كلية العلوم

القسم : **الكيمياء**

السنة : **الثانية**

المادة : الكيمياء الكمومية

المحاضرة : الثالثة/نظري/تنزيل دكتور

{{ A to Z مكتبة }}

Facebook Group : A to Z مكتبة

الفصل الثالث

الهزاز التوافقي أحادي البعد
The One-Dimensional Harmonic Oscillator

1-3 مقدمة Introduction

درسنا في الفصل الثاني بعض الجمل ذات طاقات كامنة ثابتة، وسندرس في هذا الفصل الهزاز التوافقي- جملة ذات كمون متغير باستمرار. ثمة عدة أسباب تدعو لدراسة هذه المسألة بالتفصيل؛ إذ يؤدي الهزاز التوافقي الكمومي دوراً جوهرياً لفهم الاهتزازات الجزيئية، وأطيافها، وأثرها في الخواص الترموديناميكية، وتمثل النتائج النوعية للمسألة مثالاً على المفاهيم التي طرحناها في الفصلين الأول والثاني. سنعرض في هذا الفصل الطريقة الرياضية المستخدمة في الكيمياء الكمومية لحل هذه المسألة، ولما كان العديد من الكيميائيين غير معتادين كثيراً على المفاهيم الرياضية، سنتعامل معها بالتفصيل في سياق هذه المسألة.

2-3 بعض مميزات الهزاز التوافقي التقليدي أحادي البعد
Some Characteristics of the Classical One-Dimensional Harmonic Oscillator

يمثل رقاص الساعة المعلق بسلك عديم الوزن، والمتأرجح بزاوية صغيرة جداً، مثالاً على الهزاز التوافقي التقليدي. فهو يمثل هزازاً؛ لأن حركته تتم ذهاباً وإياباً على المسار نفسه، ويعد توافقياً من حيث أن القوة (قوة إعادة) المطبقة على الكتلة تتناسب

طرداً مع إزاحتها عن موضع سكونها. يدعى قانون القوة هذا قانون هوك، الذي يمثل نموذجاً تقريبياً أولياً عاماً لتحليل جملة مهتزة حول موضع توازنها. إذا كان المحور x يمثل إزاحة الكتلة، وأن $x = 0$ يصف موضع توازنها، يمكن التعبير عن قوة الإعادة بالعلاقة الآتية:

$$F = -kx \tag{1.3}$$

إذ يمثل k ثابت القوة، وتعني إشارة السالب أن القوة تزيح الكتلة دائماً نحو موضع السكون، ويمكن استخدام هذه العبارة للقوة لتحديد عبارة الحركة لكتلة ما؛ أي العبارة التي تربط موضعها في الفراغ x مع الزمن t:

$$F = -kx(t) = ma = m\frac{d^2x(t)}{dt^2} \tag{2.3}$$

أو

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = (-k/m)x(t) \tag{3.3}$$

تبعا لهذه العلاقة، هذا يعني أن $x(t)$ يمثل ذلك التابع الذي عند اشتقاقه مرتين يتجدد من جديد بضربه بالمقدار $-k/m$. إن الحل العام لهذه المعادلة هو:

$$x(t) = a\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) + b\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) \tag{4.3}$$

إذا تطلب الأمر معرفة $x(t)$ عند قيمته العظمى L عند $t = 0$ (على الرغم من أن الرقاص يكون مستقراً عند موضع الإزاحة العظمى، ثم ينطلق عند $t = 0$)، فهذا يعني أن $b = L$. ولما كان الرقاص ساكناً عند $t = 0$ أيضاً، فإن $[dx(t)/dt]_{t=0} = 0$، ولذلك $a = 0$. وبناءً على ذلك نكتب:

$$x(t) = L\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) \tag{5.3}$$

وهكذا تعزى عبارة الحركة [العلاقة (3.3)] إلى التابع $x(t)$، الذي يصف سلوك الهزاز، ويتمتع هذا التابع بميزة حدية مثلثية متعلقة بالحركة التوافقية. نجد من هذا

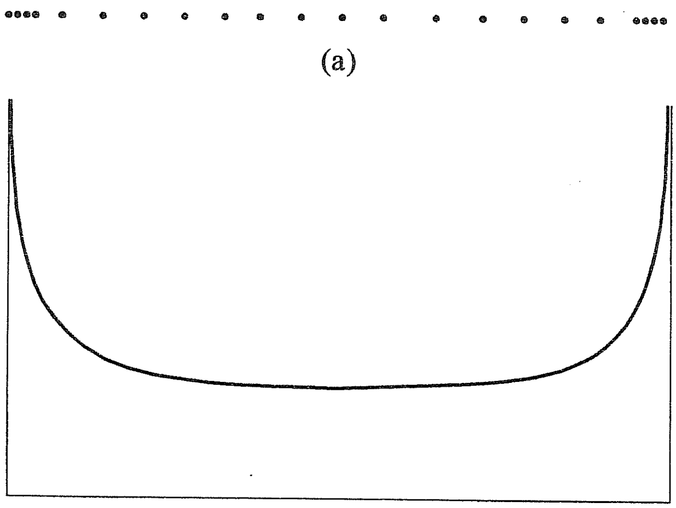
التابع أن $x(t)$ يكرر نفسه كلما ازداد تابع جيب التمام بالمقدار 2π. وهذا يتطلب فترة زمنية محددة t'. وهكذا يقوم الهزاز بحركة كاملة ذهاباً وإياباً خلال زمن قدره t'، الذي يعطى بالعلاقة الآتية:

$$\sqrt{\frac{k}{m}}t' = 2\pi \Rightarrow t' = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{6.3}$$

ويعبر عن تواتر الهزاز بالعلاقة الآتية:

$$\nu = \frac{1}{t'} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \tag{7.3}$$

إذا راقبنا حركة الرقاص المتأرجح من الأعلى نحو الأسفل (أي بشكل شاقولي) بوسيلة ما عند لحظات زمنية مختلفة، لحصلنا على النتيجة المبينة في الشكل (1a-3)؛ إذ نلاحظ أن عدد المواضع يكون أكثر بالقرب من أطراف تأرجحه (التي تدعى بنقاط الانعطاف)، ثم تصبح حركة الرقاص وسطياً أسرع كلما هبط نحو الوسط، وهذا ناتج عن حقيقة أن الطاقة الكامنة للكتلة بمجملها تتحول إلى طاقة حركية عند النقطة



(a)

(b)

الشكل (1-3): (a) نتائج مراقبة الرقاص المتأرجح بدءاً من الأعلى. (b) تابع التوزع الموافق للحد المستمر للتوزع المتقطع المبين في (a).

