كلية العلوم

القسم : **الفيزياء**

السنة : **الثالثة**

المادة : ميكانيك الكم١

المحاضرة : ملحق١ /نظري/

{{ مكتبة A to Z }}

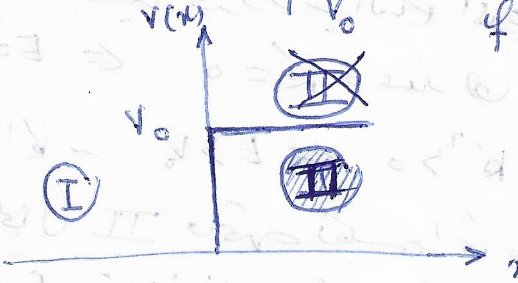
Facebook Group : مكتبة A to Z

حاجز كمون :

عندما يتحرك جسيم في حقل كمون مستقر ضمن الحقل فمثلا بروتونا باتجاه نواة مستقرة ستأثر بالكمون الكهربائي التدافعي وإذا كانت طاقة البروتون كافية وتجاوز الكمون الكهربائي فستأثر بالكمون النووي ولندرس الآن حاجز كمون والذي يفسر بعض الظواهر الفيزيائية فيمكن تمثيل الحاجز الكموني جبريا بالشكل

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq 0 \\ V_0 & \text{if } x > 0 \end{cases}$$

ويمكن تمثيله بيانيا بالشكل



نكتب معادلة شرودنغر الموافقة لكلا المنطقتين (I) (II) فيكون بالشكل العام لمعادلة شرودنغر

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

في المنطقة (I) تكون المعادلة

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

أو

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad ; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

وحلها من الشكل

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

وفي المنطقة (II) تكون معادلة شرودنغر

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi = 0 \quad ; \quad k'^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

وحلها من الشكل

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}$$

إن كل حل هو عبارة موجتين أحدهما باتجاه x الموجب والآخر باتجاه x السالب

وبما أنه في المنطقة (II) لا يوجد موجة منعكسة فإنه $B_2 = 0$

يمكن تحديد الثوابت بالحل من خلال الشروط الحدية وشروط الاستمرار للتابع ومشتقاته عند $x=0$ أي

$$\psi_1(0) = \psi_1(-0) \qquad \psi_2(0) = \psi_2(-0)$$

عندما تكون $E<V_0$ أو $E>V_0$ حيث $k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)$

أما $E<V_0$ تكون $k'^2<0$ أي k' عدد تخيلي وعندها يصبح $e^{ik'x}$ عدد حقيقي موجب

مهمل بسبب محدودية التابع الموجي $\psi(x>0)$ يصبح لامتناهي عند $x\to\infty$ وهذا غير

أما $E=V_0 \Leftarrow$ $k=0$ وعندها التابع ثابت وهذه حالة خاصة لا داعي لدراستها.

اما اذا كان $E>V_0 \Leftarrow$ $k'^2>0$ وبالتالي k' حقيقي وهذا يعني وجود موجة في المجال II متجهة بعكس اتجاه ox وهو غير ممكن لانه لا توجد في المجال II سوى الموجة النافذة المتجهة باتجاه ox اذ ليس هناك أي حاجز في II لتعكسها.

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow \quad A_1 + B_1 = A_2$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \qquad k(A_1-B_1) = k'A_2$$

باعتبار A_1 سعة الموجة الواردة مساوية للواحد نجد

$$1+B_1 = A_2 \qquad k(1-B_1) = k'A_2$$

$$k(1-B_1) = k'+k'B_1$$

$$k-kB_1 = k'(1+B_1) = k(1-B_1) \qquad A_2 = 1+B_1$$

$$\Rightarrow k-k' = (k+k')B_1 \Rightarrow B_1 = \frac{k-k'}{k+k'}$$

$$= 1+\frac{k-k'}{k+k'} = \frac{k+k'+k-k'}{k+k'} = \frac{2k}{k+k'}$$

أي أن سعة الموجة المنعكسة $B_1 \neq 0$ مما يدل على وجودها ولا تنعدم B_1 الا في حالة $k=k'$ ولا يتحقق ذلك الا في حالة $k=k'$ وبالتالي $V_0=0$ أي نحصل على حالة عدم وجود حاجز كمون لأنه تخضع كل موجة مستوية e^{ikx} في اتجاه ox ولا تزيد

