و $(2,1,1)$ أما التوابع الموافقة فهي $\psi_{(1,1,2)}$ و $\psi_{(1,2,1)}$ و $\psi_{(2,1,1)}$ على الترتيب. إن هذه التوابع الموجية تملك نفس الطاقة أي:

$$E_{(1,1,2)} = E_{(1,2,1)} = E_{(2,1,1)}$$

ويُقال عن هذه السوية الطاقية بأنها متوالدة (أو متحللة) كما يُقال عن التابع الموجي بأنه نمط للإهتزاز أما درجة التوالد (أو التحلل) فتساوي إلى عدد التوابع الموجية المختلفة الممثلة للسوية الطاقية. ففي هذه الحالة نجد أن درجة التوالد (التحلل) تساوي إلى (3). يُعبر عما سبق بالشكل (4). ويمكن التخلص من التوالد (التحلل) باستعمال صندوق (حفرة كمون) ذي أبعاد مختلفة لا ترتبط فيما بينها بعلاقات أعداد صحيحة.