الباب الرابع

التطبيق على نظم بسيطة

Application on Simple Systems

- الحركة الانتقالية
- حركة الجسيم الحر
- حركة جسيم في صندوق ذي بعد واحد
- الحركة في أكثر من اتجاه
- مغزى الاتجاه للدوال الموجية
- التسرب الكمي
- تمارين

٤-١ الحركة الانتقالية Translational Motion

سوف نطبق في هذا الباب فروض نظرية الكم على بعض النظم البسيطة، بهدف فهم هذه الفروض بصورة أكثر عمقًا، وبناء الثقة في هذه الفروض بعد أن نطمئن على مدى تطابق النتائج المحسوبة مع تلك المعينة بالطرق الأخرى، وخاصة العملية منها. ثم إننا خلال تطبيقنا لهذه النظم، فإن بعض المبادئ والأسس الجديدة لنظرية الكم سوف تظهر تلقائيًا، مما يضيف إلى البناء التحتي لهذه النظرية، ويؤهلنا لتطبيقها على النظم الحقيقية.

سوف نبدأ تطبيقنا لفروض نظرية الكم على الحركة الخطية بصفة عامة والانتقالية (translational motion) بصفة خاصة. وهذا النوع من الحركة هو الأبسط والأيسر للتطبيق، كما أننا سوف نتفهم الفروق بين المفاهيم الكلاسيكية والكمة بصورة أكثر عمقًا. ومع أن بعض النظم التي سنتعرض لها في هذا الباب تخيلية فقط، إلا إن المادة العلمية التي سنتوصل إليها من التطبيق على هذه النظم هي قواعد عامة وسنقابلها بصفة مستمرة في النظم الحقيقية الأكثر تعقيدًا.

٤-٢ حركة الجسيم الحر Free - Particle Motion

إن أسهل نوع من أنواع الحركة يمكن دراسته في مجالنا هذا هو حركة جسيم كتلته (m) يتحرك في اتجاه واحد فقط، وليكن الاتجاه (x) ويتحرك هذا الجسيم حركة حرة، وهذا يعني أنه ليس هناك أي نوع من القوى التي تؤثر على حركته. وبذلك فإن طاقة الوضع لهذا الجسيم (V_x) هي مقدار ثابت. ولما كان اختيارنا لنقطة الصفر للطاقة هو اختيار تجريبي (empirical) فإننا يمكن ان نفترض أن $(V_x = 0)$خلال حركة هذا الجسيم، وبالتالي فإن الطاقة الكلية هي طاقة حركة

فقط. والمهمة الملقاة على عاتقنا الآن هي محاولة إيجاد دوال الحالة لهذا النظام ومعرفة الطاقة المقابلة لكل منها، ويتأتي ذلك بحل معادلة شرودنجر:

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right)\Psi = E\Psi \qquad (١-٤)$$

وحيث إن الحركة في الاتجاه (x) فقط و $\hat{V}_x = 0$ فإن (٤-١) تصبح

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi \qquad (٢-٤)$$

وبإعادة الترتيب

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi \qquad (٣-٤)$$

والمطلوب الآن هو إيجاد دالة Ψ تكون حلاً للمعادلة (٤-٣)، وهذه الأخيرة هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية والمطلوب دالة عند تفاضلها مرتين بالنسبة للمتغير (x) تخرج مرة أخرى بدون أي تغيير مضروبة في مقدار ثابت. وهناك العديد من الدوال التي تحقق ذلك، ومنها على سبيل المثال دوال الجيب وجيب التمام (sine) و(cosine)والدوال الأسية (exponential)، ومع أن أي نوع من هذه الدوال يمكن أن يكون حلاً ويعطي نفس النتائج، إلا أننا سوف نفترض أن (Ψ) لها نفس خواص دالة الجيب (sine)، ومن ثم فإن:

$$\Psi = A \sin k x \qquad (٤-٤)$$

حيث A وk هما ثابتان سوف يتم تعيينهما فيما بعد. وبتفاضل (٤-٤) مرتين بالنسبة للمتغير (x) فإن:

$$\frac{d\Psi}{dx} = k\ A\cos\ kx$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\ A\sin kx \qquad (٥-٤)$$

$$= -k^2\,\Psi$$

وحتى تتطابق المعادلتان (٤-٣) و(٤-٥)، فإن الثابت (k) يجب أن يعطي القيمة:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (٤-٦)$$

ومنها يمكن التعبير عن قيمة الطاقة (E) بالعلاقة:

$$E = k^2 \frac{\hbar^2}{2m} \qquad (٤-٧)$$

كما يمكن أيضا تعيين كمية التحرك الخطية (linear momentum) حيث إن المعادلة (٤-٤) تعبر عن موجه، فإن التعبير العام لموجة ذات طول(λ) يكتب بصورة $[\sin(2\pi/\lambda)]$ وبالتالي فإن:

$$kx = \frac{2\pi x}{\lambda}$$

$$\lambda = 2\pi / k$$

وباستبدال (λ) بقيمتها من علاقة دي برولي ($\lambda = h/p$) فإن

$$p = k\,\hbar \qquad (٤-٨)$$

وننتقل الآن إلى القيود أو الحدود التي توضع على الحل حتى يكون مقبولاً فيزيائيًا (acceptable solution). فحيث إن ($\Psi^* \Psi$) لا بد وأن تمثل احتمالية فإن الدالة Ψ لا بد وأن تكون محددة (finite) في كل المجال المتاح لها. ومن المعادلة (٤-٦) فإن الطاقة (E) لا يمكن أن تكون سالبة وإلا كان الثابت (k) تخيليًا ($k = \sqrt{2mE} / \hbar$)، وبالتالي الدالة Ψ غير محددة (infinite) عند الحدود $x = \infty$.

وفيما عدا ذلك فليس هناك أي قيد على القيم التي يمكن أن يأخذها الثابت (k)، فهو ممكن أن يأخذ أي قيمة من قيم مجموعة الأعداد الكاملة، وبالتالي فإن الطاقة (E) (٤-٧) يمكن أن تأخذ أي قيمة موجبة بدون أي قيود:

$$E \geq 0$$

ومعنى ذلك أن الطاقة غير مكماة، وأن الجسيم يستطيع أن يكتسب أي طاقة بدون قيود. والنتيجة العامة التي من الممكن أن نخرج بها هنا هي أن نقول أن الحركة الانتقالية الخطية الحرة هي حركة غير مكماة، وبتعبير أكثر دقة، فإن

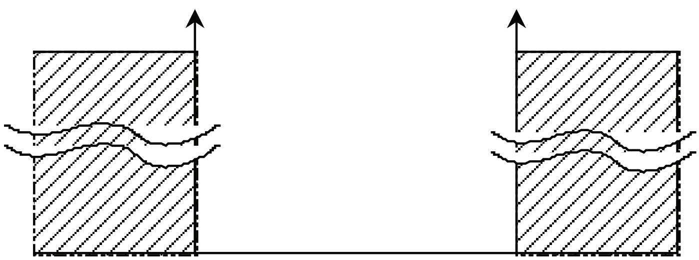
مستويات الطاقة متقاربة من بعضها لدرجة كبيرة جدًا لدرجة أنها تبدو وكأنها متلاصقة ومستمرة (continuous).

٤-٣ حركة جسيم في صندوق ذي بعد واحد
Particle in a One-dimensional Box

وننتقل الآن إلى حالة جسيم كتلته (m) يتحرك في اتجاه واحد فقط، وليكن الاتجاه (x) مثلاً. وهذا الجسيم يتحرك تحت تأثير طاقة وضع ($0 = V_x$) في المنطقة الواقعة بين ($x = 0$) و($x = a$)، وفي كل المناطق الأخرى فإن طاقة الوضع ($\infty = V_x$). وعند رسم طاقة الوضع مقابل المسافة على المحور (x) فإننا نحصل على الشكل (٤-١).

والمطلوب الآن هو تعيين دوال الحالة لهذا الجسيم والطاقة المصاحبة لكل دالة منها. أي إن الخاصية المطلوب تعيينها هي الطاقة، وبالتالي وتبعًا للفرض الثالث فإننا يجب أولاً أن نحضر المؤثر الكمي المقابل للخاصية المطلوبة، وهو في حالتنا هذه الهملتونين $\hat{H}$ (المؤثر الكمي للطاقة) ثم نبدأ في حل معادلة شرودنجر لهذه الخاصية $\hat{H}\Psi = E\Psi$.

ويمكن أن نميز في الشكل (٤-١) منطقتين أساسيتين يجب حل معادلة شرودنجر لهما. وهما المنطقتان خارج الصندوق المحدد في الشكل والمنطقة داخل هذا الصندوق.



شكل (٤-١): طاقة الوضع لجسيم داخل صندوق ذي بعد واحد.

بالنسبة للمنطقة خارج الصندوق فإن $(V=\infty)$. والصور التفصيلية لمعادلة شرودنجر في اتجاه (x) هي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\left(E-\infty\right)\Psi=0$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(E+\infty)\Psi \qquad (٤-٩)$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}=\infty\Psi$$

وذلك لأن E صغيرة جدًا بالنسبة إلى ∞ فيمكن أن تهمل، وحاصل الضرب $\infty\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)$ يساوي أيضًا (∞). وبتفكير بسيط، فإننا يمكن أن نتخيل أن الحل الوحيد للمعادلة (٤-٩) هو أن الدالة $\Psi = 0$ حيث إنه لا توجد دالة مقبولة تحقق الشروط المحددة بالفرض الأول من فروض نظرية الكم وعند التفاضل مرتين تعطي نفس الدالة مضروبة في ما لا نهاية. وكون الدالة $(\Psi = 0)$ خارج الصندوق، فإن ذلك يعني أن $(\Psi^*\Psi)$ خارج الصندوق تساوي صفرًا أي إنه لا يوجد أدنى احتمال لوجود الجسيم خارج الصندوق، ويعادل هذا أن نقول أن الجسيم محبوس داخل الصندوق بين الحدود $(x=0)$ و $(x=a)$.

أما بالنسبة للمنطقة داخل الصندوق، فإنه يمكن كتابة معادلة شرودنجر كالآتي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+E\Psi=0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}= E\Psi \qquad (٤-١٠)$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}= \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi$$

والمعادلة (٤-١٠) هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية، وحل هذه المعادلة هو دالة (Ψ) عند تفاضلها مرتين بالنسبة للمتغير (x) فإنها تخرج مرة أخرى مضروبة في

ثابت. ولقد ناقشنا هذا النوع من الدوال في الفصل السابق، واتضح أن دوال الجيب (sine) وجيب التمام(cosine) هي من أبسط أنواع الدوال التي تحقق ذلك.

ولنفترض معا أن دالة الحالة (Ψ) هي تراكب (superposition) (جمع خطي) لدالتين إحداهما لها شكل الجيب (sine) والأخرى لها شكل جيب التمام (cosine). وهذا الجمع الخطي يصبح ممكنًا فقط في حالة أن كل واحدة من هاتين الدالتين هي في ذاتها حل للمعادلة (٤-١٠). وعلى ذلك يصبح الجمع الخطي دالة جديدة تمثل حلاً أكثر عمومية من أي من الدالتين المكونتين له.

$$\Psi = A \sin kx + B \cos kx \qquad (٤\text{-}١١)$$

حيث إن A, B هما ثابتان يمثلان وزن كل دالة في الجمع الكلي (Ψ) أما الثابت (k) فهو ثابت يجب تعين قيمته بحيث تتطابق المعادلة (٤-١١) مع المعادلة (٤-١٠). عند تفاضل المعادلة (٤-١١)مرتين بالنسبة للمتغير (x)تصبح:

$$\frac{d\Psi}{dx} = k\ A\cos kx - k\ B\sin kx$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\ A\sin kx - k^2\ B\cos kx \qquad (٤\text{-}١٢)$$

$$= -k^2\ (A\sin kx + B\cos kx)$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\ \Psi$$

وبمقارنة المعادلة (٤-١٢) مع المعادلة (٤-١٠) يتضح أنهما تتطابقان فقط إذا كان الثابت k يعطي بالقيمة

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (٤\text{-}١٣)$$

وحتى الآن فإنه لا يوجد ما يحدد القيم التي يأخذها الثابت (k)، وبالتالي القيم التي يمكن أن تأخذها الطاقة (E).