$$ik A_1 - ik B_1 = ik(A_1-B_1) = ik'A_2 \Rightarrow \boxed{k(A_1-B_1) = k'A_2}$$

$$\psi_1' = ikA_1e^{ikx} - ikB_1e^{-ikx} \qquad \psi_1'(0) = ikA_1 - ikB_1$$

$$\psi_2' = ik'A_2e^{ik'x} - ik'B_2e^{-ik'x} \qquad \psi_2'(0) = ik'A_2 - ik'B_2$$

~~عندما تكون $E < V_0$ ⇐ k' تخيلية $k' = i\alpha$ حيث α حقيقي~~

~~$\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$~~

تسمى النسبة بين كثافة تيار الجسيمات المنعكسة إلى كثافة تيار الجسيمات الواردة J_0 لمعامل الانعكاس R والنسبة بين كثافة الجسيمات النافذة إلى الواردة بمعامل النفوذ D ومن علاقة كثافة التيار الاحتمالي

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\right)$$

نجد أن $J_R = \frac{\hbar k}{m}|B_1|^2$ فيكون $J_D = \frac{\hbar k}{m}|A_2|^2$ وكثافة تيار الجسيمات الواردة $J_0 = \frac{\hbar k}{m}$

$$R = \frac{J_R}{J_0} = \left|\frac{k - k'}{k + k'}\right|^2$$

معامل الانعكاس

$$D = \frac{J_D}{J_0} = 4kk'\left|\frac{1}{k + k'}\right|^2$$

معامل النفوذ

فعندما تكون $E > V_0$ وبالتالي $k' > 0$ تكون

$$R + D = \frac{k^2 - 2kk' + k'^2}{k^2 + 2kk' + k'^2} + 4kk'\frac{1}{k^2 + 2kk' + k'^2} = 1$$

قانون انحفاظ أما في الحالة الثانية إذا كانت $E < V_0$ نجد أن k' أصبح عقدياً ويمكن كتابته $k = i\chi$ حيث χ حقيقي بالعلاقة

$$\chi = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$$

وبالتالي يصبح معامل الانعكاس

$$R = \left|\frac{k - i\chi}{k + i\chi}\right|^2 = \frac{(k - i\chi)(k + i\chi)}{(k + i\chi)(k - i\chi)} = 1$$

وبالتالي $D = 0$ لأن

$$R + D = 1$$

والموجة المنعكسة هي

$$\psi_k = B_1 e^{-ikx} = \frac{k - i\chi}{k + i\chi} e^{-ikx} = e^{-i(kx + \delta)}$$

δ فرق الطور الحادث عند الانعكاس ولكن من حركة الجسيمات في المنطقة II لم ينعدم نجد أنه بالرغم من أن معامل الانعكاس يساوي الواحد نجد أن التابع

$$\psi_D = A_2 e^{ik'x} = \frac{2k}{k + i\chi} e^{-\chi x}$$

$x > 0$ واحتمال وجود الجسيم ليس معدوماً

$$|\psi_D(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \chi^2} e^{-2\chi x} \neq 0$$

وهنا الاختلاف بين م. الكلاسيكي و الكمومي. لأنه لا يمكن تواجد جسيمات في المنطقة II إلا $(x > 0)$ ~~أما الكلاسيكي~~ إذا كانت طاقته $E > V_0$ ولكن عملياً أنه توجد جسيمات في المنطقة II وهذه الظاهرة تسمى ظاهرة النفق

Tunnell - effect

ملحق ①

تمثيل ديراك (Dirac)

تدعى العناصر التي تمثل الحالات الفيزيائية في ميكانيك الكم ~~بوساطة عناصر~~ بمتجهات الحالة State Vectors في فضاء هلبرت أو لا التمثيل في الإحداثيات الديكارتية أو الكروية.

يستخدم تمثيل ديراك كتمثيلاً رياضياً مناسباً لتمثيل متجه الحالة مستقلاً عن نظام الإحداثيات المستخدم.

