جامعة الانبار

كلية التربية الأساسية / حديثة

قسم العلوم العامة / فرع الفيزياء

اسم التدريسي: م.م. عبدالرحمن ظافر صباح

المرحلة الدراسية: الثالثة

الفصل الدراسي: الاول

اسم المادة باللغة العربية: ميكانيك الكم

اسم المادة باللغة الإنكليزية: Quantum Mechanics

اسم المحاضرة باللغة العربية: دالة الموجة

اسم المحاضرة باللغة الإنكليزية: Wave Function

1-2- المقدمة

ان فشل الميكانيك الكلاسيكي في وصف مسار الجسيم الذري بسبب عدم الدقة في تحديد موقعه قد تم بحثه في الفصل السابق، وبناء على ذلك لابد من الإجابة عن التساؤل التالي: كيف يمكن وصف حركة الجسيم الذري؟ استنادا الى فرضية دي برولي وتفسير اينشتاين للظاهرة الكهروضوئية يمكن ان القول ان كل جسم متحرك يرافقه مجال مادي (matter field). فمثلا الالكترون في الذرة لا يتحرك بعيدا ولا يقترب الى مسافة قصيرة جدا من النواة أي انه مقيد في منطقة من فضاء الذرة صغيرة ، ابعادها تقدر بحدود (10^{-10} cm) اي (10 nm ، $1A^0$) لذلك فان المجال المادي المصاحب له يمكن ان يعبر عنه بدلالة موجة واقفة (standing wave) وهي (الموجة المقيدة في منطقة محدودة) كالموجة المتولدة في سلك مربوط الطرفين متمركز في هذه المنطقة بسعة متغيرة من منطقة الى اخرى وتكون صفر خارج هذه المنطقة. أن سعة هذا المجال المادي تعرف بدالة الموجة ويرمز لها بالرمز(ψ) .

2-2- دالة الموجة وتفسيرها (wave function and its interpretation)

دالة الموجة هي سعة المجال المادي المصاحب لجسيم متحرك ويرمز لها بالرمز (ψ). لدالة الموجة مكانة مهمة في ميكانيكا الكم بسبب مبدأ الادقة الذي يثبت عدم القدرة بنفس اللحظة تحديد موضع وسرعة ما بدقة، وكذلك اي متغير ديناميكي اخر لأي جسيم ذري. لذلك نحتاج الى اداة تحدد لنا تلك المتغيرات الديناميكية، وهذه الاداة هي دالة الموجة. بصورة عامة دالة الموجة تكون دالة معقدة (complex function) وهي دالة لكل من الموقع (x,y,z) والزمن (t) وتكتب بالصورة ($\psi(\vec{r},t)$) والتي تحوي على وصف كامل لتصرف الجسيم الذري. من المعروف أن شدة دالة الموجة تتناسب مع مربع السعة الخاصة بها. وبالتالي، فإن شدة المجال المادي هي:

$$\psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2$$

وتقوم هذه الدالة الموجية بتحديد احتمال وجود الجسيم في أي نقطة من الفضاء يمكن للجسيم التواجد بها، وذلك حسب اقتراح ماكس بورن 1926 (Max Born) والذي بين فيه أن مربع الدالة الموجية يحمل معنى فيزيائيا رائعا ألا وهو أن شدة مجال المادة تمثل عدد الجسيمات لكل وحدة طول عندما تصف دالة الموجة أكثر من جسيم واحد. ومع ذلك، عندما تصف دالة الموجة جسيمًا واحدًا فقط، فإن شدة مجال المادة تمثل كثافة الاحتمالية (probability density) وتعرف كثافة الاحتمالية على أنها احتمالية ايجاد الجسيم لكل وحدة طول عند نقطة (x) خلال الفترة Δx أي ان:

$$P_d = |\psi(x)|^2$$

وفي الابعاد الثلاثة تصبح:

$$P_d = |\psi(x, y, z)|^2$$

لذلك فان معرفة احتمالية تواجد جسيم في مكان ما من الفضاء حول النواة يمكننا من معرفة احتمالية تواجده في الأمكنة المختلفة المحيطة بالنواة من خلال العلاقة التالية:

$$P_V = \int_V |\psi(\vec{r})|^2\, dxdydz = \int_V |\psi(\vec{r})|^2\, d\tau \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

ويمكن ان كتابة المعادلة الاخير بالصورة الاتية:

$$P_V = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r}, \mathrm{t})|^2\, d\tau = \int \psi^*(r,t)\psi(r,t)\, d\tau \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

حيث (P_V): احتمال تواجد الجسيم بالحجم $d\tau$ ويأخذ دوما قيماً حقيقية.