وسنحاول الآن تطبيق الحدود أو القيود المفروضة على حركة الجسيم. وهذه المجموعة من القيود يمكن أن نطلق عليها "حالات الحدود" (boundary conditions). إن دالة الحالة (Ψ) من المفترض أن تساوي الصفر خارج الحدود ($x = 0$ ، $x = a$) ومعنى ذلك أن (Ψ) يجب أن تساوي الصفر عند هذه الحدود حتى تكون وحيدة القيمة (single-valued) عند ($x = 0$) وعند ($x = a$) أي إن:

$$\Psi_{(0)} = \Psi_{(a)} = 0 \qquad (١٤-٤)$$

عند ($x = 0$) فإن المعادلة (٤-١١) تصبح:

$$\Psi_{(o)} = A \sin 0 + B \cos 0 = B \qquad (\sin 0 = 0 \, ; \cos 0 = 1)$$

$$\Psi_{(o)} = A \sin k0 + B \cos k0 = A \sin 0 + B \cos 0 = B$$

لأن $\quad$ 0, and cos 0 = 1, B = 0 ≠ sin 0 = 0: A

وعلى ذلك فإن الثابت B لا بد وأن يساوي الصفر حتى يتحقق أول شرط من شروط الحركة وهو أن $\Psi_{(0)} = 0$ فتصير المعادلة (٤-١١) كالآتي:

$$\Psi = A \sin kx \qquad (١٥-٤)$$

أما الشرط الثاني فهو أنه عند ($x = a$) فإن ($\Psi_{(a)} = 0$) مهما كانت قيمة (k) أي إن:

$$\Psi_{(a)} = A \sin ka + B \cos ka = A \sin ka = 0 \qquad (١٦-٤)$$

وهذا يعني أنه إما أن يكون الثابت (A) يساوي الصفر، ومعنى ذلك أن الدالة ($\Psi = 0$) عند جميع قيم (x)، وبالتالي فإنه لا يمكن تحديد مكان الجسيم، حيث إن ($\Psi^* \Psi$) تساوي الصفر في أي مكان على المحور (x) وطبعًا هذا غير حقيقي. والاحتمال الآخر هو أن تساوي (sin ka) الصفر عند كل قيم (k) أي إن المطلوب هو الزاوية ka التي دائمًا وأبدًا تعطي قيم صفر للجيب sin ka. وهذا يتأتى إذا كان المقدار (ka) هو عدد صحيح من (π) أي:

$$ka = n\pi \quad ; \quad n = 1,2,3,........ \tag{٤-١٧}$$

وبالتعويض بقيمة (k) من (٤-١٧) في المعادلة (٤-١٣) فإن:

$$\frac{n\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2} \tag{٤-١٨}$$

أي إن الطاقة الكلية للجسيم محددة بقيم (n) الثابتة وغير مسموح لهذا الثابت إلا بالقيم الصحيحة الموجبة فقط. أي إن الطاقة (E) للجسيم داخل الصندوق لا يمكن أن تأخذ أي قيمة، إنما هناك قيمًا محددة فقط من الطاقة مسموح للجسيم أن يتحرك بها. هذه القيم يحددها الرقم (n) الذي يسمى رقم الكم (quantum number). وبظهور رقم الكم (n)، فإن الطاقة تحولت من طاقة مستمرة كلاسيكية إلى طاقة مكماة وأصبحت حركة الجسيم حركة مقيدة بكميات من الطاقة معلومة مسبقًا ومحددة تحديدًا دقيقًا بالمعادلة (٤-١٨).

مثال ٤-١

اثبت أن الأطوال الموجية المتاحة للجسيم في صندوق البعد الواحد تعطي بالعلاقة $\lambda = \frac{2a}{n}$

الحل

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

وبالتعويض بقيمة p من معادلة دي برولي $p = h / \lambda$ ينتج أن:

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \quad ; \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

ومن المعادلة (٤-١٨) تبين لنا أن الطاقة الحركية تعطي بالعلاقة الآتية:

$$E = \frac{n^2h^2}{8ma^2}$$

بالتعويض بقيمة E في المعادلة السابقة:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\frac{n^2h^2}{8ma^2}}} = \frac{h}{\sqrt{\frac{n^2h^2}{4a^2}}} = \frac{h}{\frac{nh}{2a}} = \frac{2a}{n}$$

مثال ٤-٢

احسب الطاقة الأرضية والطول الموجي المصاحب لها لإلكترون يتحرك في جزئ خطي طوله 0.77658nm.

الحل

لإيجاد الطاقة الأرضية نعوض في المعادلة:

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2}$$

حيث إن $n = 1$, $a = 0.77658 \# 10^{-9}$J

$$E_1 = \frac{(1)^2 x(6.626x10^{-34})^2}{8x9.1x10^{-31}x(0.77658x10^{-9})^2} = \frac{1x10^{-68}}{1x10^{-49}} = 1x10^{-19}\,J$$

لإيجاد الطول الموجي المصاحب لهذه الطاقة نعوض في المعادلة:

$$m= \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad ; \quad \lambda = \frac{6.626x10^{-34}}{\sqrt{2x9.1x10^{-31}x10^{-19}}} = \frac{6.626x10^{-34}}{4.266x10^{-25}}$$

حل آخر:

بالتعويض في المعادلة مباشرة لحساب الطول الموجي (λ) ثم استخدامه لحساب الطاقة (E) المصاحبة له:

$$\lambda = \frac{2a}{n} = \frac{2x0.77658x10^{-9}}{1} = 1.55x10^{-9}\,m = 1.55nm$$

$$= 1.55x10^{-9}\,m = 1.55nm$$

ومن ثم يمكن حساب الطاقة المصاحبة لهذا الطول الموجي بالتعويض في المعادلة:

$$E = \frac{h^2}{2mm^2} = \frac{(6.626x10^{-34})^2}{2x9.1x10^{-31}x(1.55316x10^{-9})^2} = 1x10^{-19}\,J$$

ويجب هنا أن نوضح كيفية ظهور أرقام الكم، حيث إن هذه الأرقام هي المنوط بها تحديد الحالات والطاقات المسموح بها لكل نوع من أنواع الحركة. إن ظهور أرقام الكم هو ظهور تلقائي غير مفتعل ولا مفترض، ومرتبط أساسًا بتطبيق حالات الحدود إن وجدت، فإذا لم توجد مثلما كان الحال في حركة الجسيم الحر، فإنه لا تظهر أي أرقام كم، وبالتالي فإن الطاقات مستمرة وغير مكماة.

وبالتعويض عن قيمة (k) من المعادلة (٤-١٧) فإن دالة الحالة للجسيم داخل الصندوق تعطي بالتعبير:

$$\Psi_n = A \sin\frac{n\pi x}{a} \qquad (١٩-٤)$$

وحتى يكون الحل لهذا النوع من الحركة كاملاً، فإنه يتعين علينا تعيين قيمة الثابت (A) في المعادلة (٤-١٩). هذا الثابت سيقابلنا دائمًا عند اختيارنا لدوال الموجة، وتنبع أهميته في أنه ثابت ضروري حتى يمكن التأكد من أن الدالة المختارة دالة مطبعة للواحد الصحيح في كل الفراغ المتاح لها. أي إن قيمة ثابت التطبيع (N) (normalization constant) هي التي تحقق الشرط:

$$\int_{allspace} (N\Psi)^*(N\Psi)d\tau = 1$$

$$N^2\int \Psi^*\Psi d\tau = 1 \qquad (٢٠-٤)$$

تطبيق شرط التطبيع Normalization Condition

بتطبيق شرط التطبيع السابق على الدالة (٤-١٩) فإن:

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

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

ويمكن أن نستخدم التعبير الهندسي $\left[\sin^2\theta = \frac{1}{2}(1-\cos 2\theta)\right]$ لحل هذا التكامل أي:

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

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

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

$$\tfrac{1}{2}A^2\left\{\left(a - \frac{a}{2n\pi}\left(\sin 2n\pi - \sin 0\right)\right)\right\} = 1$$

وحيث إن $(\sin 0 = 0)$ وجيب أي عدد صحيح من (π) هو أيضًا يساوي الصفر، فإن الحد الثاني من الطرف الأيسر يساوي الصفر، لذا:

$$\tfrac{1}{2}A^2.a = 1$$

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

وعلى ذلك، فإن الصورة الكاملة لدوال الحالة والطاقات المصاحبة لها للجسيم داخل الصندوق يمكن كتابتها بالصورة:

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \qquad (٤-٢١)$$

تطبيق شرط التعامد Orthogonality Condition

سبق وقدمنا أن لكل نظام عدة حالات كل منها يمكن وصفها وصفًا كاملاً بدالة موجية مستقلة تمامًا عن الدوال الأخرى، أي إن هناك مجموعة كاملة من الدوال $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3......\Psi_n$ تصف الحالات المختلفة للنظام. كل دالة مطبعة للواحد الصحيح، وكل دالتين متعامدتان. هذا الشرط الأخير وهو شرط التعامد (orthogonality condition) في غاية الأهمية وله تطبيقات عديدة في ميكانيكا الكم، وهو ينبع تلقائيًا، حيث إن القاعدة الرياضية تنص على أن "الدوال الذاتية المقابلة لقيم ذاتية مختلفة لنفس المؤثر الكمي المتماثل لابد وأن تكون متعامدة". ولتأكيد أن مجموعة الدوال Ψ_n التي استنتجناها في حلنا لحركة الجسيم داخل الصندوق هي دوال متعامدة، علينا أن نثبت مثلاً أن $< \Psi_1 | \Psi_2 > = 0$.