الوسطى. وبناءً على ذلك يمكن التوصل من التصور التقليدي للتوزع الوسطي اللحظي لسلوك الهزاز التوافقي على امتداد إحداثية الإزاحة إلى النتيجة: يصبح تابع التوزع هذا أعظمياً في المناطق التي يكون فيها الطاقة الكامنة أعظمية [الشكل (3-1b)].

لنحسب الطاقة الكامنة الوسطية اللحظية ونقارنها بالطاقة الحركية للهزاز التوافقي التقليدي. عندما يقع الجسيم عند موضع لحظي ما x'، فإن طاقته الكامنة هي:

$$V(x') = \int_0^{x'} k\,x\,dx = \frac{1}{2}kx'^2 \tag{8.3}$$

تعطى القيمة المتصاعدة للطاقة الكامنة لاهتزازة كاملة V_c بالتكامل الآتي:

$$V_c(t'-0) = \int_0^{t'} V(t)\,dt = \frac{1}{2}k\int_0^{t'} x(t)^2\,dt \tag{9.3}$$

بتعويض علاقة $x(t)$ من العلاقة (5.3)، نحصل على النتيجة الآتية:

$$\begin{aligned} V_c(t'-0) &= \frac{1}{2}kL\int_0^{t'} \cos^2\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)dt \\ &= \frac{1}{2}kL^2\sqrt{m/k}\int_0^{t'} \cos^2\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)d\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) \end{aligned} \tag{10.3}$$

عندما $t = t'$، و $\sqrt{k/m}\,t = 2\pi$ [انظر العلاقة (7.3)]، يمكن إعادة كتابة العلاقة (10.3) على النحو الآتي (بافتراض أن $y = \sqrt{k/m}\,t$):

$$\begin{aligned} V_c(t'-0) &= \frac{1}{2}kL^2\sqrt{m/k}\int_0^{2\pi} \cos^2 y\,dy \\ &= (\pi/2)kL^2\sqrt{m/k}) \end{aligned} \tag{11.3}$$

إذ قسمنا الآن على t' نحصل على الطاقة الكامنة الوسطية خلال واحدة الزمن:

$$\bar{V} = \frac{V_c(t'-0)}{t'} = \frac{(\pi/2)kL^2\sqrt{m/k})}{2\pi\sqrt{m/k})} = \frac{kL^2}{4} \tag{12.3}$$

ولمعرفة الطاقة الكلية، التي تمثل ثابت الحركة، يجب الحصول على الطاقة الحركية الوسطية بأخذ الفرق. يمكن اختيار أية لحظة زمنية لتقدير الطاقة الكلية، وسنختار

لحظة سكونها ($t=0$ و $x=L$). لما كانت الكتلة ساكنة، هذا يعني أن الطاقة الكلية تساوي الطاقة الكامنة:

$$E=\tfrac{1}{2}kL^2 \qquad (13.3)$$

بمقارنة العلاقتين (12.3) و (13.3)، نجد أن $\overline{T}=kL^2/4$؛ لأن $E=\overline{T}+\overline{V}$، هذا يعني أن الهزاز التوافقي التقليدي يصرف وسطيا نصف طاقته الكلية على شكل طاقة كامنة، والنصف الآخر على شكل طاقة حركية.

مثال 3-1: ربطت كتلة؛ وزنها 10.00 g، بنابض ذي ثابت قوة $k=0.0246\,\mathrm{N\,m^{-1}}$، ثم مطت من السكون عند $x=0$ حتى $x=0.400\,\mathrm{m}$، وحررت بعد ذلك. ما طاقتها الكلية؟ وما تواتر اهتزازها؟ وكيف يتغير الجوابان إذا كانت الكتلة تزن 40.00 g؟

الحل: نعلم أن الطاقة الكلية تساوي $E=T+V$، وتكون $T=0$ عند $x=0.400\,\mathrm{m}$، ولذلك فإن:

$$E=V=kx^2/2=0.50(0.0246\,\mathrm{N\,m^{-1}})(0.400\,\mathrm{m})^2=0.0020\,\mathrm{J}$$

يحدد التواتر من العلاقة الآتية:

$$\nu=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{0.0246\,\mathrm{m^{-1}}}{0.0100\,\mathrm{kg}}\right)^{1/2}=0.25\,\mathrm{s^{-1}}$$

(c) إن E لن تتغير، وتنخفض ν إلى النصف $0.125\,\mathrm{s^{-1}}$؛ إذ تتعلق الطاقة بثابت القوة وإزاحة الهزاز ولا تتعلق بكتلة الهزاز، في حين يتعلق التواتر بثابت القوة والكتلة، وكلما كبرت الكتلة، انخفض تواتر الهزاز من أجل ثابت القوة نفسه.

3-3 الهزاز التوافقي الكمومي
The Quantum Harmonic Oscillator

لقد وجدنا سابقاً [العلاقة (8.3)] أن الطاقة الكامنة للهزاز التوافقي تعطى بالعلاقة الآتية:

$$V(x)=\tfrac{1}{2}kx^2 \qquad (14.3)$$

وهذا يمكننا مباشرة من كتابة معادلة شرودينغر من أجل الهزاز التوافقي على النحو الآتي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\right]\psi(x)=E\psi(x) \qquad (15.3)$$

سنعرض الحل التفصيلي لهذه المعادلة التفاضلية في الفقرة الآتية. وهنا سنبين أنه يمكن فهم الفكرة العامة حول طبيعة الحلول لهذه المعادلة بإجراء مقارنتها مع الجمل المدروسة في الفصل الثاني.

يوضح الشكل (2a-3) تابع الكمون للهزاز التوافقي، وبعض قيمه الخاصة، وتوابعه الخاصة. يمثل تابع الكمون قطعاً مكافئاً [العلاقة (14.3)] متمركز عند $x=0$، ومتمتع بقيمة مساوية الصفر عند الوضع الأدنى، ورسمت للمقارنة معلومات مشابهة في الشكل (2b-3) من أجل جسيم في صندوق بحواجز مرتفعة بصورة لامتناهية، ويمكن تلخيص النتائج المهمة للهزاز التوافقي على النحو الآتي:

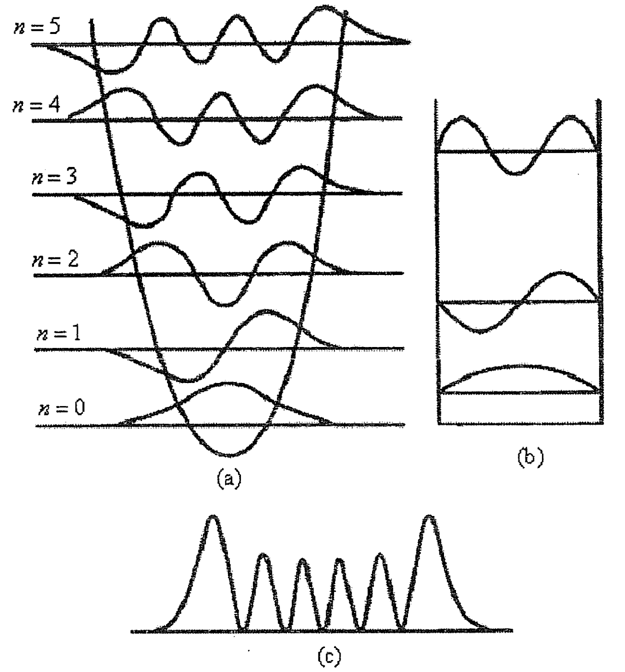
1) إن المسافة الفاصلة بين سويات الطاقة للهزاز التوافقي ثابتة، في حين أن هذه المسافة في صندوق ذي حواجز لامتناهية متباعدة.