طرح ديراك مفهوم الكيت Ket والبرا bra ويطلق عليه برا-كيت (bra-Ket) وهنا يمثل البرا bra المتجهات اليسرى (عناصر الفضاء المتجهي) ويرمز له $\langle\psi|$ برا (ψ)

وكذلك الـ Ket المتجهات اليمنى ويرمز لها $|\psi\rangle$ متجه الكيت

وبالتالي فإن البراكيت Bra-Ket ليعبر عن الجداء الداخلي $\langle\ |\ \rangle$

فإنه $(\phi,\psi)=\langle\phi|\psi\rangle$

وبالتالي فإن الكيت على تمثيله رياضياً بمتجه عمودي حسب ترميز ديراك ويرمز له $|\psi\rangle$ وكمثال

$$|\psi\rangle=\begin{pmatrix}1\\2+i\end{pmatrix}\in C^2 \quad , \quad |\phi\rangle=\begin{pmatrix}1+i\\4\\2i\end{pmatrix}\in C^3$$

وأيضاً يمثل البرا Bra رياضياً بمتجه سطر وذلك من أخذ المرافق العقدي (Complex Conjugation ~~$|\psi\rangle$ للكيت~~) للكيت $|\psi\rangle$

فيكون

$$\langle\psi|=(1 \quad 2-i)\in C^2$$

$$\langle\phi|=(1-i \quad 4 \quad -2i)\in C^3$$

نحصل على المرافق العقدي لمتجه عمود وذلك بتحويل العمود إلى السطر ونعكس إشارة القسم التخيلي وكذلك الأمر للمرافق العقدي لمتجه سطر بتحويل السطر إلى عمود ونعكس إشارة القسم التخيلي.

قبل 1-6 ص 27 ✱

ملخص لبعض المفاهيم وخصائص المؤثر

١- المؤثر هو مجموعة القواعد الرياضية المنطقية التي تحول تابع ما لمجموعة من متحولات إلى تابع آخر للمتحولات نفسها

$$\hat{A}\,\varphi(x,y,z,t) = \phi(x,y,z,t)$$

٢- المؤثر الخطي: هو المؤثر الذي يحقق العلاقة

$\hat{A} = (a + b\frac{d}{dx})$ مثال

$$\hat{A}(\alpha\varphi + \beta\phi) = \alpha\hat{A}\varphi + \beta\hat{A}\phi \qquad \forall\varphi,\ \beta\in\mathbb{C}$$

$\left(\frac{d^2}{dx^2}\right) = \hat{A}$

٣- المؤثرات المتساويان هي المؤثرات التي يتساوى تأثيرها على تابع ما $\forall\varphi$

$$\hat{A}\varphi = \hat{B}\varphi \iff \hat{A} = \hat{B}$$

٤- يتساوى جداء مؤثرين $\hat{A}\hat{B}$ مع مؤثر $\hat{C}$ إذا كان ناتج تأثيره على تابع يساوي ناتج تأثيرها على التابع نفسه

$$\hat{C}\varphi = \hat{A}\cdot\hat{B}\varphi \qquad \forall\varphi$$

هذا الجداء يعني أن المؤثر $\hat{B}$ يؤثر أولاً على التابع φ ثم $\hat{A}$ وهذا بشكل عام لا يتساويان أي

$$\hat{A}\hat{B}\varphi \neq \hat{B}\hat{A}\varphi$$

وحاصل طرحهما ~~[illegible]~~ يسمى المبدل ويأخذ أي قيمة.

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}A = [\hat{A},\hat{B}]$$

وفي حالة تبادل المؤثرات يكون المبدل معدوم.

٥- مؤثر الواحدة $\hat{I}$: هو المؤثر الذي كان ناتج تأثيره على تابع ما يعطي التابع نفسه

$$\hat{I}\varphi = \varphi$$

٦- المؤثر المعاكس $\hat{A}^{-1}$: ~~[illegible]~~ هو المؤثر الذي إذا ضرب بمؤثر آخر كان الجداء مؤثر الواحدة

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$$

حيث $\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

فإذا كان

$$\hat{A}^{-1} = \frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \Leftarrow \hat{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