أما احتمالية تواجد الجسيم في الفضاء كله فتتم بأجراء التكامل على العلاقة (2) على فضاء النظام كله والذي يمثل مجموع احتمالات تواجد الجسيم في كل عناصر الحجم المتراصة حول

بعضها البعض مكونة الفضاء الكلي للنظام. وهنا نحن متأكدون من تواجد الجسيم في هذا الفضاء وبالتالي فان احتمال تواجد الجسيم سيكون (100%) أي (1) اي ان :

$$P_t = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d\tau = \int \psi^*(r,t)\psi(r,t)\, d\tau = 1 \qquad ....(3)$$

ان دالة الموجة التي تحقق الشرط في العلاقة (3) هي دالة عيارية(normalized wave function)

وتسمى العلاقة الاخيرة بشرط المعايرة (normalization condition). اذا كانت دالة الموجة $\psi(\vec{r})$ غير معيرة، تضرب بثابت يدعى بثابت المعايرة لتصبح معيره.

يشترط بالدالة الموجية التي تحقق شرط المعايرة ما يلي:

1- أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة أي أن كل قيمة محددة للموضع يقابلها قيمة وحيدة للدالة الموجية فقط وليس أكثر، وهذا شرط أساسي لان الدالة أحادية القيمة تعطي احتمال واحد لتواجد الجسيم بينما المتعددة القيمة تعطي أكثر من احتمال لتواجد الجسيم وهذا مرفوض لان الجسيم لا يمكن أن يتواجد في أكثر من مكان في نفس اللحظة والعكس أيضا لا يمكن لجسيم أن يكون له دالتان مختلفتان في نفس المكان.

2- أن تكون الدالة الموجية مستمرة (continuous) وكذلك مشتقاتها، لأن الدالة غير المستمرة (تمتلك انقطاع في مكان ما) تجعل الجسيم غير معرف في منطقة الانقطاع.

3- يجب على الدالة أن تكون محدودة (finite) ولا يجوز ان تكون قيمتها مالانهاية لان احتمال تواجد الجسيم يصبح مالانهاية و هو غير مقبول فيزيائياً.

3-2- التمثيل الرياضي لدالة الموجة (Mathematical representation of (wave function

بما ان المجال المادي المصاحب لحركة الجسيم يمكن التعبير عنه بموجات واقفة فيمكن تمثيل دالة الموجة بالصيغة الرياضية التالية:

$$\psi(x,t)=\psi_{\circ}e^{i\left(\frac{2\pi}{\lambda}x-wt\right)}$$

$$\because k=\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\therefore \psi(x,t)=\psi_{\circ}e^{i(kx-wt)}$$

$$\because p=\hbar k \Rightarrow k=\frac{p}{\hbar}$$

$$\therefore \psi(x,t)=\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-wt)}$$

$$\because E=\hbar w \Rightarrow w=\frac{E}{\hbar}$$

$$\therefore \psi(x,t)=\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(4)$$

وفي الابعاد الثلاثة تصبح (In 3-D):

$$\therefore \psi(\vec{r},t)=\psi_{\circ}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r}-Et)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(5)$$

مثال / اذا كانت الاحتمالية $\psi_{(x)} = \dfrac{9}{4x^3}$ للفترة $1 \le x \le 3$ جد الاحتمالية في الفترة

$\frac{5}{2} \le x \le 3$ ؟

الحل:

$$p = \int |\psi(x)|^2 dx = \frac{9}{4}\int_{5/2}^{3} \frac{dx}{x^3} = -\frac{9}{8}(\frac{1}{9} - \frac{4}{25}) = 0.055 = 5.5\%$$

مثال/ اذا كانت لديك الدالة $f(x) = xe^{i\alpha x^2}$ والمؤثر $\hat{A} = -\dfrac{i}{2x}\dfrac{\partial}{\partial x}$ والدالة $g(x) = e^{i\alpha x^2}$ فما هي احتمالية الحصول على من هذه الدوال لهذا المؤثر ضمن النطاق $0 < x < 1$ ؟