2) إن التوابع الموجية للهزاز التوافقي إما متناظرة؛ وإما مضادة للتناظر نتيجة الانعكاس عبر $x=0$، وهذا ناشئ عن تغير الهاملتون نتيجة الانعكاس عبر $x=0$، ولأن التوابع الخاصة غير متوالدة. يُطبق أيضاً هذان الشرطان على مسألة الصندوق.

3) يتمتع الهزاز التوافقي بطاقة نقطة الصفر؛ إذ يقع خط أخفض سوية طاقية $n=0$ فوق النقطة الدنيا للقطع المكافئ عند $V=0$ [الشكل (2a.3)].

4) وجد أن الجسيم المتمتع باحتمال وجوده عند الحواف يحقق نقاط الانعطاف التقليدية؛ أي يخترق الحاجز. يتوقع ذلك على أساس الدراسات السابقة؛ لأن الحاجز متناهي (محدود) عند نقطة الانعطاف التقليدي (إذ يصبح الكمون لامتناهياً عندما $x=\pm\infty$ فقط).

5) إن احتمال وجود الجسيم في حالة أخفض سوية طاقية يكون أعظم ما يمكن في المنطقة المركزية الكمونية، في حين يقترب هذا الاحتمال في سويات الطاقة الأعلى كثيراً من النتائج التقليدية ليصبح أفضل في مناطق الكمونات الأعلى [الشكل (2c-3)].



الشكل (3-2): تابع الكمون، وسويات الطاقة، والتوابع الموجية من أجل (a) الهزاز التوافقي، (b) جسيم في حفرة كمون، (c) $|\psi|^2$ للهزاز التوافقي في الحالة $n = 5$.

3-4 حل معادلة شرودينغر للهزاز التوافقي

Solution of the Harmonic Oscillator Schrödinger Equation

3-4-1 تبسيط معادلة شرودينغر

Simplifying the Schrödinger Equation

يمكن تبسيط المعادلة (15.3) بإدخال العبارتين الآتيتين:

$$\alpha \equiv 8\pi^2 mE / h^2 \tag{16.3}$$

$$\beta^2 \equiv 4\pi^2 mk / h^2 \tag{17.3}$$

إذ يتمتع المقداران α و β بالواحدة m^{-2}.

سنفترض أن β يمثل الجذر الموجب للمقدار β^2، ومن الضروري أن يكون المقدار α موجباً. عندئذ يمكن كتابة معادلة شرودينغر على النحو الآتي:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+(\alpha-\beta^2x^2)\psi(x)=0 \qquad (18.3)$$

2-4-3 التحقق من السلوك المقارب الصحيح

Establishing the Correct Asymptotic Behavior

عند القيم الكبيرة جداً للمقدار $|x|$، يصبح المقدار α (الذي يعد ثابتاً؛ لأن E ثابت) مهملاً مقارنة بالمقدار β^2x^2. أي أن معادلة شرودينغر (18.3) تقترب أكثر فأكثر من الشكل المقارب، أي عندما $|x|\to\infty$، فإن:

$$d^2\psi(x)/dx^2=\beta^2x^2\psi(x) \qquad (19.3)$$

ما نحتاجه، هو الحلول $\psi(x)$ للمعادلة (19.3) عند القيم الكبيرة للمقدار $|x|$، ويمكن الحصول على هذا الحل من القاعدة العامة لمشتقات التوابع الآسية، التي توصلنا إلى الحل الآتي:

$$\psi=q(x)\exp(-\beta x^2/2) \qquad (20.3)$$

فهو يتمتع بالسلوك الصحيح المقارب من أجل القيم الكبيرة للمقدار $|x|$، إذا لم يتمثل أي حد آخر مهيمن عند هذه القيم، ويبقى تحديد التابع $q(x)$.

3-4-3 المعادلة التفاضلية من أجل $q(x)$

The Differential Equation for $q(x)$

يؤدي تعويض العلاقة (20.3) في معادلة شرودينغر (18.3) إلى النتيجة الآتية:

$$\exp(-\beta x^2/2)\left[-\beta q(x)-2\beta x\frac{dq(x)}{dx}+\frac{d^2q(x)}{dx^2}-\alpha q(x)\right]=0 \qquad (21.3)$$

وتعد هذه العلاقة محققة فقط إذا كان الحد بين قوسين مربعين مساوياً الصفر؛ أي يجب أن يكون:

$$\frac{d^2q(x)}{dx^2}-2\beta x\frac{dq(x)}{dx}+(\alpha-\beta)q(x)=0 \qquad (22.3)$$

وبذلك نكون قد حصلنا على المعادلة التفضلية للتابع $q(x)$. لنقوم عند هـذا الوضـع ببعض التحويلات للمتغيرات، لجعل المعالة بصيغتها المبسطة.

ليكن $y=\sqrt{\beta}x$، ونعرف $f(y)$ على النحو الآتي:

$$f(y)\equiv f\left(\sqrt{\beta}x\right)=q(x) \qquad (23.3)$$

فنحصل في النتيجة على المعادلة التفاضلية الآتية (بعد التقسيم على β):

$$\frac{d^2f(y)}{dy^2}-2y\frac{df(y)}{dy}+(\alpha/\beta-1)f(y)=0 \qquad (24.3)$$

4-4-3 تمثيل f بصفته سلسلة قوى

Representing of f as a Power Series

لكي يكون التابع الموجي ψ ومشتقه مستمراً ووحيد القيمة، يجب أن يخضع التابع $f(y)$ لشروط الاستمرارية نفسها ووحدانية القيمة. هل يتمتع أي تابع بهذه الخصائص؟ بالطبع يوجد عدد منها لا يمكن إحصائه. يمكن افتراض التابع $f(y)$ المرتبط بالتابع ψ قابلاً للنشر بحسب سلسلة قوى متكاملة بالنسبة إلى المتحول y كما يلي:

$$f(y)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n y^n \qquad (25.3)$$

إذ تشكل القوى الموجبة للمتحول y مجموعة متكاملة، ولكن إذا نزعنا أحد حدود المجموعة، وليكن الأول (القوة صفر للمتحول y)، فإن المجموعة لا تعد كاملة. هذا يعني أن الحدود المتبقية للمجموعة لن تعدل الدور الذي يؤديه الحد المفقود. بمعنى آخر، لا يمكن التعبير عن الحد المفقود بصفته تركيب خطي للحدود المتبقية. وهذا ما يعني أن القوى الموجبة لـ y تمثل مجموعة متكاملة، وسنبحث الآن عن عبارة المعاملات c_n المجهولة.