أما المرافق العقدي لمصفوفة فيتم بالتبديل بين الأسطر والأعمدة مع تغيير إشارة القسم التخيلي لعناصر المصفوفة فمثلاً

$$A = \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ -3-2i & 7+i \end{pmatrix} \Rightarrow \underset{\text{Adjoint}}{A^{+}} = \begin{pmatrix} 1-i & -3+2i \\ 1+i & 7-i \end{pmatrix}$$

ومن خلال ذلك يتبين أنه عند الجداء الداخلي لمصفوفتين يجب أن يكون عدد أعمدة المصفوفة الأولى يساوي عدد أسطر المصفوفة الثانية:

يمكن حساب طويلة أي متجه (النظيم norm) من خلال الضرب الداخلي للمتجه بنفسه حسب ~~الشكل~~ العلاقة التالي

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

وهو عبارة عن عدد حقيقي موجب ومن خلال ذلك يمكن التعبير عن التعامدية أو النظامية بين المتجهات في الفراغ بعد قسمة الناتج على هذا الثابت فيكون

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{when } i=j \\ 0 & \text{when } i\neq j \end{cases}$$

ومن خلال ما سبق فإن عملية الضرب لمتجهين من فضاء هلبرت على الشكل $\langle\psi|\phi|$ وأيضاً $|\psi|\phi\rangle$ هي عمليات ممنوعة أو غير مسموحة وليس لها أي معنى فيزيائي.

"

فراغ هلبرت والفضاء المتجهي؟ Hilbert space

يتكون فضاء هلبرت H من مجموعة من المتجهات ψ, φ ومجموعة من الأعداد السلمية a, b, c التي تحقق الخواص التالية:

1 - يملك فضاء هلبرت جميع خصائص الفضاء المتجهي الخطي ~~المطلق~~ الذي يحقق خصائص قاعدتي الجمع والضرب لعناصره وخصائصها

- قاعدة الجمع - ناتج جمع متجهين من الفضاء هو أيضاً عنصر من الفضاء نفسه
- الخاصة التبديلية $\psi + \phi = \phi + \psi$

- الخاصة التجميعية

$$(\psi+\phi)+\chi = \psi+(\phi+\chi)$$

- يوجد متجه حيادي بالنسبة للجمع

$$\psi+0 = 0+\psi = \psi$$

- يوجد متجه معاكس لكل متجه

$$\psi+(-\psi) = 0$$

ب- قاعدة الضرب بعدد سلمي.

- ينتج عن ضرب عدد سلمي بمتجه متجه جديد ينتمي الى الفضاء نفسه

- الخاصة التجميعية

$$A(b\psi) = (ab)\psi$$

- الخاصة التوزيعية

$$a(\psi+\phi) = a\psi + a\phi$$

- يوجد عنصر حيادي Unitary scalar بالنسبة للضرب $I\psi = \psi I = \psi$

وعنصر خاص (عنصر صفري) Zero scalar

$$0 \cdot \psi = \psi \cdot 0 = 0$$

٢- يُعرّف خاصية الضرب الداخلي في فضاء هلبرت (ψ,ϕ) والذي هو عبارة عن عدد عقدي

بالشكل $(\psi,\phi) = $ Complex number

$$(\psi,\phi) = \psi^*\phi = \langle\psi,\phi\rangle \;\&\; (\phi,\psi) = \phi^*\psi$$

حيث ψ^* هو المرافق العقدي للمتجه ψ ويحقق الخصائص الآتية:

- الضرب الداخلي للعنصر ψ مع العنصر ϕ.

$$(\psi,\phi) = (\phi,\psi)^*$$

- الضرب خطي بالنسبة للحد الثاني

$$(\psi, a\phi_1 + b\phi_2) = a(\psi,\phi_1) + b(\psi,\phi_2)$$

- الضرب لا خطي بالنسبة للحد الأول

$$(a\phi_1 + b\phi_2, \psi) = a^*(\phi_1,\psi) + b^*(\phi_2,\psi)$$

- جداء العنصر مع نفسه عدد حقيقي

$$(\psi,\psi) = \|\psi\|^2 \geq 0$$

٣- فضاء هلبرت عبارة عن فضاء منفصل Separable:

لتكن $\psi_n \in \mathcal{H}$ حيث $n = 1, 2, 3, \ldots$ متتالية كوشي Cauchy sequence فيكون من أجل كل عنصر متجه ψ من هذا الفضاء وأيضاً عدد $\varepsilon > 0$ يجب شرط

$$\|\psi - \psi_n\| < \varepsilon$$

٤ - فضاء هلبرت هو فضاء كامل Complete حيث يوجد من أجل كل عنصر ψ_n من متتالية كوشي تتقارب إلى عنصر آخر بحيث

$$\lim_{n,m\to\infty} \|\psi_n - \psi_m\| = 0$$

ملاحظة: تكون المتجهات مستقلة خطياً إذا وفقط إذا كان

$\sum_{i=1}^{n} a_i \psi_i = 0$ في حال كان $a_1 = a_2 = \cdots = a_n = 0$

أما إذا كان بالإمكان التعبير عن أحد المتجهات ψ_n بدلالة المتجهات الأخرى $\{\psi_i\}$

$$\psi_n = \sum_{i=1}^{n-1} a_i \psi_i + \sum_{n+1}^{N} a_i \psi_i$$

نسمي عندها مجموعة المتجهات $\{\psi_i\}$ بالمتجهات المرتبطة خطياً.

- الجداء الداخلي للتابعين ϕ, ψ ذوي المتحولات المنتظمة بالعلاقة

$$(\psi, \phi) = \sum_n \psi_n^* \phi_n = \langle \psi | \phi \rangle$$

وهو عبارة عن جداء متجه سطري ~~عمودي~~ $\langle\psi|$ متجه عمودي $|\phi\rangle$ مرافقه $(\psi_1^*, \psi_2^*, \ldots \psi_n^*)$

$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix}$ ~~المتجه~~ يعرف عنصر مصفوفة المؤثر $\hat{A}$ بالعلاقة

$$A_{mn} = \langle \psi_m | A | \phi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \hat{A} \phi_m \, dx$$

وبشكل يكون المؤثر المرافق ذاتياً $\hat{A}^+$ للمؤثر $\hat{A}$ بالعلاقة

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle = \left(\langle \phi | \hat{A}^+ | \psi \rangle \right)^*$$

أو

$$\int \psi^* \hat{A} \phi \, dx = \int \phi \, (\hat{A}^+ \psi)^* \, dx$$

- أثبت أن $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$

نجد من التعريف

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle = \left(\langle \phi | \hat{A}^+ | \psi \rangle \right)^* = \left(\langle \psi | (\hat{A}^+)^+ | \phi \rangle \right)^{**}$$

$$= \langle \psi | \hat{A}^{++} | \phi \rangle \Rightarrow \hat{A} = \hat{A}^{++}$$

- احسب $(\alpha\hat{A})^{+}$:

$$\langle\psi|\alpha\hat{A}|\phi\rangle = (\alpha\langle\phi|\hat{A}^{+}|\psi\rangle)^{*} =$$

$$= \alpha^{*}(\langle\phi|\hat{A}^{+}|\psi\rangle)^{*} = \alpha^{*}\hat{A}^{+} \quad \forall\alpha\in\mathbb{C}$$

- احسب مرافق المؤثر $\hat{A}\hat{B}$

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\phi\rangle = (\langle\phi|(AB)^{+}|\psi\rangle)^{*}$$

وأيضاً

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\phi\rangle = (\hat{B}\phi|\hat{A}^{+}|\psi\rangle)^{*} = \langle\hat{A}^{+}\psi|\hat{B}|\phi\rangle$$

$$= (\langle\phi|\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}|\psi\rangle)^{*}$$

ومنه

$$(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$$

- نعرف المؤثر الهرميتي بأنه المؤثر الذي يساوي مرافقه الهرميتي او مرافقه لذاته أي $A = A^{+}$ أو

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^{*}$$

والدالة ψ, ϕ تابعتين لـ x فقط نجد التعريف على الشكل

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\hat{x}\phi\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\phi(\hat{x}\psi)^{*}dx \Rightarrow \langle\psi|\hat{x}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{x}|\psi\rangle^{*}$$

(١)

— أثبت أن $\hat{A} = \hat{x}$ هو مؤثر هرميتي

$$\hat{A} = \hat{x} \Rightarrow \hat{x}\,\varphi(x) = x\,\varphi(x) \qquad \forall \varphi(x) \in \mathcal{L}^2$$

$$\langle \psi | \hat{x} | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \hat{x}\, \varphi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \varphi(x)\, dx$$