ونبدأ بالتعويض بقيمة Ψ_n من المعادلة (٤-٢١)

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} dx$$

وحتى نحل هذا التكامل يجب إجراء التعويض بالآتي:

$$y = \frac{\pi x}{a} \quad ; \quad dy = \frac{\pi}{a} dx \quad ; \quad dx = \frac{a}{\pi} dy$$

وبذلك يصبح التكامل بالشكل (بعد تغيير حدود التكامل)

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \frac{2}{a} \left(\frac{a}{\pi} \right) \int_0^\pi \sin y \sin 2y dy$$

ويمكن استخدام التعبير الهندسي $\sin 2y = 2 \sin y \cos y$

وبالتعويض في التكامل الأخير يصبح:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \frac{2}{\pi}.2\int_0^{\pi} \sin^2 y \ .\cos y \ dy$$

ثم نعوض بعد ذلك بالتعبيرات $(u = \sin y \,,\, du = \cos y \, dy)$

ونغير حدود التكامل فيصبح:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \frac{4}{\pi}\int_0^{\pi} u^2 \ du = 0$$

ويمكن إثبات هذه العلاقة بنفس الطريقة لكل الدوال Ψ_i و Ψ_j، وبذلك يمكن التعبير عن مجموعة دوال الموجة للجسيم بالصورة:

$$< \Psi_i \mid \Psi_j > = \delta_{ij} \qquad (٤-٢٢)$$

حيث $\delta_{ij} = 1$ لكل $i = j$

$\delta_{ij} = 0$ لكل $i \neq j$

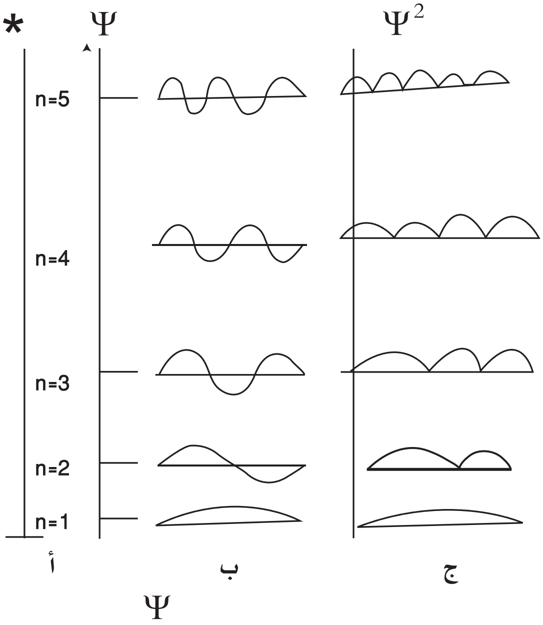
وفي الحقيقة فإن المعنى الفيزيائي لهذا الحل يعكس العديد من المبادئ المهمة والبنَاءة. يوضح الشكل رقم (٤-٢) مستويات الطاقة المسموح بها والشكل الفراغي لدالة الحالة (Ψ_n) وتوزيع الاحتمالية (probability distribution Ψ^2)على طول الصندوق. وطبعًا فإننا نذكر أن الاحتمالية عند أي نقطة تعطي بمربع الدالة (إذا كانت حقيقية). عند هذه النقطة. أي إن:

$$\Psi_x^2 = \frac{2}{a}\sin^2 \frac{n\pi x}{a}$$

مبدأ التناظر Correspondence Principle

إن أول ظاهرة نحب أن نلفت النظر إليها هي وجود نقاط على طول الصندوق تكون عندها الدالة $\Psi = 0$ (وبالتالي $\Psi^2 = 0$)، أي إنه ليس هناك أي احتمال لوجود الجسيم عند هذه النقاط. وتعرف هذه النقاط بـ "العقد" (nodes) وهي سمة عامة لكل دوال الموجة. ويجب ملاحظة أن عدد العقد في كل دالة حالة يساوي $(n - 1)$

حيث (n) هو رقم الكم المميز للحالة (يجب استبعاد العقد عند حدود الصندوق $x = 0$, $x = a$، حيث إنها من شروط الحركة) وأن هذا العدد يتناسب طرديًا مع طاقة الحالة فتزداد عدد العقد بزيادة الطاقة والعكس أيضا صحيح. ويمكن تفهم هذا التناسب الطردي من زاوية أخرى وهي علاقة دي برولي ($\lambda = h/p$) فإن زيادة عدد العقد في نفس الطول تعني قصر الطول الموجي λ. وحيث إن هذا الأخير يتناسب عكسيًا مع كمية التحرك الخطي ($\bar{p}$) فإن زيادة عدد العقد تؤدي إلى زيادة كمية التحرك، وبالتالي طاقة الحركة.



شكل (٤-٢): مستويات الطاقة المسموح بها (أ) ودوال الحالة (ب) وكثافة الاحتمالية (ج) لجسيم داخل صندوق البعد الواحد.

ويتضح من الشكل رقم (٤-٢) أن أعلى احتمالية لوجود الجسيم هي في منتصف المسافة بين عقدتين. وفي الحالة ($n = 1$) وهي الأكثر استقرارًا، وتسمى الحالة المستقرة، فإن أعلى احتمالية لوجود الجسيم هي عند منتصف الصندوق تمامًا. أما في الحالة ($n = 2$) فإن هناك عقدة واحدة عند منتصف الصندوق ونقطتين يمثلان أعلى احتمالية لوجود الجسيم، وهما عند $x = \frac{a}{4}$ و $x = \frac{3a}{4}$. وفي

الحالة ($n = 3$) هناك ثلاث نقط تحتل أعلى احتمالية، وهكذا كلما زادت (n) كلما زاد عدد النقاط المتساوية في الاحتمالية. وحيث إن طول الصندوق ثابت، فإن هذه النقط تتقارب من بعضها البعض، وعند قيم كبيرة جدا لرقم الكم (n) فإن هذه النقاط متساوية الاحتمالية ستتقارب إلى الحد الذي لا يمكننا فيه التفريق بينها، وبالتالي سيبدو وكأن الاحتمالية متساوية في جميع النقاط على طوال الصندوق، وهذه نتيجة كلاسيكية.

ويمكن أن نلخص هذه النتيجة أنه عند قيم كبيرة جدًا لرقم الكم (n) فإن النتائج الكمة تتطابق مع النتائج الكلاسيكية. ويمكننا الوصول إلى نفس هذا الاستنتاج بطريقة أخرى، وسوف نوضح ذلك في المثال التالي.

مثال ٤-٣

احسب طاقة الحالة الأرضية E_1 والفرق في الطاقة ($\Delta E = E_2 - E_1$) بين الحالة ($n = 2$) والحالة المستقرة ($n = 1$) وذلك لكل من:

أ - إلكترون ($m = 9.1\times10^{-31}$ kg) يتحرك في صندوق طوله 1.0 nm

ب - كرة تنس طاولة ($m = 1.0$ gm) تتحرك في صندوق طوله 1.0 m

الحل

يمكن أن نستخدم المعادلة (٢١ - ٤) لحساب الطاقة في كل حالة

أ- بالنسبة للإلكترون

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{\left(6.626X10^{-34}\right)^2}{8x9.1X10^{-31}x\left(10^{-9}\right)^2} = 6.025x10^{-20} \quad J$$

$$E_2 = \frac{n^2h^2}{8ma^2} = 4x6.025x10^{-20} = 2.41x10^{-19} \quad J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 1.81x10^{-19} \quad J = \frac{1.81x10^{-19}}{1.6x10^{-19}} = 1.13 \text{ eV}$$

ب - بالنسبة لكرة تنس الطاولة.

$$E_1 = \frac{\left(6.626x10^{-34}\right)^2}{8x10^{-3}x\left(1\right)^2} = 5.49x10^{-65} \;\; J$$

$$E_2 = \frac{4x\left(6.626x10^{-34}\right)^2}{8x10^{-3}x\left(1\right)^2} = 2.19x10^{-64} \;\; J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 1.65x10^{-64} \;\; J = \frac{1.65x10^{-64}}{1.6x10^{-19}} = 1.03x10^{-45} \; eV$$

ومن هذا المثال يتضح أنه في حالة الإلكترون فإن الفرق في الطاقة بين الحالة الأولى والثانية (1.13 eV) هو فرق محسوس ويمكن قياسه، أما بالنسبة لكرة تنس الطاولة فإن هذا الفرق صغير جدًا، وفي الحقيقة فهو فرق متناه في الصغر ولا يمكن قياسه. وعلى ذلك، فإن الحالة ($n = 1$) والحالة ($n = 2$) تبدوان وكأنهما متطابقان، وكذلك كل الحالات التالية. أي إن الطاقة تبدو وكأنها مستمرة وغير مكماة، وهذه نتيجة كلاسيكية. ويمكن أن نعبر عن هذا الاستنتاج بالتالي:

في حالة الأجسام الكبيرة حيث تكون $h^2 << ma^2$، فإن النتائج الكمة والنتائج الكلاسيكية تتطابق. وهذه إحدى صور قاعدة التناظر (correspondence principle).

مثال ٤-٤

بالنسبة للإلكترون في المثال السابق، احسب احتمالية وجود الإلكترون في المنطقة الواقعة بين $x = 0.51$ nm و $x = 0.49$ nm. ما هي الاحتمالية في المنطقة الواقعة بين $x = 0.2$ nm و $x = 0.0$ ؟

الحل

بالنسبة للجزء الأول، فإن المنطقة $0.49 \leq x \leq 0.51$ هي منطقة متناهية الصغر، ويمكن حساب الاحتمالية في هذه الحالة بالتعبير $\Psi^2_x \, dx$، حيث $dx = 0.02$ nm، وبذلك تكون الاحتمالية عند نقطة المركز ($x = 0.5$)

$$\Psi^2_{x=0.5} = \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}\,dx$$

$$= (2/1)\ \sin^2(0.5\pi/1.0)\ (0.02) = 0.04$$

أي إن الاحتمالية تساوي 1:25

أما بالنسبة للجزء الثاني، فإن المنطقة $0 \le x \le 0.2$ nm ليست متناهية الصغر، وعلى ذلك فلا بد من تكامل Ψ^2 بين حدود هذه المنطقة

$$\Psi^2 = A^2\int_0^{0.2}\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^{0.2}\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx$$

$$= \left[\left(\frac{x}{a}\right) - \frac{1}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^{0.2}$$

$$= \left(\frac{0.2}{1.0} - \frac{1}{2\pi}\sin 0.4\pi\right) \qquad n=1$$

$$= 0.0486$$

أي إن الاحتمالية تساوي 20.6 : 1

إيجاد القيمة العددية لكمية التحرك

Determination of the Value of the Momentum

وننطلق الآن إلى نقطة أخرى أكثر عمقًا، حتى نتفهم كيف نتعامل مع هذه الدوال الموجية. فمن الافتراض الأول الافتراضات نظرية الكم، فإن الدالة (Ψ_i) تحتوي على جميع المعلومات الخاصة بالنظام. والمفترض أننا قادرين على الحصول على الخاصية المراد تعيين قيمتها بسهولة. فكل ما علينا هو أن نحصل على المؤثر الكمي المقابل لهذه الخاصية، وليكن $(\hat{\alpha})$ ثم نحاول حل معادلة القيمة الذاتية:

$$\hat{\alpha}\Psi_i = a_i\Psi_i$$

لإيجاد القيمة العددية لهذه الخاصية وهي(a_i).

مثال ٤-٥

احسب احتمالية وجود جسيم يتحرك في صندوق أحادي البعد طول (L) بين صفر و $L/2$.

الحل

تعطي احتمالية وجود الجسيم بين صفر و $L/2$ بالمعادلة:

$$\Psi^2 = \int_0^{1/2} \Psi^* \cdot \Psi dx$$

إذا ما أعطيت Ψ بالعلاقة:

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi}{L} x$$

$$\Psi^2 = \frac{2}{L}\int_0^{L/2} \sin^2 \frac{n\pi}{L} x\, dx$$

دعنا نعوض عن $\frac{n\pi}{L} x$ بالمتغير z في المعادلة أعلاه

$$\Psi^2 = \frac{2}{n\pi}\int_0^{n\pi/2} \sin^2 z dz = \frac{2}{n\pi}\left|\frac{x}{2} - \frac{\sin 2x}{4}\right|^{n\pi/2}$$

$$= \frac{2}{n\pi}\left(\frac{n\pi}{4} - \frac{\sin n\pi}{4}\right) = 1/2$$

لكل قيم (n)

لذا فإن احتمالية وجود الجسيم عند منتصف المسافة تساوي $\frac{1}{2}$.