5-4-3 استنتاج علاقة المعاملات من أجل العلاقة f

Establishing a Recursion Relation for f

لاحظ أنه إذا كان:

$$f(y)=c_0+c_1y+c_2y^2+c_3y^3+c_4y^4+\cdots \qquad (26.3)$$

فإن:

$$df(y)/dy = c_1 + 2c_2 y + 3c_3 y^2 + 4c_4 y^3 + \cdots \tag{27.3}$$

و

$$d^2 f(y)/dy^2 = 1\cdot 2c_2 + 2\cdot 3c_3 y + 3\cdot 4c_4 y^2 + \cdots \tag{28.3}$$

ويؤدي تعويض هذه العلاقات في العلاقة (24.3) إلى النتيجة الآتية:

$$\begin{aligned} &1\cdot 2c_2 + 2\cdot 3c_3 y + 3\cdot 4c_4 y^2 + \cdots - 2c_1 y - 2\cdot 2c_2 - 2\cdot 3c_3 y^3 - \cdots \\ &+[(\alpha/\beta)-1]c_0 + [(\alpha/\beta)-1]c_1 y + [(\alpha/\beta)-1]c_2 y^2 + \cdots = 0 \end{aligned} \tag{29.3}$$

سنعتمد الآن على تلك الحقيقة أن القوى المتنوعة للمتحول y تشكل مجموعة مستقلة خطياً. تبين العلاقة (29.3) أن العبارة عند الطرف الأيسر تساوي الصفر من أجل جميع القيم للمتحول y. توجد وسيلتان لتحقيق هذا، وسنعرض إحدى الوسائل، التي تجعل الأجزاء المتنوعة المستقلة للعلاقة (29.3) مساوية الصفر بصورة مستقلة – أي أن الثابت يساوي الصفر، وأمثال y تساوي الصفر، وهكذا. وهذا يعطينا مجموعة من المعادلات. عندئذٍ، يؤدي جعل الحد الثابت مساوياً الصفر إلى العلاقة الآتية:

$$2c_2 + [(\alpha/\beta - 1)]c_0 = 0 \cdots \quad m = 0 \tag{30.3}$$

ويؤدي جعل أمثال y^1 مساوية الصفر إلى العلاقة الآتية:

$$2\cdot 3c_3 - 2c_1 + [(\alpha/\beta - 1)]c_1 = 0 \cdots \quad m = 1 \tag{31.3}$$

وتعطي حدود y^2 النتيجة الآتية:

$$3\cdot 4c_3 - 2\cdot 2c_2 + [(\alpha/\beta - 1)]c_2 = 0 \cdots \quad m = 2 \tag{32.3}$$

نلاحظ أن هذه المعادلات تحقق النتيجة العامة الآتية:

$$(m+1)(m+2)c_{m+2} + [(\alpha/\beta) - 1 - 2m]c_m = 0 \tag{33.3}$$

$$\boxed{c_{m+2} = \frac{-[(\alpha/\beta) - 2m - 1]}{(m+1)(m+2)} c_m} \tag{34.3}$$

تدعى العلاقة (34.3) علاقة المعاملات. فإذا علمنا c_0، نستطيع معرفة c_2، و c_4، و c_6 بالتطبيق المستمر للعلاقة (34.3). بصورة مشابهة، ولكن بمعرفة c_1، نستطيع معرفة

c_3، c_5 و c_7، إلخ. وهكذا يتضح أن معاملات القوى الزوجية للمتحول y، وكـذلك القوى الفردية للمتحول y، تشكل مجموعتين منفصلتين، ويحدد اختيار c_0 إحدى المجموعتين، في حين يحدد c_1 المجموعة الأخرى. إن هذا التجزيء إلى مجموعتين يعد مقبولاً؛ لأن الحل النهائي يجب أن يكون متناظراً أو مضاداً للتناظر بالنسبة إلى y (انظر الفقرة 3.3). إن الجزء المقارب لـ ψ، $\exp(-\beta x^2/2)$، يجب أن يكون متناظراً حول $x = 0$. ولذلك يتوقع أن يكون الجزء الآخر للتابع ψ، أي $f(y)$، إما متناظراً (القوى الزوجية للمتحول $y = \sqrt{\beta}x$)، وإما مضاداً للتناظر (القوى الفردية). وهكذا يمكننا مسبقا استنتاج أن بعض الحلول ستحقق العلاقات $c_0 \neq 0$، و $c_2 \neq 0$، و $c_4 \neq 0$، ...، و $c_1 = 0$، و $c_3 = 0$، و $c_5 = 0$، ...، إلخ، وينتج عن ذلك الحلول المتناظرة، أما الحلول البقية المحققة للعلاقات $c_1 \neq 0$، و $c_3 \neq 0$، و $c_5 \neq 0$، ...، و $c_0 = 0$، و $c_2 = 0$، و $c_4 = 0$، ...، إلخ، تعد مضادة للتناظر.

6-4-3 منع $f(y)$ من هيمنة السلوك المقارب

Preventing $f(y)$ from Dominating the Asymptotic Behavior

سندرس الآن السلوك المقارب للتابع $f(y)$. لنتذكر أنه عند القيم الكبيرة جداً للمقدار $|y|$، يجب أن يصبح $f(y)$ مهملاً مقارنة مع $\exp(-y^2/2) \equiv \exp(-\beta x^2/2)$. ولكن يعجز التابع $f(y)$ عن امتلاك هذا السلوك إذا كانت عبارة سلسلة قوته طويلة بصورة لامتناهية؛ أي أنه يسلك سلوكاً مقارباً لسلوك $\exp(y^2)$، الذي يهيمن على سلوك $\exp(y^2/2)$. هذا يعني أنه، عند القيم الكبيرة للمتحول y، يسلك $f(y)$ سلوك $\exp(y^2)$، عندما تكون الحدود من المراتب الأعلى. أي أن:

$$\lim_{y\to\infty} \psi(y) = \lim_{y\to\infty} f(y)\exp(-y^2/2) = \exp(y^2/2) \longrightarrow \infty \qquad (35.3)$$