نطبق بالعكس ثم

$$\langle \psi | \hat{x} | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)\, (x\psi)^*\, dx = \left(\langle \varphi | \hat{x} | \psi \rangle\right)^*$$

أثبت أن $\hat{d} = \frac{d}{dx}$ هرميتي

نعرف $\psi, \varphi \in \mathcal{L}^2$ وبالتالي حسب التعريف

$$\langle \psi | \hat{d} | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \frac{d}{dx}\, \varphi(x)\, dx$$

بالتجزئة نعرف

$$\int v\, du = uv - \int u\, dv$$

نعرف $v = \psi^* \Rightarrow dv = \frac{d\psi^*}{dx} dx$

$du = \frac{d\varphi}{dx} dx \Rightarrow u = \varphi$ وبالتالي

$$\langle \psi | \hat{d} | \varphi \rangle = [uv]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} u\, dv$$

$$= \underbrace{[\varphi(x)\, \psi^*(x)]_{-\infty}^{\infty}}_{\to 0} - \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\, \frac{d\psi^*}{dx}\, dx$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} \varphi\, \frac{d\psi^*}{dx}\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi \left(-\frac{d}{dx}\psi^*\right) dx$$

$$= \left(\langle \varphi | -\hat{d} | \psi \rangle\right)^*$$

وبالتالي $\hat{d}$ ليس هرميتي

معادلة القيم الخاصة أو القيم الذاتية

نسمي المعادلة $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ مع $|\psi\rangle \in \mathcal{L}^2$ و $\lambda \in \mathbb{C}$

وبالتالي ψ تابع موجي خاص من المؤثر $\hat{A}$ مقابل للقيمة الخاصة λ

وهي مشابهة لمعادلة شرودينجر

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

إذا كان لدينا التوابع

$$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, \ldots\ldots |\psi_n\rangle$$

بحيث

$$\hat{A}|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle \qquad A|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle$$

$$\vdots$$

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle \quad ; \quad \lambda_1, \lambda_2 \ldots\ldots \lambda_n \in \mathbb{C}$$

نسمي العناصر $A_{11} \ldots$ حتى A_{nn} عناصر المصفوفة

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & & & \\ \vdots & & & \\ A_{n1} & \cdots & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} ; \quad A_{ij} = \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle$$

$$; \; i, j = 1, 2, \ldots n$$

خواص المؤثرات الهرميتية

1 - إذا كان لمؤثرين هرميتيين التوابع الخاصة نفسها فإنهما يتبادلان

الفرض $\hat{A}, \hat{B}$ مؤثران هرميتيان

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \qquad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{L}^2$$
$$\hat{B}|\psi\rangle = b|\psi\rangle \qquad \forall\, a, b \in \mathbb{C}$$

الطلب $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \iff \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

البرهان

$$\hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = \hat{A}(b|\psi\rangle) = b\hat{A}|\psi\rangle = ba|\psi\rangle$$

$$\hat{B}(\hat{A}|\psi\rangle) = \hat{B}(a|\psi\rangle) = a\hat{B}|\psi\rangle = ab|\psi\rangle = ba|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle \Rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

②

- ~~[illegible]~~ القيم الخاصة لأي مؤثر هرميتي هي قيم حقيقية .

نعرف $\hat{A}$ مؤثر هرميتي حيث $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$; $\forall|\psi\rangle \in \mathcal{L}^2$, $\lambda \in \mathbb{C}$

ثم أثبت أن $\lambda \in \mathbb{R}$ أو $\lambda = \lambda^*$

البرهان نضرب المعادلة المميزة بالبرا $\langle\psi|$ من اليسار فيكون

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = (\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle)^*$$

$$\langle\psi|\lambda|\psi\rangle = (\langle\psi|\lambda|\psi\rangle)^*$$

$$\lambda\langle\psi|\psi\rangle = (\lambda\langle\psi|\psi\rangle)^* = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \lambda = \lambda^* \quad ; \quad \langle\psi|\psi\rangle \neq 0$$

وبالتالي λ قيمة حقيقية .