افترض أننا مهتمون بتعيين القيمة العددية لكمية التحرك (P_x) للجسيم داخل الصندوق، ولنفترض أن ذلك الجسيم في الحالة المستقرة $(n=1)$ مثلاً. ولنبدأ إذًا بإيجاد المؤثر الكمي لكمية التحرك في الاتجاه (x) وهو $\left(\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}\right)$ ثم نكتب معادلة القيمة الذاتية ونعوض بقيمة (Ψ) من المعادلة (٤-٢١):

$$\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi$$

$$-i\hbar \frac{d}{dx}\left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}\right) = -i\hbar \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} \qquad (٤-٢٣)$$

هذه المعادلة ليست لها نفس صورة معادلة القيمة الذاتية، أي إن الدالة بعد معاملتها بالمؤثر الكمي لكمية التحرك لم تخرج كما هي بدون تغيير، إنما خرجت دالة أخرى تمامًا، وبذلك لم تتحقق معادلة الحالة الذاتية المطلوبة. ولا يمكن تعيين القيمة العددية لكمية التحرك بهذه الطريقة. ومعنى ذلك أن كمية التحرك ليست خاصية حادة (sharp quantity)، وأن إجراء عدد كبير جدًا من القياسات لتعيين قيمة (P_x) لن ينتهي بقيمة واحدة محددة لهذه الخاصية، إنما سوف يعطي توزيعًا (distribution) للقيم المقاسة، والممكن هو تعيين متوسط لهذه القيم، وذلك ما نص عليه الافتراض الخامس من افتراضات نظرية الكم، أي أنه في حالة الخواص غير الحادة (non-sharp) فإن القيمة المتوقعة (المتوسطة) يمكن تعيينها باستخدام التعبير:

$$\langle p_x \rangle = \frac{<\Psi^* |\hat{p}_x| \Psi>}{<\Psi^* | \Psi>}$$

وحيث إن دالة الحالة مطبعة بالواحد الصحيح، فإن المقام في التعبير السابق يصبح مساويًا للواحد، والقيمة المتوسطة لكمية التحرك هي

$$\langle p_x \rangle = \langle \Psi^* | \hat{P}_x | \Psi \rangle \qquad (٤-٢٤)$$

ولنعوض الآن في هذا التعبير الأخير عن ($\hat{p}_x$) و(Ψ) ليصبح:

$$\langle p_x \rangle = \frac{2}{a} \left\langle \sin \frac{\pi x}{a} \middle| -i\hbar \frac{d}{dx} \middle| \sin \frac{\pi x}{a} \right\rangle$$

$$= \frac{2}{a}\left(\sin \frac{\pi x}{a} . \left(-i\hbar \frac{\pi}{a} \cos \frac{\pi x}{a} \right)\right)$$

$$= -\frac{2i\hbar\pi}{a^2} \int_0^a \sin \frac{\pi x}{a} \ \cos \frac{\pi x}{a} \ dx$$

وإذا استعملنا التعبير الهندسي: $\sin\theta \cos\theta = \frac{1}{2} \sin 2\theta$

فإن التكامل الأخير يعطي بالعلاقة:

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar\pi}{a^2}\int_0^a \tfrac{1}{2}\sin\frac{2\pi x}{a}dx$$

$$= -\frac{i\hbar\pi}{a^2}\left[\frac{a}{2\pi}\cos\frac{2\pi x}{a}\right]_0^a = -\frac{2i\hbar\pi}{a^2}\left[\frac{a}{2\pi}(\cos 2\pi - \cos 0)\right] = 0 \qquad (٢٥-٤)$$

أي إن متوسط قيمة (p_x) للجسيم داخل الصندوق تساوي الصفر.

إيجاد القيمة العددية لمربع كمية التحرك

Determination of the Square of the Momentum

ولنفترض الآن أننا مهتمون بتعيين القيمة العددية لمربع كمية التحرك للجسيم داخل الصندوق. ولنبدأ كما جربنا في حالة كمية التحرك بافتراض أن مربع كمية التحرك هو كمية حادة (حتى يثبت غير ذلك) أي إننا نريد أن نحل المعادلة:

$$\hat{p}_x^2\Psi = p_x^2\Psi \qquad (٢٦-٤)$$

والمؤثر الكمي لمربع كمية التحرك هو

$$\hat{P}_x^2 = \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$$

وبالتعويض عن قيمة(Ψ) و$(\hat{p}_x^2)$ في معادلة القيمة الذاتية (٢٦ - ٤) فإن

$$-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right) = \hbar^2\frac{\pi^2}{a^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a} \qquad (٢٧-٤)$$

وبذلك فإن المعادلة قد تحققت ومعاملة الدالة (Ψ) بالمؤثر الكمي$(\hat{p}_x^2)$ أدى إلى خروج الدالة مرة أخرى بدون أدنى تغيير مضروبة في مقدار ثابت. هذا الثابت إذا هو القيمة العددية لمربع كمية التحرك:

$$p_x^2 = \hbar^2\frac{\pi^2}{a^2} = \frac{h^2}{4a^2} \qquad (٢٨-٤)$$

ويمكن إيجاد كمية التحرك بأخذ الجذر التربيعي لطرفي المعادلة (٤-٢٧)

$$p_x = \pm \frac{h}{2a} \tag{٤-٢٩}$$

مثال ٤-٦

اثبت أن دالة الحالة (kx) هي دالة ذاتية للمؤثر الكمي $\left(\frac{d}{dx}\right)$ ومن ثم احسب القيمة الذاتية.

الحل

هل تحقق معادلة الحالة الذاتية:

$$\overline{\alpha}\Psi = a\Psi$$

حيث Ψ هي الدالة الذاتية للمؤثر ($\overline{\alpha}$)، ومن ثم تصبح (a) هي قيمتها الذاتية:

$$\frac{d}{dx}kx = k$$

لم نحصل على نفس الدالة، ولذا فلم تحقق معادلة الحالة الذاتية، ولذا ليس هنالك قيمة ذاتية.

وتحتاج النتائج التي عيناها للقيمة العددية لكمية التحرك في المعادلة (٤-٢٥) والمعادلة (٤-٢٩) إلى توضيح وإلا تراءى إلى أذهاننا أن هنالك تضارب في النتائج المعينة للخواص المختلفة. وفي الحقيقة فإن المعادلة (٤-٢٥) توضح أن متوسط قيمة (p_x) يساوي الصفر، أي إننا لو أجرينا عددًا كبيرًا جدًا من القياسات سنجد أن متوسط هذه القياسات هو صفر. أما المعادلة (٤-٢٩) فهي تنص على أن القيمة العددية لكمية التحرك هي $\pm \frac{h}{2a}$ أي إننا لو أجرينا قياسًا واحدًا فقط لكمية التحرك فإننا سنحصل على القيمة العددية $\frac{h}{2a}$ إما بإشارة سالبة أو بإشارة موجبة، وطبعًا الاحتمالية للقراءتين متساوية، أي إننا لو أجرينا قياس عدد كبير جدًا من المرات سوف ننتهي بعدد من $\frac{+h}{2a}$ مساوٍ لعدد المرات التي نحصل فيها على $\frac{-h}{2a}$، وبالتالي

فإن متوسط القراءات يكون صفرًا. وهذا ما استنتجته المعادلة (٤-٢٥).

ومن ذلك يتضح أن القيمة العددية لكمية التحرك هي $\pm\frac{h}{2a}$ وحيث إن كمية التحرك هي كمية متجهة (vector quantity) فإن له قيمة (magnitude) (وهي في حالتنا هذه $\frac{h}{2a}$) واتجاه (direction) (وهي الإشارة السالبة أو الموجبة والتي تحدد الاتجاه). وعند قياسنا لكمية التحرك، فإننا لا نستطيع أن نتكهن قبل القياس هل سنحصل على $\frac{+h}{2a}$ أو $\frac{-h}{2a}$ كنتيجة لهذا القياس أي إن هناك درجة من عدم التأكد في قياس كمية التحرك ومقدار عدم التأكد (uncertainty) يمكن كتابته كالآتي:

$$\Delta P_x \le \frac{h}{2a} - \left(\frac{-h}{2a}\right) \le \frac{h}{a} \qquad (٤-٣٠)$$

مثال ٤-٧

اثبت أن دالة الحالة (e^{ax}) هي دالة ذاتية للمؤثر الكمي $\left(\frac{d}{dx}\right)$، ومن ثم احسب القيمة الذاتية.

الحل

هل تحقق معادلة الحالة الذاتية:

$$\bar{\alpha}\Psi = a\Psi$$

حيث Ψ هي الدالة الذاتية للمؤثر ($\bar{\alpha}$) ومن ثم تصبح (a) هي قيمتها الذاتية:

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

إذًا تحققت معادلة القيمة الذاتية بأن حصلنا على نفس الدالة عند التفاضل بالنسبة للمتغير (x) بذا يصير الثابت (a) هو القيمة الذاتية.

تعيين المكان المحتمل لوجود الجسيم داخل الصندوق

Determination of the most Probable Position of a Particle

ولننتقل الآن إلى خاصية أخرى، ولتكن خاصية المكان (position)، والمطلوب الآن هو تعيين المكان المحتمل للجسيم داخل الصندوق. ومن التعريف المبدئي للخواص الحادة (sharp)، فإن خاصية المكان لا يمكن أن تكون خاصية حادة إنما هي خاصية غير حادة لا يمكن تعيين قيمتها المطلقة إنما يمكن تعيين القيمة المتوقعة (المتوسطة) لها، وذلك بالتعبير (ولنتذكر أن (Ψ) دالة مطبعة للواحد الصحيح):

$$\langle x\rangle = \langle \Psi^* | \hat{x} | \Psi\rangle$$

وبالتعويض عن قيمة الدالة Ψ:

$$\langle x\rangle = \frac{2}{a}\left\langle \sin\frac{n\pi x}{a} . x . \sin\frac{n\pi x}{a}\right\rangle$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a x \;\; \sin^2\frac{n\pi x}{a} dx \qquad (٣١-٤)$$

ونستبدل $\theta = \frac{n\pi x}{a}$ وعلى ذلك فإن:

$$x = \frac{a}{n\pi}\theta \;\; , \;\; dx = \frac{a}{n\pi}d\theta$$

وبذلك يكون التكامل (٤-٣٠) هو

$$\langle x\rangle = \frac{2a}{n^2\pi^2}\int_0^{n\pi}\theta \sin^2\theta \, d\theta$$

$$= \frac{2a}{n^2\pi^2}\left[\frac{\theta^2}{4} - \frac{\theta\sin 2\theta}{4} - \frac{\cos 2\theta}{8}\right]_0^{n\pi} \qquad (٣٢-٤)$$

$$= \frac{2a}{n^2 \;\; \pi^2} . \frac{n^2\pi^2}{4} = \frac{a}{2}$$

أي إنه مهما كانت حالة النظام (أي مهما كانت قيمة n) فإن القيمة المتوقعة أو القيمة المتوسطة لوجود الجسيم هي عند ($x = \frac{a}{2}$) أي إن متوسط عدد كبير جدًا من القياسات لحساب مكان الجسيم هو $\frac{a}{2}$، ويعني ذلك أنه إذا أجرينا قياسًا واحدًا

لحساب مكان الجسيم فإننا سوف نحصل على قيمة تقع بين ($x = 0$) و($x = a$)، أي بتكرار القياسات فإن القيم المعينة لن تتعدى هذه الحدود (وإلا كان الجسيم خارج الصندوق). ومعنى ذلك أن هناك درجة من عدم التأكد في تعيين المكان (uncertainty in position). وهذه الدرجة من عدم التأكد يمكن أن يعبر عنها بالفرق بين الحد الأدنى والحد الأعلى من القيم المعينة للمكان:

$$\Delta x = a - 0 = a$$

أي إننا لا يمكن أن نعين المكان بدقة أكثر من (a). فنقول إن الجسيم موجود في مكان ما داخل الصندوق بين الحدود ($x = a$) , ($x = 0$).

والآن بضرب درجة عدم التأكد في تعيين كمية التحرك (uncertainty in momentum) في درجة عدم التأكد في تعيين المكان (uncertainty in position) فإننا نحصل على صورة من صور قاعدة عدم التأكد لهيزنبيرج (Heisenberg uncertainty principle) والتي سبق أن قدمناها.

$$\Delta x . \Delta p = \frac{h}{a} . a = h$$

أي إن التعيين المتزامن للمكان وكمية التحرك للجسيم تعرض لدرجة من عدم التأكد تساوي على الأقل (h) ثابت بلانك، وذلك في الحالة المستقرة ($n = 1$) وتزيد درجة عدم التأكد في الحالات الأقل ثباتًا لتصبح تساوي (nh) حيث (n) هو رقم الكم الدال على الحالة.