ولذلك لا يعد السلوك المقارب للتابع ψ مقبولاً، ويمكن التغلب على هذه المشكلة بقطع السلسلة من أجل $f(y)$ عند قوة محددة. بمعنى آخر، يجب أن يمثل $f(y)$ كثيرات حدود. يمكن تحقيق هذا الشرط بسهولة إذا كان أحد المعاملات في سلسلة ما (زوجية

أو فردية) مساوياً الصفر؛ لأن العلاقة (34.3) تضمن أن تكــون جميــع المعــاملات الأعلى في السلسلة متناهية. وهكذا نحتاج إلى جعل معامل ما معدوماً، وليكن:

$$c_{n+2} = 0 \tag{36.3}$$

بافتراض أن هذا يمثل المعامل الأصغر من الصفر (أي $c_n \neq 0$)، عندئذٍ، يؤدي تطبيق هذا الشرط على العلاقة (34.3) إلى النتيجة الآتية:

$$(\alpha / \beta) - 1 - 2n = 0 \tag{37.3}$$

أو

$$\alpha = \beta(2n+1) \tag{38.3}$$

وسنجد في الفقرة الآتية، أن هذا الشرط يحدد طاقة الهزاز التــوافقي. تـصبح علاقــة المعاملات (34.3) بعد تعويض العلاقة (38.3) على النحو الآتي:

$$\boxed{c_{m+2} = \frac{2(m-n)}{(m+1)(m+2)} c_m} \tag{39.3}$$

التي تضمن أن تكون جميع المعاملات c_{n+2}، و c_{n+4}، إلخ، مساوية الصفر.

7-4-3 طاقة الهزاز التوافقي **Energy of Harmonic Oscillator**

نستطيع الآن من الشرط الحدي السابق أن نحدد الطاقة، وذلك بتعويض عبارة كل من α و β [العلاقتين (16.3) و (17.3)] في العلاقة (38.3)، فنجد:

$$8\pi^2 mE / h^2 = (2\pi\sqrt{mk} / h)(2n+1) \tag{40.3}$$

أو

$$\boxed{E = h\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2\pi}\right)\sqrt{k/m} = \left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu} \tag{41.3}$$

إذ استخدم التعريف للتردد ν [العلاقة (7.3)]. تبين هذه النتيجــة أن الطاقــة تتزايــد بمقدار مساو $h\nu$ عندما تتزايد n بمقدار مساو الواحد، ولهذا السبب تتباعــد ســويات الطاقة كما هو مبين في الشكل (3-2)، وعند درجة حرارة الصفر المطلق، تقدم الجملة طاقتها للمحيط، وتستقر عند السوية $n=0$. ولكن، بما أن $n=0$ لأدنى سوية مسموح

بها للجملة، ستبقى طاقة الوضع الصفري مساوية $\frac{1}{2}h\nu$. لما كان العـــدد الكمـــومي n يأخذ قيماً صحيحة، فهذا يجعل الطاقة تأخذ قيماً متقطعة (أي مكممةً).

8-4-3 التوابع الموجية The Wave Functions

لما كان لدينا مجموعة حلول زوجية وفردية، تبعاً لقيمة n، يمكن تلخـــيص هـــذه الحلول على النحو الآتي:

$$\boxed{\psi_n = \begin{cases} (c_0 + c_2 y^2 + \cdots + c_n y^n)\exp(-y^2/2), & n = \text{زوجي} \\ (c_1 y + c_3 y^3 + \cdots + c_n y^n)\exp(-y^2/2), & n = \text{فـــردي} \end{cases}} \quad \begin{matrix} (42.3) \\ (43.3) \end{matrix}$$

ويوافق حل أدنى طاقة $n = 0$. هذا يعني أن c_0 يمثل أكبر معامل مغايراً للصفر فـــي عبارة سلسلة القوى للتابع $f(y)$. وهكذا يجب جعل $c_2 = 0$ (وكذلك الأمر بالنـــسبة إلى جميع معاملات السلسلة بقوة فردية). وهكذا من أجل $n = 0$ يمكن أن نكتب:

$$\psi_0 = c_0 \exp(-y^2/2) = c_0 \exp(-\beta x^2/2) \qquad (44.3)$$

أي يمثل تابع غوص مضروباً بثابت (الذي يحدد بتطبيق شرط التنظيم). من الواضـــح أن هذا التابع المبين في الشكل (3-2) متناظراً.

يكون للحل الثاني (الفردي الأول) $n = 1$، الذي يكتب حسب العلاقة (43.3) على النحو الآتي:

$$\psi_1(x) = c_1 y \exp(-y^2/2) \qquad (45.3)$$

أو

$$\psi_1(x) = c_1 \sqrt{\beta} x \exp(-\beta x^2/2) \qquad (46.3)$$

إذ جعلنا جميع المعاملات c_3، و c_5، إلخ، وكذلك المعاملات الزوجية، مساوية الصفر. يعد التابع الأسي متناظراً، و y غير متناظر، ولذلك يكون ناتج جداءهما غير متنـــاظر [الشكل (3-2)]. يحدد الثابت c_1 بتطبيق شرط التنظيم أيضاً. يكتب التابع الموجي ψ_2 تبعاً للعلاقة (43.3) على النحو الآتي:

$$\psi_1(x) = (c_0 + c_2 y^2)\exp(-y^2/2) \qquad (47.3)$$

ويحدد c_2 من علاقة المعاملات (39.3). من أجل هذه الحالة يكون $m=0$ ، و $n=2$.
عندئذ:

$$c_2 = \frac{2(0-2)}{(0+1)(0+2)}c_0 = -2c_0 \qquad (48.3)$$

وبتعويض هذه النتيجة في العلاقة (47.3)، نجد:

$$\psi_2(y) = (1-2y^2)c_0 \exp(-y^2/2) \qquad (49.3)$$

يحدد أيضاً c_0 من شرط التنظيم.

تعرف كثيرات الحدود الشبيهة بالتابع $(1-2y^2)$ ، والتي تمثل حلول المعادلة التفاضلية (24.3)، باسم كثيرات حدود هرميت $H_n(y)$. فضلاً عن علاقة المعاملات (34.3)، التي قمنا باشتقاقها، تستخدم تعاريف أخرى، وترتبط إحدى التعاريف بالتفاضل المتعاقب:

$$H_n(y) = (-1)^n \exp(y^2)\frac{d^n \exp(-y^2)}{dy^n} \qquad (50.3)$$

وهكذا، إذا أردنا معرفة $H_2(y)$ ، يجب جعل $n=2$ في العلاقة (50.3)، وإجراء الاشتقاق، فنحصل من أجل $H_2(y)$ على العلاقة:

$$H_2(y) = 4y^2 - 2 \qquad (51.3)$$

المختلفة عن النتيجة السابقة بالعامل (2-). بمعنى آخر، يمكن استنتاج كثيرات حدود هرميت باستخدام التابع المعدل:

$$G(y,u) = \exp[y^2 - (u-y)^2] \equiv \sum_{n=0}^{\infty}(H_n(y)/n!)u^n \qquad (52.3)$$

إذ يمثل u ثابتاً ما. يمكن استخدام هذه العبارة على النحو الآتي:

1. نعبر عن التابع الأسي بدلالة حدود سلسلة قوته، ونكتب بضع حدود أمامه. ستظهر قوى متنوعة للمتحولين u و y، ومعاملاتها الموافقة.
2. تُجمع الحدود جميعها معاً، التي تشمل u^2 .
3. يكون المعامل من أجل هذه الحدود مساوياً إلى $H_2(y)/2$.