- التابعان (الأشعة) الخاصان المقابلان لقيمتين خاصتين مختلفتين لمؤثر هرميتي متعامدين .

نعرف $\hat{A}$ هرميتي وأن $\hat{A}|\psi_m\rangle = \lambda_m|\psi_m\rangle$ & $\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$

حيث $\psi_n , \psi_m \in \mathcal{L}^2$; $\lambda_n \neq \lambda_m$; $|\psi_n\rangle \neq |\psi_m\rangle$

فيكون

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$$

نضرب الطرفين بالبرا $\langle\psi_m|$ من اليسار

$$\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle = (\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_m\rangle)^*$$

$$\langle\psi_m|\lambda_n|\psi_n\rangle = (\langle\psi_n|\lambda_m|\psi_m\rangle)^*$$

$$\lambda_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \lambda_m^*\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \lambda_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle$$

وبالتالي

$$\lambda_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle - \lambda_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$$

$$(\lambda_n - \lambda_m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$$

هذا يعني أن $|\psi_n\rangle$ يعامد $|\psi_m\rangle$ كون فراغ هلبرت هو فراغ شعاعات والشعاعات ~~هي~~ متعامدة

متى يكون $\langle \psi_m | \psi_n \rangle \neq 0$ عندما يكون $n = m$

يكون $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$ وهو الكثافة الاحتمالية

وبالتالي يكون بشكل عام

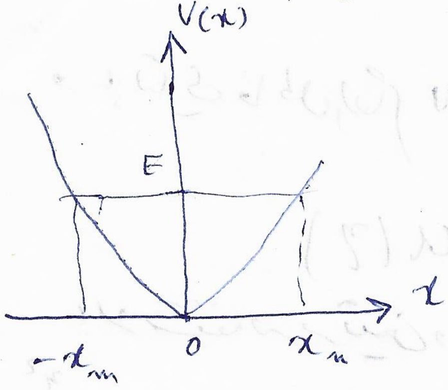
$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ 1 & n = m \end{cases} = \delta_{nm}$$

رمز كرونكر

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

الهزاز التوافقي (حل معادلة شرودنجر)

سندرس حركة جسيم في الهزازية بين نقطتين حول وضع التوازن وهي حالة اهتزاز الذرات في الجزيئات ثنائية الذرة.



إن الطاقة الكامنة $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

وإن القوة المؤثرة على الجسم هي

$$\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial x}\vec{i} = -m\omega^2 x\vec{i} = -\alpha x\vec{i}$$

وبما أن $\vec{F}$ تتجه دائماً نحو مركز الإحداثيات مما يجعل النقطة المادية تتحرك حركة خطية حول النقطة O

ولحل هذه المسألة نعوض في معادلة شرودنجر الكمون $\frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ وبالتالي

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

لنأخذ متحولاً جديداً $\eta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$ وثابتاً $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$

ونعوض في المعادلة السابقة

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} - \eta^2\psi = \lambda\psi \qquad (*)$$

وهي معادلة تفاضلية خطية يمكن أن تحل على طريقة السلاسل ونحسب $E(\lambda)$ من الشروط الحدية على التابع الموجي.

بحل المعادلة التفاضلية التقاربي عندما η وبالتالي x تنتهي إلى اللانهاية وعندها نهمل الطرف الثاني لصغره بالنسبة للطرف الأول فيكون

$$\psi''_\infty - \eta^2\psi_\infty = 0$$

ونبحث عن حل من الشكل $\psi = e^{\varepsilon\eta^2}$ وبالتالي

$$\psi''_\infty = (4\varepsilon^2\eta^2 + 2\varepsilon)e^{\varepsilon\eta^2} \simeq 4\varepsilon^2\eta^2 e^{\varepsilon\eta^2}$$