مثال ٤-٨

احسب درجة عدم التأكد في كمية التحرك وفي سرعة كل من:

أ - إلكترون يتحرك في صندوق طوله 1Å.

ب - ذرة هيدروجين تتحرك في صندوق طوله 10Å.

ج - كرة تنس طاولة كتلتها 1g تتحرك في صندوق طوله 10 cm.

الحل

إن عدم التأكد في كمية التحرك كما هو واضح من المعادلة (٣٠-٤)

يعطي بالتعبير $\Delta P_x = \frac{h}{a}$

وحيث إن $P = m\,v$ فإن عدم التأكد في السرعة يساوي:

$$\Delta V = \Delta p/m$$

أ - بالنسبة للإلكترون

$$\Delta p = \frac{h}{a} = \frac{6.626x10^{-34}}{1x10^{-10}} = 6.626x10^{-24}\ \text{kg m s}^{-1}$$

$$\Delta V = \frac{\Delta P}{m} = \frac{6.626x10^{-24}}{9.1x10^{-31}} = 7.28x10^{6}\,\text{m/s}$$

ب- وبالنسبة لذرة الهيدروجين وكتلتها $m = 1.6726\times10^{-27}$ kg فإن:

$$\Delta P = \frac{6.626\times10^{-34}}{10\times10^{-10}} = 6.626\times10^{-25}\ \text{kg m s}^{-1}$$

$$\Delta V = \frac{6.626x10^{-25}}{1.6726x10^{-27}} = 3.96x10^{2}\,\text{m/s}$$

ج- أما بالنسبة لكرة تنس الطاولة فإن

$$\Delta P = 6.626\times10^{-33}\ \text{kg m s}^{-1}$$

$$\Delta V = 6.626\times10^{-30}\,\text{m/s}$$

التعليق: إن درجة عدم التأكد في حالة الإلكترون أو ذرة الهيدروجين هو مقدار كبير جدا بالنسبة لأبعاد الحركة (الكتلة وطول الصندوق)، وبالتالي فإنه لا يمكن إهماله (لاحظ درجة عدم التأكد في السرعة) أما في حالة كرة تنس الطاولة فإن درجة عدم التأكد متناهية في الصغر ولا يمكن قياسها أو الإحساس بها، أي أن إهمالها

لا يدخل على الحسابات أي خطأ ذي قيمة. وهذا مجال آخر من مجالات مبدأ التناظر (correspondence principle) بين ميكانيكا الكم والميكانيكا الكلاسيكية.

مثال ٤-٩

احسب المكان المتوقع $<x>$ لجسيم داخل الصندوق معروف إنه في الحالة $n = 2$. ما هي احتمالية وجود الجسيم في هذا المكان ؟

وكيف تعلل هذه النتائج؟

الحل

سبق وأن عينا المكان المتوقع $<x>$ لجسيم داخل الصندوق، وهو يعطى بالمعادلة (٤-٣٢) ويساوي $<x> = a/2$، مهما كانت قيمة (n) والاحتمالية عند $\left(x = \frac{a}{2}\right)$ يمكن حسابها مباشرة من مربع الدالة عند هذه النقطة:

$$\Psi^2_{x=a/2} = \frac{2}{a}\sin^2\frac{2\pi a/2}{a}$$
$$= \frac{2}{a}\sin^2\pi = 0$$

وطبعا هذه الاحتمالية تتغير من حالة إلى أخرى بتغير قيمة (n)، وهذا المثال يوضح الفرق بين المعنى الفيزيائي للقيمة المتوقعة - وهي متوسط قيم عديدة جدا من القراءات لخاصية ما - وبين الاحتمالية.

٤-٣-١ الاحتمالية المتزامنة Simultaneous Probability

كما قدمنا من قبل، فإن مربع الدالة أو بصورة أدق حاصل ضرب الدالة في مرافقها المعقد يمثل الاحتمالية (ρ):

$$\rho d\tau = \Psi_s^*\Psi_s \, d\tau \qquad (٤\text{-}٣٣)$$

ويدل هذا التعبير على احتمالية وجود الجسيم "ρ" في عنصر إحداثي في الفراغ $(d\tau)$ حول النقطة (s). لنفترض أنه يوجد جسيمان في نفس الصندوق ذي البعد الواحد.

ولنفترض أيضًا أنه ليس هناك أي تأثير متبادل بين هذين الجسيمين. والمطلوب هو حساب الاحتمالية الكلية لوجود الجسيمين في نقطة ما، ولتكن "s"، ويطلق على هذه الاحتمالية الكلية لفظ كثافة الاحتمالية (probability density). ويستدعي هذا التعيين المتزامن (simultaneous) لاحتمالية وجود الجسيم الأول عند النقط "s" واحتمالية وجود الجسيم الثاني عند نفس هذه النقطة. وكثافة الاحتمالية هي في النهاية حاصل ضرب احتمالية الجسيم الأول في احتمالية الجسيم الثاني. ويمكن التعبير عن دالة الحالة الكلية لنظام يتكون من عدد (N) من الجسيمات بالتعبير:

$$\Psi = \Psi_1(x_1, y_1, z_1)\ \Psi_2(x_2, y_2, z_2) \cdots \Psi_n(x_n, y_n, z_n)$$
$$\Psi = \prod_{i=1}^{n} \Psi_i(x_i, y_i, z_i) \qquad (٣٤-٤)$$

حيث العلامة Π تعني حاصل الضرب.

وعلى ذلك فإن كثافة الاحتمالية عند نقطة ما ولتكن "S" مثلا تكون:

$$(\Psi^*\Psi)_s = \prod_{i=1}^{n} \Psi_i^2(s)$$

مثال ٤-١٠

احسب كثافة الاحتمالية عند منتصف الصندوق $\left(x = \frac{a}{2}\right)$ إذا علمت أن الصندوق يحتوي على جسيمين أحدهما في المستوى ($n = 1$) والآخر في المستوى ($n = 3$) لدالة حالة يعبر عنها بالعلاقة: $\left[\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x\right]$

الحل

أولا: نحسب احتمالية وجود الجسيم الأول في منتصف الصندوق عندما تكون ($n = 1$):

$$\Psi_1^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi a/2}{a}\right)^2$$
$$= \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi}{2} = \frac{2}{a}$$

ثانيًا: نحسب الاحتمالية عند نفس النقطة للجسيم الثاني عندما تكون $(n = 3)$

$$\Psi_2^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{3\pi}{2} = \frac{2}{a}$$

والاحتمالية الكلية (كثافة الاحتمالية) هي لحاصل ضرب

$$\rho_{(x=a/2)} = \Psi_1^2\Psi_2^2$$
$$= \frac{2}{a}.\frac{2}{a} = \frac{4}{a^2}$$

وقبل أن نختتم هذا الفصل لعلنا نحاول أن نتعمق أكثر في فهم معنى وأهمية هذه الاحتماليات التي تجبرنا ميكانيكا الكم على تعيينها بصفة مستمرة. هذه الأهمية تتضح لنا أكثر عندما نتفهم ما تمكنا من عمله. إن كل الخواص الكيميائية والفيزيائية لأي نظام تعتمد أساسًا على التأثير التبادلي (interaction) بين عدد من الجسيمات المكونة لهذا النظام. هذا التأثير يعتمد أول ما يعتمد على الوضع (المكان) النسبي لهذه الجسيمات. وفي ميكانيكا الكم ليس هناك مكان محدد لأي من هذه الجسيمات، حيث إننا نتعامل مع طبيعتها الموجية. ويُمَكننا مربع دالة الحالة من معرفة احتمال وجود الجسيم بجوار نقطة ما، وبالتالي يمكن أن نعرف ذلك لكل الجسيمات. وتأثر الجسيمات مع أي مؤثر خارجي، مثل الأشعة أو المجال الكهربائي أو المغناطيسي ما هو إلا متوسط موزون لتأثر كل الجسيمات الموجودة في أماكن مختلفة. وهذا المتوسط الإحصائي ما هو إلا كثافة الاحتمالية.

٤-٤ الحركة في أكثر من اتجاه Motion in More than One Dimension

إذا سمح للجسيم أن يتحرك في كل الاتجاهات وليس في الاتجاه (x) فقط، فإننا في هذه الحالة نتكلم عن حركة في الاتجاهات الثلاثة (x, y, z) يكون فيها الصندوق مكعب الشكل (cubical). وإذا سمحنا للجسيم بالحركة في اتجاهين فقط

(x , y) فإن الصندوق يكون مستطيلاً مسطحًا، وفي كل الحالات فإن دوال الحالة والطاقات المصاحبة لها يجب أن تعكس هذه الاتجاهات. ولنبدأ بالسماح للجسيم بالحركة في الاتجاه (x) وفي الاتجاه (y) ولنفترض أن طول الصندوق في الاتجاه (x) هو (a_1) وفي الاتجاه (y) هو (a_2)، أي إن الصندوق المستطيل أبعاده ($a_1 x a_2$).

ويمكن كتابة معادلة شرودنجر في اتجاهين بصورة عامة كالآتي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\hat{v}_{(x,y)}\right]\psi = E\psi \qquad (٣٥-٤)$$

وتتغير طاقة الوضع حسب المنطقة كالآتي:

عندما $0 > x > a_1$ أو $0 > y > a_2$

وهي المنطقة خارج المستطيل المسطح. أما داخل هذا المستطيل فيمكن التعبير عنها رياضيا كالآتي:

عندما $0 \le x \le a_1$ أو $0 \le y \le a_2$

وبذلك يمكن كتابة معادلة الحركة (شرودنجر) داخل المستطيل المسطح

$$\Psi_2^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{3\pi}{2} = \frac{2}{a} \qquad (٣٦-٤)$$

وهذه المعادلة الأخيرة هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية في المتغيرين (x و y). وأسهل الطرق لحل مثل هذه المعادلات (وخاصة إذا تعددت المتغيرات) هي تطبيق مبدأ فصل المتغيرات. ولتنفيذ ذلك نفترض الشكل العام للدالة (Ψ) وكأنها مكونة من جزئين (X و Y) الجزء الأول منها X يعتمد فقط على المتغير x ولا يتأثر بتغير y والجزء الثاني منها يعتمد فقط على المتغير y ولا يتأثر بتغيير x أي:

$$\Psi(x,y) = X(x)Y(y) \qquad (٣٧-٤)$$

وبالتعويض في (٤-٣٦) بالدالة (٤-٣٧) وباعتبار $Y(y)$ ثابتًا بالنسبة إلى (x) و($X(x)$) ثابت بالنسبة إلى (y) فإن:

$$Y\frac{d^2X}{dx^2}+X\frac{d^2Y}{dy^2}=\left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right)XY$$

بقسمة الطرفين على $\Psi = XY$ فإننا نحصل على:

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}=\left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right) \qquad (٤-٣٨)$$

وبإعادة الترتيب فإن (٤-٣٨) تصبح:

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}=-\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} \qquad (٤-٣٩)$$