من الواضح أن هذه العملية غير ملائمة لتشكيل كثيرات الحدود، ولكن تعد العلاقة (52.3) مفيدة لتحديد الخصائص الرياضية العامة لهذه الكثيرات الحدود. فمثلاً، تستخدم العلاقة (52.3) لإظهار أن التوابع الموجية للهزاز التوافقي متعامدة.

9-4-3 شرط التعامد والتنظيم Orthogonality and Normalization

سنبين الآن أن التوابع الموجية للهزاز التوافقي متعامدة، أي أن:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n(y)\psi_m(y)dy = \int_{-\infty}^{+\infty}H_n(y)H_m(y)\exp(-y^2)dy = 0\cdots\ n\neq m \tag{53.3}$$

سندرس التكامل المرتبط بتابعين معدلين، وتابع أسي للمقدار y^2:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}G(y,u)G(y,v)\exp(-y^2)dy = \sum_n\sum_m \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{H_n(y)H_m(y)}{n!m!}\exp(-y^2)dy}_{c_{nm}} \tag{54.3}$$

إذ رمزنا إلى التكامل بالرمز c_{nm}. يمكن أيضا كتابة الطرف الأيسر للعلاقة (54.3) على النحو الآتي [باستخدام العلاقة (52.3)]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-(y-u-v)^2]\exp(2uv)dy = \exp(2uv)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-(y-u-v)^2]dy \tag{55.3}$$

ولكن يمكن إضافة ثوابت إلى عناصر التفاضل من دون أن تؤثر في قيمة التكامل؛ إذ يمثل u و v ثابتين، في حين يمثل y متغيراً. وبناءً على ذلك تصبح العلاقة (55.3) على النحو الآتي (انظر الملحق 1: جدول التكاملات الملائمة):

$$\begin{aligned}\exp(2uv)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-(y-u-v)^2]dy &= \exp(2uv)\sqrt{\pi}\\ &= \sqrt{\pi}\{1+2uv+4u^2v^2/2!+8u^3v^3/3!+\cdots+2^nu^nv^n/n!+\cdots\}\end{aligned} \tag{56.3}$$

تساوي هذه العبارة الطرف الأيمن للعلاقة (54.3)، وبمقارنة العلاقة (54.3) مع العلاقة (56.3)، نلاحظ أن $c_{11}=2\sqrt{\pi}$؛ لأن الحد u^1v^1 مضروب بالمقدار 2π في العلاقة

(56.3)، والمقدار c_{11} في العلاقة (54.3). بصورة مشابهة نجد أن $c_{22} = 4\sqrt{\pi}/2!$، ولكن $c_{12} = 0$. وهكذا نستطيع التوصل إلى النتيجة الآتية:

$$c_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n(y)H_m(y)}{n!m!} \exp(-y^2)dy = \sqrt{\pi}\left(2^n/n!\right)\delta_{n,m} \qquad (57.3)$$

إذ يمثل $\delta_{n,m}$ ثابت كرونيكر، الذي يساوي الواحد عندما $n = m$، والصفر عندما $n \neq m$. وهكذا نجد أن:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(y)\psi_m(y)dy = \sqrt{\pi}m!2^n\delta_{n,m} \qquad (58.3)$$

تبرهن هذه العلاقة أن التوابع الموجية متعامدة، وتقدم لنا أيضاً عامل التنظيم. يعزى عادة التكامل بالنسبة إلى x بدلاً من $y = \sqrt{\beta}x$، ولذلك يجب تغيير عنصر التفاضل في العلاقة (58.3):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(y)|^2 dy = \sqrt{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(y)|^2 dx = \sqrt{\pi}n!2^n \qquad (59.3)$$

يؤدي الفرض $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n^2(y)|dx = 1$ إلى العبارة الآتية من أجل التوابع الموجية المنظمة:

$$\boxed{\psi_n(y) = \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}\frac{1}{2^n n!}}\right)H_n(y)\exp(-y^2/2), \quad n = 0,1,2,\cdots} \qquad (60.3)$$

إن العناصر الأولى لمجموعة كثيرات حدود هرميت هي:

$$\begin{aligned} &H_0(y) = 1, \quad H_1(y) = 2y, \quad H_2(y) = 4y^2 - 2, \quad H_3(y) = 8y^3 - 12y, \\ &H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12, \quad H_5(y) = 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{aligned} \qquad (61.3)$$

3-4-10 ملخص حول حلول معادلة شرودينغر للهزاز التوافقي

Summary of Solution of Harmonic-Oscillator Schrodinger Equation

لما كانت الحلول التفصيلية طويلة جداً، لذلك سنوجز ملخصاً حول حلول معادلة شرودينغر للمسألة المدروسة:

1. نحدد السلوك المقارب للتابع ψ لحل معادلة شرودينغر. إن هـذا الإجـراء يعطي عامل غوص $\exp(-y^2/2)$ مضروباً بالتابع $f(y)$.
2. نحدد المعادلة التفاضلية المحققة للتابع $f(y)$.
3. نمثل $f(y)$ بصفته سلسلة قوى للمتحول y، ونحدد علاقة المعاملات للسلسلة. يرتبط تناظر التوابع الموجية بتناظر السلسلة.
4. يجب أن تكون قوة السلسلة محدودة (أي يجب أن تمثل كثيرات الحدود) لكي لا يسيطر السلوك المقارب للتوابع الموجية. إن هذا يؤدي إلى العلاقة التـي تربط α و β ببعضهما، وتبين أن سويات الطاقة المكممـة تتباعـد تباعـداً منتظماً.
5. نعرف كثيرات الحدود بصفتها كثيرات حدود هرميـت، ونـستخدم بعـض الخصائص المعروفة لهذه التوابع للتحقق من شرطي التعامد والتنظيم من أجل التوابع الموجية.