بالتعويض في المعادلة والاختصار على $e^{\varepsilon\eta^2}$ نجد

$$4\varepsilon^2\eta^2 - \eta^2 = 0$$

بالحل نجد أن $\varepsilon = \pm\frac{1}{2}$ ويصبح الحل التقاربي

$$\psi_\infty = c_1 e^{-\frac{1}{2}\eta^2} + c_2 e^{\frac{1}{2}\eta^2}$$

وبسبب محدودية الـ ψ يجب أن يكون $C_2 = 0$ أما C_1 نعتبره تساوي الواحد لأن الـ ψ غير منتظم ([illegible])

$$\psi_\infty = e^{-\frac{1}{2}\eta^2}$$

وبالتالي فالحل العام للمعادلة $\circledast$ يكون

$$\psi(\eta) = \psi_\infty u(\eta) = e^{-\frac{1}{2}\eta^2} u(\eta)$$

بالاشتقاق مرتين والتعويض نجد

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

$$u'' - 2\eta u' + (\lambda - 1) u = 0$$

وهي معادلة خطية من المرتبة الثانية نحلها بطريقة السلاسل.

$$u = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \eta^k \qquad u' = \sum_{k=0}^{\infty} b_k k \eta^{k-1}$$

$$u'' = \sum_{k=0}^{\infty} b_k k(k-1) \eta^{k-2}$$

بالتبديل في المعادلة نحصل على

$$\sum_{k=0}^{\infty} b_k \left[k(k-1)\eta^{k-2} - (2k + 1 - \lambda)\eta^k\right] = 0$$

إذا أبدلنا في السلسلة الأولى كل k بـ $k+2$ لنجعل المعادلة متجانسة بالنسبة η^k فنحصل

$$\sum_{k=0}^{\infty} \eta^k \left[(k+2)(k+1) b_{k+2} - (2k + 1 - \lambda) b_k\right] = 0$$

ولتحقيق هذه المعادلة يجب أن تكون أمثال η^k معدومة حيث $k = 0, 1, 2, \ldots$ ومنه نجد

$$b_{k+2} = \frac{2k + 1 - \lambda}{(k+2)(k+1)} b_k$$

وبما أن b_{k+2} مرتبط بـ b_k فإننا نحصل على الفردية أو الزوجية
ولذلك يجب أن يكون التابع محدود وبالتالي نجعل السلسلة متقاربة
وتنقطع عند قيمة k بحيث يكون $k=n$ أعلى حد للسلسلة

$$b_k \neq 0 \quad , \quad b_{k+2}=0 \Rightarrow 2n+1-\lambda=0$$

وبالتالي شرط انقطاع السلسلة هو $\lambda = 2n+1$

وبالتالي نحسب قيمة الطاقة من العلاقة $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ وبالتالي

$$E = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

إن أصغر قيمة للطاقة هي $\frac{1}{2}\hbar\omega$ والموافقة لقيمة $n=0$
على خلاف حفرة الكمون ($n \neq 0$) وبالتالي فخطوط الطاقة أو
فرق قيمة سوية طاقة عن سابقتها $\hbar\omega$.

أوجد مستويات الطاقة الموافقة $n^2=n_1^2+n_2^2+n_3^2$ وطاقة الموافقة والتابع أو التوابع الموجية ودرجة الانطباق

n_1	n_2	n_3	$n^2=n_1^2+n_2^2+n_3^2$	$E_n=n^2E_1$	$\psi_{n_1n_2n_3}$	درجة الانطباق g_n
1	1	1	3	$3E_1$	ψ_{111}	1
1	1	2	6	$6E_1$	ψ_{112}	3
1	2	1			ψ_{121}	
2	1	1			ψ_{211}	
2	2	1	9	$9E_1$	ψ_{221}	3
2	1	2			ψ_{212}	
1	2	2			ψ_{122}	
2	2	2	12	$12E_1$	ψ_{222}	1
3	2	1	14	$14E_1$	ψ_{321}	6
3	1	2			ψ_{312}	
2	1	3			ψ_{213}	
2	3	1			ψ_{231}	
1	3	2			ψ_{132}	
1	2	3			ψ_{123}	
3	2	2	17	$17E_1$	ψ_{322}	3
2	3	2			ψ_{232}	
2	2	3			ψ_{223}	
4	1	1	18	$18E_1$	ψ_{411}	3
1	4	1			ψ_{141}	
1	1	4			ψ_{114}	
3	3	1	19	$19E_1$	ψ_{331}	3
3	1	3			ψ_{313}	
1	3	3			ψ_{133}	

4_{421}

4 2 1

4 1 2

2 4 1 $\quad$ 21* $\quad$ 21E, $\quad$ 6

2 1 4

1 2 4

1 4 2