ولا بد أن تتحقق المعادلة (٤-٣٩) لكل قيم المتغيرين (x , y). ولكن عند تغيير قيم (x) فإن الطرف الأيسر من (٤-٣٩) هو الذي يتأثر فقط، في حين يظل الطرف الأيمن (لا يعتمد على x) ثابتًا. والعكس أيضا صحيح عند تغيير (y) فإن الطرف الأيمن يتأثر في حين أن الطرف الأيسر يبقى ثابتًا. ولكي يتحقق ذلك لا بد وأن يتساوي الطرفان من خلال ثابت، ولنفترض قيمته في هذه اللحظة $\left(\frac{2mE(y)}{\hbar^2}\right)$، وبذلك يمكن فصل المعادلة (٣٩-٤) إلى المعادلتين

$$\frac{1}{X}\frac{d^2x}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{2mE(y)}{\hbar^2} \qquad (٤-٤٠-أ)$$

$$\frac{-1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}=\frac{2mE(y)}{\hbar^2} \qquad (٤-٤٠-ب)$$

وبإعادة ترتيب (٤-٤٠) فإننا نحصل على المعادلات التفاضلية

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}=\frac{-2m}{\hbar^2}\left(E-E(y)\right)$$

$$\frac{d^2x}{dx^2}=\frac{-2mE(x)}{\hbar^2}X \qquad (٤-٤١-أ)$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2}=\frac{-2mE(y)}{\hbar^2}Y \qquad (٤-٤١-ب)$$

والمعادلتان (٤-٤١) لهما نفس الشكل العام للمعادلة (٤-١٠)، حيث يمكن استبدال (X) أو (Y) بالدالة العامة (Ψ). أي إننا فصلنا المعادلة (٤-٣٦) وهي معادلة في متغيرين إلى معادلتين كل منهما في متغير واحد، وكلتاهما لها نفس الشكل العام للحركة في اتجاه واحد، وبالتالي فإن لهما نفس الحل العام (٤-٢١) أي إن:

$$E(x) = \frac{n_x^2 h^2}{8ma_1^2} \quad (٤-٤٢-أ)$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{n_x \pi x}{a_1} \quad (٤-٤٢-ب)$$

$$E(y) = \frac{n_y^2 h^2}{8ma_2^2} \quad (٤-٤٢-ج)$$

$$\Psi(y) = \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin \frac{n_y \pi y}{a_2} \quad (٤-٤٢-د)$$

والطاقة الكلية للنظام تساوي:

$$E = E(x) + E(y) = \left(\frac{n_x^2}{a_1^2} + \frac{n_y^2}{a_2^2} \right) \frac{h^2}{8m} \quad (٤-٤٣)$$

في حين أن الدالة الكلية للنظام تعطى بالتعبير:

$$\Psi(x, y) = X(x) . Y(y)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{n_x \pi x}{a_1} . \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin \frac{n_y \pi y}{a_2} \quad (٤-٤٤)$$

$n_x = 1 , 2 , 3 ,..........$ و $n_y = 1 , 2 , 3 ,.............$

حيث إن جميع خواص الحل الذي درسناها في حالة الحركة في اتجاه واحد تنطبق على حالتنا هذه. ولكن الظاهرة الجديدة التي تستوجب الاهتمام في هذا الحل هي الحالة التي يكون فيها $a_1 = a_2 = a$، في هذه الحالة يسبح السطح مربعًا والطاقة الكلية

(المعادلة (٤-٤٣)) تصبح:

$$E = \left(n_x^2 + n_y^2\right)\frac{h^2}{8ma^2} \qquad (٤-٤٥)$$

وهذا يعني أن حالة لها أرقام الكم $n_x = b$ و $n_x = a$ ستكون لها طاقة كلية مساوية لحالة أخرى مختلفة تمامًا تتميز بأرقام الكم $n_y = a$ و $n_x = b$. أي إن الحالات المختلفة ($a \neq b$) ممكن أن تكون لها نفس الطاقة. هذه الخاصية تسمى خاصية الانقسامية (degeneracy). والحالات المختلفة التي لها نفس الطاقة تسمى حالات منقسمة (degenerate states) وعدد الحالات المتقسمة يسمى درجة الانقسامية (degree of degeneracy)، وعلى سبيل المثال فإن الحالتين $n_x = 2$, $n_y = 1$ & $n_x = 1$, $n_y = 2$ يمكن التعبير عنهما كالآتي:

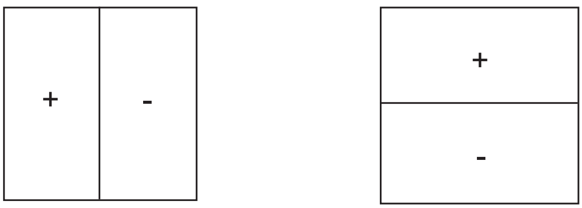
$$E_{12} = \left((1)^2 + (2)^2\right)\frac{h^2}{8ma^2} = \frac{5h^2}{8ma^2}$$

$$E_{21} = \left((2)^2 + (1)^2\right)\frac{h^2}{8ma^2} = \frac{5h^2}{8ma^2}$$

لهما نفس الطاقة، ولكن دوال حالة مختلفة

$$\Psi_{12} = \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}.\sin\frac{2\pi y}{a}$$

$$\Psi_{21} = \frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}.\sin\frac{\pi y}{a}$$



(a) (b)

شكل (٣-٤): الدوال المنقسمة (a) $\Psi_{2,1}$, (b)، $\Psi_{1,2}$ في حالة الصندوق المربع ثنائي الأبعاد.

وبتفحص الشكل (٤-٣) يمكننا أن نتفهم أسس عملية الانقسامية بين الحالات المختلفة، حيث يتضح من هذا الشكل أن إحدى الدوال يمكن تحويلها إلى الأخرى بعملية تحويل تماثلي (symmetry transformation) للنظام، وهو في حالتنا هذه الدوران $90°$. وفي الحقيقة، فإنه يمكن اقتفاء أثر عملية الانقسامية دائمًا وأبدًا من عمليات التماثل المختلفة المتاحة للنظام. والعكس أيضا صحيح، ففقد الانقسامية يرجع إلى فقد التماثل. فمثلا لو أن $(a_1 \neq a_2)$ فإنه لا يمكن تحويل إحدى الحالات إلى حالة أخرى، وبالتالي فلا توجد انقسامية بينهما. أما إذا قابلنا عملية الانقسامية بين الحالات المختلفة لنظام لا نتوقع لحالاته انقسامية (لا توجد عملية تماثل مثلاً) فإن هذه الظاهرة تسمى الانقسامية بالمصادفة (accidental degeneracy).

وإذا انتقلنا الآن إلى الحركة في ثلاثة اتجاهات (x, y, z) فإن الحل لن يضيف أي جديد إلى معلوماتنا السابقة، وبتتبع نفس خطوات فصل المتغيرات (separation of variables) التي اتبعت في حالة الحركة في اتجاهين فإننا يمكن أن نصل إلى:

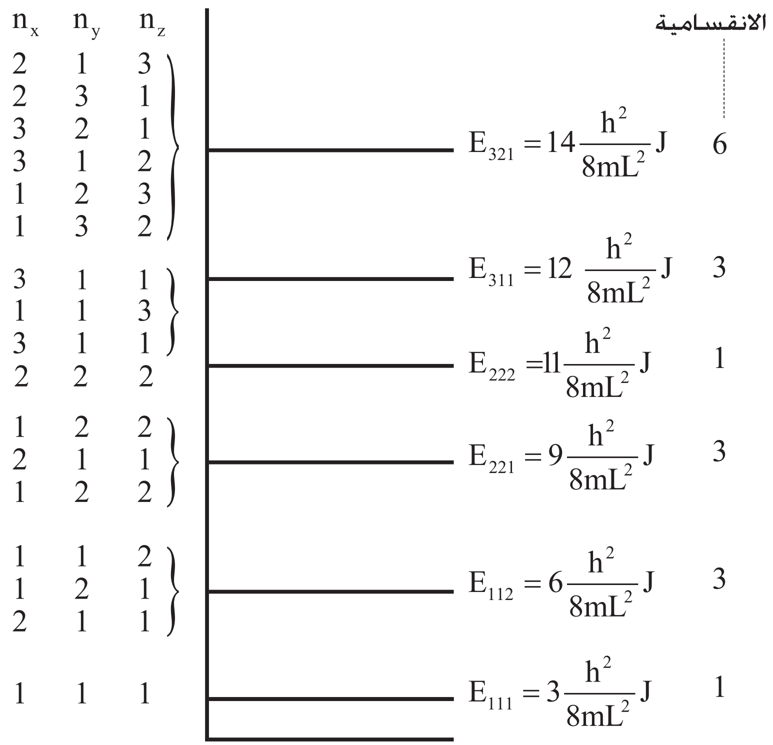
$$\begin{aligned} E &= E(x) + E(y) + E(z) \\ &= \left(\frac{n_x^2}{a_1^2} + \frac{n_y^2}{a_2^2} + \frac{n_z^2}{a_3^2}\right)\frac{h^2}{8m} \end{aligned} \qquad (\text{٤-٤٦-أ})$$

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi(x)\Psi(y)\Psi(z) \\ &= \sqrt{\frac{2}{a_1}}\sin\frac{n_x\pi x}{a_1}.\sqrt{\frac{2}{a_2}}\sin\frac{n_y\pi y}{a_2}.\sqrt{\frac{2}{a_3}}\sin\frac{n_z\pi z}{a_3} \end{aligned} \qquad (\text{٤-٤٦-ب})$$

حيث $n_x = 1, 2, 3, ... \ \& \ n_y = 1, 2, 3, ... \ \& \ n_z = 1, 2, 3,$ ، ويجب أن نلاحظ هنا كيفية ظهور أرقام الكم. ففي كل حالة فإن ظهور رقم الكم هو ظهور تلقائي تمامًا يصاحب عملية تطبيق حالات الحدود (boundary-conditions). وشروط الحركة في الاتجاه (x) مثلاً عند تطبيقها فإننا نقيد حركة الجسيم تبعا لهذه الشروط، وهذا التقيد هو المسؤول عن ظهور رقم الكم (n_x). وتقيد الحركة على المحور (y) بتطبيق شروط الحركة في هذا الاتجاه مسؤول عن ظهور رقم الكم (n_y) وهكذا. أي إن كل

اتجاه حركة مقيد له رقم كم مصاحب له. فعدد أرقام الكم في أي نظام يساوي عدد المتغيرات (اتجاهات الحركة) المحددة لهذا النظام (انظر الشكل ٤-٤).

الانقسامية $E = \frac{h^2}{8m}\left(n_x{}^2 + n_y{}^2 + n_z{}^2\right)$



شكل (٤-٤): الإنقسامية لجسيم كتلته (m) يتحرك في صندوق مكعب طول ضلعه (L) وظهور أرقام الكم (n_z , n_y , n_x) لدوال الحالات $(\Psi_z , \Psi_y , \Psi_x)$.

يلاحظ من الشكل (٤-٤) أنه عندما تكون أرقام الكم $(n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1)$ فتنتج دالة واحدة لها قيمة ذاتية واحدة تساوي $(E_{111} = \frac{3h^2}{8mL^2})$، ولذلك فالانقسامية هنا تساوي واحد. أما عندما $(n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1)$ أو $(n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1)$ أو $(n_x = 1, n_y = 1, n_z = 2)$ فتنتج ثلاث دوال حالة مختلفة، ولكن لها نفس الطاقة $(E_{211} = \frac{6h^2}{8mL^2})$، ولذلك فالانقسامية تساوي ثلاثة، وهكذا بالنسبة لمستويات الطاقة الأخرى.