مثال 3-3: ما العبارة من العبارات الآتية التي لا تمثل تابعاً خاصاً من أجل معادلة شرودنغير للهزاز التوافقي وحيد البعد؟

$$(64y^6 - 480y^4 + 720y^2 - 120)\exp(y^2/2) \quad \text{(a)}$$
$$(64y^6 - 480y^4 + 720y^3 - 120)\exp(y^2/2) \quad \text{(b)}$$
$$(64y^6 - 480y^4 + 720y^2 - 120)\exp(-y^2/2) \quad \text{(c)}$$

الجواب: يعد (a) غير مقبول؛ لأن $\exp(y^2/2)$ ينحدر بسرعة عن القيم الكبيـرة للمقدار $|y|$. يعد (b) غير مقبول؛ لأن كثيرات الحدود تـضم حـدود قـوى فرديـة وزوجية. يعد (c) مقبولاً.

5-3 القيمة المتوسطة الكمومية للطاقة الكامنة
Quantum Average Value of the Potential Energy

بينا في الفقرة 3-2 أن الهزاز التوافقي يدخر وسطياً نصف طاقته كطاقة حركيـة، والنصف الآخر كطاقة كامنة. سنقوم الآن بصورة مشابهة بمقارنة ذلك للجملة الكمومية

من أجل الحالة الأساسية $(n=0)$. يكتب التابع الموجي لهـذه الحالـة علـى النحـو الآتي:

$$\psi_0(x)=(\beta/\pi)^{1/4}\exp(-\beta x^2/2) \qquad (62.3)$$

ويعطى التوزع الاحتمالي للجسيم على امتداد الإحداثية x بالمقدار ψ^2. تعـد الطاقـة الكلية ثابتة، وتعطى بالعلاقة:

$$E_0=\frac{1}{2}h\nu=(h/4\pi)\sqrt{k/m} \qquad (63.3)$$

في حين يعبر عن الطاقة الكامنة بـصفتها تابعـاً للمتحـول x بالعبـارة المعروفـة $V=\frac{1}{2}kx^2$، ويعطى احتمال وجود الجسيم المهتز ضمن الطول العنـصري dx ذي المركز x_1 بالمقدار $\psi_0^2(x_1)dx$؛ إذ يعد ψ_0 المعطى بالعلاقة (63.3) منظماً. وبنـاءً على ذلك، تمثل القيمة الوسطية للطاقة الكامنة مجموع الطاقات الكامنة كلها الملائمـة لجميع الخطوط العنصرية dx؛ إذ تسهم كل منها باحتمال وجود الجـسيم فـي هـذه الخطوط العنصرية:

$$\bar{V}=\int_{-\infty}^{+\infty}[dx \text{ احتمال وجود الجسيم ضمن}]\,[dx \text{ عند } V]=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^2V(x)dx \qquad (64.3)$$

أي أن:

$$\bar{V}=(\beta/\pi)^{1/2}\cdot\frac{1}{2}k\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\beta x^2)dx=\sqrt{\beta/\pi}\cdot\frac{1}{2}k\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\pi/\beta^3} \qquad (65.3)$$

إذ قمنا باستخدام بعض التكاملات المذكورة في الملحـق 1 لتقـدير التكامـل. يـؤدي استخدام عبارة β^2 [العلاقة (17.3)] إلى النتيجة:

$$\bar{V}=k/4\beta=(k/4)\cdot h/(2\pi\sqrt{mk})=(h/8\pi)\sqrt{k/m} \qquad (66.3)$$

التي تمثل النصف الأول للطاقة الكلية تماماً [العلاقة (63.3)]. هذا يعنـي أن القيمـة الوسطية للطاقة الحركية يجب أن تساوي نصف الطاقة الكلية أيضا؛ لأن $\bar{V}+\bar{T}=E$. وهكذا نكون قد توصلنا إلى النتيجة التي تبين أن نسبة الطاقتين الوسـطيتين الكامنـة والحركية في الحالة الأساسية للجملة الكمومية تمثل نفسها كما في الهـزاز التـوافقي

التقليدي. ولكن، من أجل الأنماط الأخرى للكمون، يتطلب مخزون طاقة ليس المناصفة فحسب، بل يجب أن يمثل نفسه من أجل المعالجتين التقليدية والكمومية للجملة. سنناقش مثل هذا الوضع بالتفصيل عند دراسة نظرية التغير (الفصل السابع).

6-3 اهتزازات الجزيئات ثنائية الذرة

Vibrations of Diatomic Molecules

تهتز ذرتان مرتبطتان معا ذهاباً وإياباً على امتداد المحور الواصل بين النـواتين. يعالج التقريب القياسي الأول الجملة بصفتها مؤلفة مـن كتلتـين لنـواتين m_1 و m_2 مهتزتين توافقياً بالنسبة إلى مركز الثقل. يحدد ثابت القوة قوة الرابطة؛ كلمـا كانـت الروابط أقوى، أصبح k أكبر.

إن مسألة حركة كتلتين تؤول إلى حركة كتلة مختزلة واحدة μ، مهتـزة توافقيـاً بالنسبة إلى مركز الثقل؛ إذ تمثل μ المقدار $m_1m_2/(m_1+m_2)$. يبقى ثابت القوة مـن أجل اهتزاز الكتلة المختزلة مماثلاً لثابت القوة للكتلتين، ويبقى بُعد الكتلة المختزلة عن مركز الثقل مماثلاً للبُعد بين m_1 و m_2. وهكذا نمتلك تقريباً مبسطاً ملائماً جداً: يمكن استخدام حلول الهزاز التوافقي من أجل كتلة مختزلة وحيدة بـصفتها حلـولاً لمـسألة حركة كتلتين، وتستخدم جميع عبارات التوابع الموجية والطاقة المستنتجة سابقاً باستثناء أن m تمثل الكتلة المختزلة μ. تتلخص الأهمية التطبيقية في أنه يمكن قياس الطاقـة الموافقة لسويتين اهتزازيتين طيفياً، وذلك للحصول على ثابت القوة k من أجل جزيء ثنائي الذرة، على سبيل المثال، الذي يشير إلى قوة الرابطة.