كما أن عملية فصل المتغيرات (separation of variables) التي استخدمناها هنا هي عملية أساسية في ميكانيكا الكم. وهناك قاعدة تحدد متى وكيف تستخدم هذه الطريقة، وذلك عندما يمكن كتابة مؤثر الهملتونين للنظام ($\hat{H}$) على صورة مجموع حدود كل حد منها يعتمد فقط على متغير واحد ($\hat{H} = \sum_i \hat{h}_i$) فإنه وفي هذه الحالة يمكن إيجاد دالة موجية كحل لمعادلة شرودنجر ($\hat{H}\Psi = E\Psi$) يمكن كتابتها في صورة حاصل ضرب مجموعة من الدوال التي تعتمد كل منها على متغير واحد فقط. أي إن Ψ يمكن كتابتها بالصورة:

$$\Psi = \Pi_i \phi_{(qi)}$$

حيث $\phi_{i(qi)}$ هي دالة في المتغير (q_i) فقط ولا تعتمد على أي من المتغيرات الأخرى. وفي هذه الحالة فإن الطاقة الكلية للنظام (أي القيمة الذاتية في معادلة شرود نجر) يمكن كتابتها في صورة مجموعة حدود كل منها يمثل الطاقة المصاحبة لدالة المتغير الواحد (q_i) (single variable function) أي $E = \sum_i \varepsilon_i$.

مثال ٤-١١

جسيم كتلة (m) يتحرك في صندوق مكعب طول ضلعه (L). إذا كانت إحدى مجموعات أرقام الكم هي ($n_x = 3, n_y = 2, n_z = 1$)، احسب طاقة هذا المستوى.

كم عدد دوال الحالة (الانقسامية) التي لها نفس الطاقة؟

الحل

تحسب الطاقة للجسيم الذي يتحرك في ثلاثة أبعاد بالعلاقة:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8mL^2}({n_x}^2 + {n_x}^2 + {n_z}^2)$$

لحساب طاقة المستوى ($n_x = 3, n_y = 2, n_z = 1$) نعوض في المعادلة أعلاه

$$E_{321} = \frac{h^2}{8mL^2}(3^2 + 2^2 + 1^2) = 14\frac{h^2}{8mL^2}\ J$$

باستخدام التباديل والتوافيق نجد أن هنالك ستة مجموعات للإعداد (n_x, n_y, n_z) تعطي نفس الطاقة، ولذلك فالانقسامية تساوي ستة، أي هنالك ستة دوال مختلفة لها نفس القيمة الذاتية (نفس الطاقة).

٤-٥ مغزى الاتجاه لدوال الموجة
Directional Implications of Wave Functions

في حالة حركة الجسيم داخل الصندوق في اتجاه واحد، اخترنا دالة الموجة (٤-١١) التي بعد تطبيق شروط الحركة عليها اتخذت الشكل النهائي

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \qquad (٤-٢٠)$$

وقد أوضحنا في حينه أن الدوال الأسية من الممكن أن تؤدي نفس هذا الدور. والتمرين رقم (٦) يوضح أن الصورة العامة للدالة الأسية (٤-٤٧) هو أيضا حل لنفس معادلة الحركة(٤-١٠) وبنفس الطاقة.

$$\Psi = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \qquad (٤-٤٧)$$

حيث k ثابت يعطى بالعلاقة:

$$k^2 = \frac{8\pi^2 m(E - V)}{h^2} \qquad (٤-٤٨)$$

وحيث إن $V = 0$ داخل الصندوق، فإن الثابت k يمكن كتابته بالصورة:

$$k^2 = 8\pi^2 mE / h^2$$

وحيث إن الطاقة الكلية (E) تعبر في هذه الحالة عن طاقة الحركة فإننا يمكن أن نعبر عن (k) بالصورة:

$$k^2 = 4\pi^2 m^2 v^2 / h^2$$
$$k = 2\pi mv / h = \frac{p}{\hbar}$$

وعلى ذلك فإن المعادلة (٤-٤٧) يمكن كتابتها بالصورة (٤-٤٩)

$$\Psi = Ce^{ipx/\hbar} + De^{-ipx/\hbar} \qquad (٤-٤٩)$$

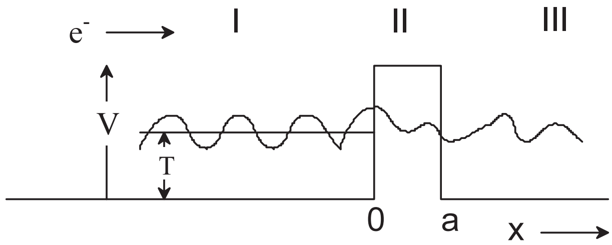
والآن هيا بنا نحلل المغزى والفرق بين الدالتين الموجيتين (٤-١١) و(٤-٤٩)، أي من الدالتين تمثل حلاً مقبولاً لنفس المعادلة التفاضلية (٤-١٠) وبنفس الطاقة. يوجد في المعادلة (٤-٤٩) حدان مختلفان ومستقلان تمامًا، الأول منهما سنطلق عليه الحد "C"، فهو يمثل حركة الجسيم داخل الصندوق في اتجاه يسمح للجسيم بكمية تحرك موجبة، في حين أن الحد الثاني "D" يمثل حركة الجسيم في الاتجاه المعاكس بكمية تحرك سالبة. فالمغزى هنا يمثل مجموع دالتين، كل دالة تمثل حركة في اتجاه مختلف عن الدالة الأخرى. في حين أن الدالة (٤-٢١) وهي تمثل موجة مستقرة (standing wave) وتعبر عن جسيم يتحرك في الاتجاه الأمامي والمعاكس في نفس الوقت، أي حركة متزامنة في اتجاهين متعاكسين، وبالطبع فإنه من الصعب تخيل هذا الوضع، ويجب هنا أن نتذكر أن دالة الموجة ما هي إلا وصف كمي لسلوك الجسيم.

ومما سبق يتضح أن المعادلتين (٤-٢١)، (٤-٤٩) تقدمان وصفين مختلفين للمشكلة. وفي أغلب الأحوال، فإن أحد هذه الحلول يكون أكثر مناسبة في ظرف معين، ويكون الآخر أكثر مناسبة للاستعمال في ظرف آخر. وعلينا أن نقرر أي الحلين أكثر ملاءمة لشرح ظاهرة معينة أو لدراسة خاصية ما.

٤-٦ التسرب الكمي Quantum Leaks

يمكن إيقاف شعاع من الضوء بوضع حائل معتم في طريقه. ولكن إذا كان هذا الحائل غير سميك بدرجة كافية، فإن جزءًا من الضوء سوف يمر خلاله.

وهذا السلوك المعروف هو نتيجة للطبيعة الموجية للضوء. فالموجة - عكس الجسيمات - يمكنها اختراق المواد الموضوعة في طريقها مع التناقص التدريجي لسعة اهتزاز الموجة أثناء مرورها داخل المادة. ومن الممكن أن تخترق هذه الموجة المادة وتخرج من الناحية الأخرى بسعة اهتزاز لا تساوي الصفر، وذلك يتوقف على نوع المادة وسمكها. ويطلق على عملية اختراق جزء من الضوء للمادة عملية "التسرب" (Leaking). والجسيمات الميكروسكوبية (microscopic particles) (والتي تتصرف تصرف الموجات) يمكن أيضًا أن تظهر خاصية التسرب، وبالتالي فهناك احتمال لوجود الجسيم خارج الإناء المحتوى عليه، مع أن هذه العملية لا يمكن تخيلها كلاسيكيًا، حيث إن الجسيم لا يمتلك الطاقة الكافية للهروب خارج الإناء. هذا التسرب إلى المناطق الممنوعة كلاسيكيًا يسمى ظاهرة "التنفق" (the tunneling phenomenon). ويمكن أن نتخيل هنا الوضع في الشكل (٤-٥)، حيث يتحرك إلكترون من اليسار إلى اليمين على المحور السيني (x) بطاقة حركة ($T = \frac{1}{2}mv^2$). وعند النقطة ($x = 0$) يصطدم هذا الإلكترون بحائل (barrier) له جهد معاكس(retarding voltage). ولنفترض أن طاقة الوضع (حاصل ضرب الشحنة في الجهد في هذه الحالة) هي (V) (barrier height) ويمكن هنا أن نفرق بين حالتين:



شكل (٤-٥): جسيم بطاقة حركة (T) يتسرب خلال حائل جهد (V) رغما عن كون $V > T$.

أولا: إذا كانت $T > V$، وفي هذه الحالة يستطيع الإلكترون أن يتغلب على حائل الطاقة ويعبر إلى الناحية الأخرى. وهذه النتيجة الكلاسيكية صحيحة من الناحية

الكمة أيضًا.

ثانيًا: إذا كانت $T < V$، كلاسيكيًا سوف يتوقف الإلكترون تمامًا عن الحركة في الاتجاه $(+x)$ وتنعكس حركته عند النقطة $(x = 0)$. ولكن من الناحية الكمة فإن هذا الإلكترون يمكن أن يتسرب (leaks) خلال هذا الحائل.

ولنتفهم السبب في ذلك، فإننا نكتب معادلات الحركة (معادلات شرودنجر) لكل منطقة من المناطق الثلاثة ثم نحاول أن نوجد حلاً لكل منها. وبالإشارة إلى الشكل (٤-٥) في المنطقة (I) حيث$(V = 0)$، وبالتالي:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\Psi_1 \qquad \text{(٤-٥٠-أ)}$$

في المنطقة (II) حيث $V > E$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} = \frac{-2m(E - V)}{\hbar^2}\Psi_2 \qquad \text{(٤-٥٠-ب)}$$

وفي المنطقة (III) حيث $V = 0$

$$\frac{d^2\Psi_3}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\Psi_3 \qquad \text{(٤-٥٠-ج)}$$

والحل في كل من هذه المناطق الثلاثة هو

$$\Psi_1 = A\exp(-ikx) \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \text{(٤-٥١-أ)}$$

$$\Psi_2 = B\exp(-k'x) \quad ; \quad k' = \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar} \qquad \text{(٤-٥١-ب)}$$

$$\Psi_3 = C\exp(-ikx) \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \text{(٤-٥١-ج)}$$

ويجب أن نوضح هنا نقطتين أساسيتين، أولاهما أننا اخترنا الدوال الأسية لأنها تحدد الاتجاه (راجع فصل (٤-٤))، والمعادلات (٤-٥١) حددت الاتجاه (باختبار

الدوال الأسية بالإشارة السالبة) من اليسار إلى اليمين، وهذا مهم جدا، حيث إن الجسيمات التي تتحرك في هذا الاتجاه هي فقط التي سوف تصطدم بالحائل. أما النقطة الثانية فهي أنه في منطقة الحائل ذاتها (المنطقة II) حيث $V > T$ فإن الحل الوحيد المقبول هو الدوال الحقيقية (real functions).

لنطبق الآن حالات الحدود على المعادلات (٤-٥٠)، (٤-٥١) فإنه عند الحدود ($x = 0$ و $x = a$) لا بد وأن تتحقق الشروط التالية:

عند $x = 0$

$$\Psi_{I}(0) = \Psi_{II}(0)$$

$$A\exp\left(-ik\left(0\right)\right) = B\exp\left(-k^{\backprime}\left(0\right)\right) \qquad (٤-٥٢)$$

$$A = B$$

وعند $x = a$

$$\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a)$$

$$B\exp(-k^{\backprime}a) = C\exp(-ika) \qquad (٤-٥٣)$$

ومن المعادلتين (٤-٥٢) و (٤-٥٣) فإن:

$$A\exp(-k^{\backprime} a) = C\exp(-ika) \qquad (٤-٥٤)$$

إن الحد الأيمن من المعادلة (٤-٥٤) يمثل سعة الموجة المصاحبة للجسيم التي اخترقت وعبرت الحائل، وبالتالي فإنه كلما ازدادت قيمة $|C|$ زادت احتمالية الاختراق، أما إذا كانت $|C|$ تساوي الصفر، فمعنى ذلك أن الحائل لا يمكن اختراقه. وحيث إن الاحتمالية تعطى بمربع الدالة عند أية نقطة، فإننا إذًا نبحث عن تعبير بالصورة:

$$P = \frac{|C^2|}{|A^2|}$$

وهو يعبر عن احتمالية الاختراق بالنسبة لاحتمالية الاقتراب من الحائل. وبتربيع طرفي المعادلة (٤-٥٤) مع الأخذ في الاعتبار أن الدالة المعقدة يمكن كتابة مربعها على أنه حاصل ضرب الدالة في مرافقها المعقد، فإنه يمكن كتابة:

$$A^2 \exp\left(-2k^{\backslash} a\right) = C^2 \exp\left(-ika\right)\exp\left(ika\right) = C^2 \exp\left(-ika + ika\right)$$

$$\left|A^2\right| \exp\left(-2k^{\backslash} a\right) = \left|C^2\right|$$

$$\frac{\left|C^2\right|}{\left|A^2\right|} = \exp\left(-2k^{\backslash} a\right) \qquad (٤-٥٥)$$

إن هذه النسبة C^2/A^2 تعطي الاحتمالية النسبية لكون إلكترون في المنطقة (III) أو المنطقة (I) ويمكن تسمية هذه النسبة بمعامل التنفق (tunneling coefficient)، حيث إنه يعطي احتمالية عبور الحائل بدون حصول الإلكترون على طاقة كافية $V > T$. ومن المعادلة (٤-٥٥) يتضح أن احتمالية العبور تقل بزيادة سمك الحائل و/ أو بزيادة طاقة الوضع V.

وحيث إن ظاهرة التسرب هي ظاهرة كمية أساسًا، فإنه كلما بعد النظام عن الصورة الكلاسيكية زادت احتمالية التنفق. وكلما قلت كتلة الجسيم - مثلاً - ازدادت طبيعته الموجية أهمية، وبالتالي أصبح الوصف الكمي له أكثر دقة، ويترتب على ذلك زيادة قدرة الجسيم على التنفق (tunneling). فالإلكترون مثلاً له قدرة تنفق أعلى من ذرة الهيدروجين، في حين أن تلك الأخيرة قدرتها على التنفق أكبر بكثير من الذرات الأثقل.

إن ظاهرة التنفق لها العديد من التطبيقات، فهناك ظواهر عديدة لا يمكن شرحها إلا بافتراض تسرب الإلكترونات أو الجسيمات. فمثلاً خروج جسيمات α أو β من الذرات المشعة ما هي إلا عملية تسرب بدون حصول هذه الجسيمات على طاقة كافية للتغلب على طاقة الوضع (التجاذب) مع النواة الأم. وعند تقريب طرف معدني من سطح فإن الإلكترونات من الممكن أن تتسرب من السطح إلى الطرف المعدني. وعملية تشغيل ميكروسكوب تنفق الإلكترون الماسح (electron scanning tunneling microscope) تعتمد أساسًا على هذه الظاهرة.

تمارين

١- ما هي التداعيات الفيزيائية لعدم تطبيق شروط الحركة (٤-١٤) على حركة الجسيم داخل الصندوق ؟

٢- احسب الأطوال الموجية المسموح بها لجسيم داخل صندوق طوله 10 nm.

٣- افترض صندوقًا طوله 10 nm احسب احتمالية وجود جسيم كتلته m في:

أ)-المنطقة الواقعة بين 5.05 nm و $x = 4.95$.

ب) - المنطقة الواقعة بين 2.05 nm و $x = 1.95$.

ج) - المنطقة الواقعة بين 10.00 nm و $x = 9.90$.

د) - في النصف الأيمن من الصندوق.

هـ) - في الثلث الأوسط من الصندوق.

٤- إن جزيئًا من جزيئات الغاز إذا حبس في إناء، فإنه يتمتع بمستويات طاقة مكماة، ولكن ما مدى أهمية وتأثير كون الطاقة مكماة في هذه الحالة ؟ احسب طاقة المستويين (E_1 , E_2) لجزيء الأكسجين المحبوس داخل إناء طوله 5 cm. احسب قيمة رقم الكم (n) الذي يعطي طاقة لجزيء الأكسجين تساوي $\frac{1}{2}kT$ عند درجة حرارة الغرفة.

وما هو الفرق بين طاقة هذا المستوى والمستوى الثاني له مباشرة ؟

٥- افترض إحداثيات صندوق البعد الواحد هي من $(x = \frac{1}{2} a)$ إلى $(x = -\frac{1}{2} a)$ ضع نقطة الأصل عند منتصف الصندوق واستخدم الدالة (٤-١١) وأوجد قيم A , B في هذه الحالة ؟

٦- إن أحد الحلول المقبولة لحركة جسيم داخل صندوق البعد الواحد يمكن كتابته بالصورة: $\psi = Ce^{-ikx} + De^{ikx}$.

اثبت أن هذه الدالة هي حل مقبول لمعادلة (٤-١٠) وعين قيم C, D.

أعد تعيين قيمتا الثابتين C , D بعد وضع نقطة الأصل في منتصف الصندوق.

٧- لجسيم في صندوق البعد الواحد، احسب قيمة التكامل:

$< \Psi_1 \left| x - \frac{1}{2}a \right| \Psi_2 >$ (استخدم شرط التعامد لتبسيط العملية).

٨- افترض وجود جسيمين داخل صندوق، الأول في الحالة $(n=2)$ والآخر في الحالة $(n=3)$. احسب كثافة الاحتمالية الكلية عند النقاط $(x = \frac{1}{8}a \quad , \frac{1}{4}a \quad , \frac{3}{8}a \quad \frac{1}{2}a)$، وحيث إن الدوال متماثلة حول منتصف الصندوق $(x = ½\ a)$، فإن الاحتمالية عند $(x = \frac{5}{8}a, \frac{3}{4}a, \frac{7}{8}a)$ ستكون معروفة. ارسم علاقة بين الاحتمالية الكلية والمتغير x.

٩- إذا علمت أنه يوجد بروتون داخل صندوق في المستوى $(n = 5)$ عندما يسقط هذا البروتون إلى المستوى $(n = 4)$ يفقد طاقة في صورة ضوء له الطول الموجي $(2000\ nm)$. ما هو طول الصندوق ؟

١٠- عين قيمة كل من (x , y) لجسيم داخل صندوق مربع عندما تكون كثافة الاحتمالية أعلى ما يمكن للحالة $(n_x = n_y = 2)$.

١١- ناقش الانقسامية الممكنة بين الحالات المتاحة لجسيم يتحرك داخل صندوق ثلاثي الأبعاد.

١٢- افترض وجود ثلاثة جسيمات (مستقلة وغير متفاعلة مع بعضها البعض) داخل صندوق مكعب طول ضلعه L.

أ - ما هي كثافة الاحتمالية لوضع يكون إحداثيات الجسيمات كالتالي:

Particle	x	y	Z
1	a / 4	a / 2	a / 2
2	a / 2	a / 2	a / 2
3	a / 4	a / 4	a / 4

ب - ما هي الاحتمالية لوجود الثلاثة جسيمات كل في حجم $\frac{a^3}{10^3}$ حول النقاط المحددة في (p) ؟

١٣- اثبت أن المكان المتوقع للجسيم الموجود داخل صندوق ثلاثي الأبعاد هو عند الإحداثيات $a_{1/2}, a_{2/2}, a_{3/2}$.

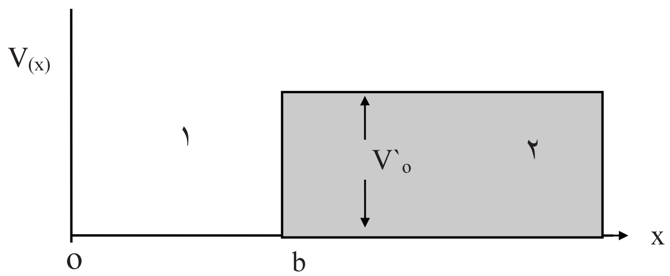
١٤- افترض وجود ذرة هيليوم داخل صندوق مكعب طول ضلعه 10 cm، فإذا كانت درجة الحرارة داخل الصندوق تتأرجح بمقدار 1 K. احسب رقم الكم المقابل لمتوسط طاقة حركة ذرة الهيليوم عند هذه الدرجات من الحرارة (افترض $n_x = n_y = n_z$).

١٥- استنبط احتمالية التسرب للإلكترون خلال حائل سمكه 1.0 nm له طاقة وضع تزيد عن طاقة حركة الإلكترون بمقدار 0.62 eV.

١٦- استنبط احتمالية التسرب لبروتون عند درجة 300 K إذا علمت أن ارتفاع الحائل هو 5kJ/mol وسمكه 0.1 nm.

١٧- افترض وجود جسيم في صندوق أبعاده (a , b , c) حيث (a ≠ b =c) استخدم جدول لتوضيح أرقام الكم (n_x , n_y , n_z) والطاقة ودرجة الانقسامية للحالات $(n = 1 \text{ to } n = 5)$
(افترض النسبة $\frac{a^2}{b^2} = 2$).

١٨- إذا قيدت حركة جسيم داخل صندوق محدد بحائل بطاقة (V\`o) كما هو موضح بالشكل:



أ - عين الطاقة المصاحبة للحالات المسموح بها للنظام (في المنطقة $E < V_o^{`}$).

ب - اشتق دالة الموجة للحالة المستقرة عندما تكون طاقة الحائل $V_o^{`} = 5h^2 / 8ma^2$ كحالة خاصة.

١٩- إذا قيدت حركة إلكترون داخل صندوق ذي بعد واحد. احسب طول الصندوق اللازم لجعل طاقة نقطة الصفر (zero-point energy) (طاقة الحالة المستقرة) تساوي طاقة كتلته $E = mc^2$. عبر عن النتيجة باستخدام العلاقة $\lambda = h/mc$.

٢٠- إن الأمر يحتاج طاقة لضغط الصندوق إذا ما كان الجسيم بداخله، مما يوحي أن الجسيم يؤثر بقوة (F) على جدار الصندوق. فإذا افترض أن لزيادة الطول بمقدار (da) فإن الطاقة تتغير بمقدار ($dE = -F da$). استنبط تعبيرًا رياضيًا للقوة. عند أي طول للصندوق تكون القوة مساوية إلى 1N إذا كان الجسيم هو إلكترون في الحالة $n = 1$ ؟

٢١- يمكن تعريف جذر متوسط مربع حيود الجسيم عن مكانة المتوسط بالتعبير:

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

احسب (δx) للجسيم داخل صندوق ذي البعد الواحد، واثبت أنها تقترب من قيمتها الكلاسيكية عندما تقترب $n \to \infty$ (عين قيمة $\langle x^2 \rangle = \int_0^p x^2 \psi^2 dx$).

في الحالة الكلاسيكية، فإن توزيع الاحتمالية متساوٍ في جميع النقط داخل الصندوق، وبالتالي فإن ($\psi_{(x)}^2 = 1/a$).

٢٢- القيمة المتوسطة ومتوسط مربع كمية التحرك يمكن التعبير عنهما بالتكاملات:

$$\langle p \rangle = \int_0^a \psi^* \hat{p} \; \psi dx$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^a \psi^* \hat{p}^2 \psi dx$$

على التوالي. احسب قيمة هذه التكاملات لجسيم يتحرك داخل صندوق ذي بعد واحد. ثم احسب متوسط مربع الحيود (δp): $\delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ ، واثبت أن النتائج متفقة مع قاعدة عدم التأكد لهيزنبرج.

$$[(\Delta x . \Delta p) \geq 1/2\hbar]$$

(بالنسبة لـ $\langle p^2 \rangle$ تذكر أن $E = p^2 / 2m$ ومن المعادلة (٤-٢١) فإن الطاقة لكل قيمة لرقم الكم (n) معلومة).