مثال 3-4: يبدي $H^{35}Cl$ امتصاصا قويـا فـي الطيـف تحـت الأحمـر عنـد $2992\,cm^{-1}$، الموافق لطاقة قدرها 5.941×10^{-20} J. إن طاقة هذا الضوء E تمـتص ليُثار HCl من السوية الاهتزازية $n=0$ إلى $n=1$. ما قيمة ثابت القوة k في HCl؟

الحل: لما كانت الطاقة الاهتزازية $h\nu$ مساوية المقدار 5.941×10^{-20} J، ونعلـم أن μ تحل محل m، فهذا يعني أن $\nu=(1/2\pi)\sqrt{k/\mu}$، و $k=4\pi^2E^2\mu/h^2$. لنحدد الآن μ بحسب التعريف على النحو الآتي:

$$\mu = \frac{m_{\mathrm{H}} m_{\mathrm{Cl}}}{m_{\mathrm{H}} + m_{\mathrm{Cl}}} \times \frac{1}{N_a} = \frac{1\times 35}{1+35} \times \frac{1}{6.022\times 10^{23}} = 1.614\times 10^{-24}\ \mathrm{g}$$
$$= 1.614\times 10^{-27}\ \mathrm{kg}$$

ثم نعوض المعطيات في العبارة من أجل k:

$$k = \frac{4\pi^2 E^2 \mu}{h^2} = \frac{4\pi^2 (5.941\times 10^{-20}\ \mathrm{J})^2 (1.614\times 10^{-27}\ \mathrm{kg})}{(6.626\times 10^{-34}\ \mathrm{J\ s})^2} = 512\ \mathrm{N\ m^{-1}}$$

7-3 ملخص Summary

1. يعبر عن طاقة الهزاز التوافقي الكمومي بالعبارة $E_n = (n+\frac{1}{2})h\nu$، إذ إن $n = 0,1,2,\cdots$، و $\nu = (1/2\pi)\sqrt{k/m}$. وهذا ما يبين أن سويات الطاقة غير متوالدة تتباعد عن بعضها بمسافة قدرها $h\nu$، وتبلغ طاقة الوضع الصفري $h\nu/2$.

2. تكون التوابع الخاصة من أجل هذه الجملة إما متناظرة، وإما مضادة للتناظر بالنسبة إلى الانعكاس عبر $x = 0$. يتناوب هذا التناظر مع زيادة n، ويكون مرتبطاً بوجود القوى الفردية والزوجية للمتحول y في كثيرات حدود هرميت في ψ.

3. إن كل تابع خاص متعامد مع جميع التوابع الأخرى، حتى في الحالات التي يمثل فيها التناظر نفسه.

4. تختلف التوابع الخاصة للهزاز التوافقي عن التوابع الخاصة لجسيم في صندوق من ناحيتين مهمتين: فهي تستطيع أن تخترق إلى ما وراء نقاط النفق التقليدي (أي ما وراء قيم x عندما $E = V$)، وتتمتع بمجال أكبر ناتج عن امتداد التابع الكموني المتمثل على شكل قطع زائد عند القيم الكبيرة للطاقات.

5. إن الأسلوب الذي يجزّء الطاقة الكلية إلى جزأين كامنة وحركية يمثل نفسه من أجل الهزازين التقليدي والكمومي؛ بدقة بالمناصفة.

6. يمكن دراسة اهتزازات الجزيئات تقريبياً بصفتها توافقية. تكتب الكتلة بصفتها مختزلة في عبارة الطاقة، ويعد قياس الطاقة ضرورياً لحساب ثابت القوة التوافقي من أجل النموذج الاهتزازي الفعلي.

أسئلة وتمارين

1-3 بين من علاقة الحركة (5.3) أن تابع التوزع التقليدي يتناسب مع $(1-x^2/L^2)^{-1/2}$.

2-3 ينطلق الهزاز التوافقي ذو الكتلة $1.00\ \mathrm{g}$، وثابت قوة مساوية $2\ \mathrm{kg\ s^{-2}} = 2.0\ \mathrm{J\,m^{-2}}$ من السكون عند $t=0$ و $x=0.100\ \mathrm{m}$:

(a) ما التابع الموجي $x(t)$ الذي يصف سلوك الهزاز؟

(b) أين تقع كتلة الهزاز عندما $t = 3\ \mathrm{sec}$؟

(c) ما الطاقة الكلية للهزاز؟

(d) ما الطاقة الكامنة عندما $t = 3\ \mathrm{sec}$؟

(e) ما الطاقة الكامنة الوسطية اللحظية؟

(f) ما الطاقة الحركية الوسطية اللحظية؟

(g) كيف تتسارع حركة الهزاز عندما $t = 3\ \mathrm{sec}$؟

(h) أين تقع نقاط الانعطاف أو الانحراف من أجل الهزاز؟

(i) ما تواتر الهزاز؟

3-3 أوجد العبارة من أجل نقاط الانعطاف التقليدية من أجل الهزاز التوافقي بدلالة n، و m، و h، و k.

4-3 (a) تمثل العلاقة (60.3) عبارة أخرى مألوفة. يمكن تقسيم هذه العلاقة إلى ثلاثة أقسام، كل قسم منها يحقق غاية محددة. حدد الأجزاء الثلاثة، وبين دور كل منها في تحقيق المطالب الرياضية على ψ.

(b) استخرج العبارات من أجل الهزاز التوافقي المنظم من أجل $n = 0,1,2$.

5-3 بين أن ψ_0 تابع خاص للمؤثر $\hat{H}$، وأن القيمة الخاصة تساوي $h\nu/2$.

6-3 ما الطاقة الكامنة المتوسطة من أجل الهزاز التوافقي عندما $n = 5$؟ وما الطاقة الحركية المتوسطة؟

7-3 احسب ثوابت القوى من أجل الاهتزازة في $\mathrm{H^{19}F}$، و $\mathrm{H^{36}Cl}$، و $\mathrm{H^{81}Br}$، و $\mathrm{H^{127}I}$، مع العلم أن عصابات الامتصاص تحت الأحمر من أجل الانتقال من $n=0$ إلى $n=1$ لوحظت عند 4138، و 2991، و 2649، 2308 بالواحدة

cm^{-1} على الترتيب. على ماذا تدل هذه الثوابت للقوة ضمنياً من حيث قوة الروابط في هذه الجزيئات؟

اختار الجواب الصحيح:

8-3 ما العبارة من العبارات الآتية التي تعارض نتائج الميكانيك الكمومي للهزاز التوافقي وحيد البعد؟

(a) كلما كانت كتلة الجسيم المهتز أصغر، أصبحت طاقة الوضع الصفري أصغر من أجل ثابت قوة محدد.

(b) يمثل التواتر الكمومي التواتر نفسه للهزاز التقليدي ذي الكتلة نفسها، وثابت القوة نفسها.

(c) تزداد المسافة الفاصلة بين سويتين طاقيتين متجاورتين بزيادة ثابت القوة.

(d) لا تتأثر المسافة الفاصلة بين سويتين طاقيتين متجاورتين عند زيادة العدد الكمومي الاهتزازي.

(e) تمثل الطاقة الكامنة الاهتزازية ثابت الحركة.

9-3 إن الهزاز التوافقي الكمومي:

(a) يتسارع عند لحظة ما بالقرب من نقاط التقاطع التقليدية في سويات الطاقة الأخفض.

(b) يتمتع بالخاصة $\psi = 0$ عند نقاط التقاطع التقليدية.

(c) يتمتع بسويات طاقة متعددة مرتين.

(d) يتمتع بسويات طاقة متناسبة مع مربع العدد الكمومي.

(e) ولا تصريح صحيح.