الحل/

$$\hat{A} = -\frac{i}{2x}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$f(x) = xe^{i\alpha x^2}$$

$$\hat{A}f(x) = -\frac{i}{2x}\frac{\partial}{\partial x}\left(xe^{i\alpha x^2}\right)$$

$$\hat{A}f(x) = -\frac{i}{2x}\left(2i\alpha x^2 e^{i\alpha x^2} + e^{i\alpha x^2}\right)$$

$$\hat{A}f(x) = \alpha x e^{i\alpha x^2} - \frac{i}{2x} e^{i\alpha x^2}$$

$$\hat{A}f(x) = \left(\alpha x - \frac{i}{2x}\right) e^{i\alpha x^2}$$

$$g(x) = e^{i\alpha x^2}$$

$$\hat{A}g(x) = -\frac{i}{2x}\frac{\partial}{\partial x}\left(e^{i\alpha x^2}\right)$$

$$\hat{A}g(x) = -\frac{i}{2x} 2i\alpha x e^{i\alpha x^2}$$

$$\hat{A}g(x) = \alpha e^{i\alpha x^2}$$

$$P = \left|\int_0^1 g^*(x) f(x) dx\right|^2 = \left|\int_0^1 e^{-i\alpha x^2} x e^{i\alpha x^2} dx\right|^2$$

$$P = \left|\int_0^1 x dx\right|^2 = \left|\left.\frac{x^2}{2}\right|_0^1\right|^2 \Rightarrow P = \frac{1}{4} = 0.25 = 25\%$$

2-3-1-المعايرة Normalizing

$$\left.\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \\ &\int \psi^*(x)\psi(x)\, \mathrm{dx} = 1 \end{aligned}\right\} \qquad ....(6)$$

وتسمى هذه المعادلة بشرط المعايرة (normalizing condition) وتعني ببساطة ان الجسيم يكون موجود بالفعل في مكان ما ولحظة ما في الفضاء .تمثل العلاقة الاخيرة احد اهم

الشروط الهامة في ميكانيكا الكم ، وتستخدم كثيرا لحل المسائل الرياضية .يطلق على الدالة الموجية التي تحقق تلك العلاقة بالدالة الموجية المعايرة.

فمثلاً لو كان لدينا :

$$\Psi_{\boldsymbol{o}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{C}\Psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})$$

حيث c ثابت يتغير مع تغيير معايرة الدالة ولو طبقنا شرط المعايرة لحساب قيمة الثابت :

$$\int \boldsymbol{C}\,\Psi^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})\boldsymbol{C}\Psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t}) = \mathbf{1} \int \Psi^*(\mathbf{x},\mathbf{t})\Psi(\mathbf{x},\mathbf{t})\mathbf{dx} = \mathbf{1} \rightarrow \mathbf{C^2N} = \mathbf{1} \rightarrow \mathbf{C} = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{N}}}$$

$$\Psi_{\boldsymbol{o}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t}) = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{N}}}\Psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})$$

<u>مثال</u>: دالة الموجة لجسيم محدد بالفترة $0 \le \mathrm{x} \le 0.3$ هي $\psi(x) = Ae^{3ix}$ جد ثابت العيارية A ؟

الحل/

$\int \psi^*(x)\psi(x)\,\mathrm{dx} = 1$ ....شرط الدالة العيارية

$$\int_0^{0.3} A^* e^{-3ix} A e^{3ix} dx = 1$$

$$\left|A^2\right| \int_0^{0.3} dx = 1$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{0.3}}$$

مثال/ جسيم داخل بئر جهد لانهائي عرضه a له الدالة التالية المستقلة عن الزمن وغير معيرة:

$$\boldsymbol{\psi\,(x) = A\,sin\,\frac{n\pi}{a}x}$$

أوجد ثابت المعايرة A.علما أن **:**

$$\sin^2\theta = \frac{1-\cos 2\theta}{2}$$
$$\cos^2\theta = \frac{1+\cos 2\theta}{2}$$

الحل /

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

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

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

$$A^2\cdot\frac{a}{2} - 0 = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{a} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

مثال/ وضح ان دالة الموجة التي تصف جسيم يتحرك في صندوق جهد هي دالة عيارية؟ علماً ان

$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ والفترة هي $0 \le x \le a$

الحل/

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

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

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

$$\sin^2\theta = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta)$$

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

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

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

$$= \frac{1}{a}[a - 0] = 1$$

$$\therefore \int_0^a \psi_n^* \psi_n dx = 1$$

مثال / جسم محدد بالفضاء(-∞ < x < ∞) وموصوف بدالة الموجة

$$\psi(x,t) = Ae^{-x^2}\ e^{i(kx-\omega t)}$$

1- ثابت المعايرة(A)

2-الاحتمالية الكلية لإيجاد جسيم في أي موضع بين (-∞,∞) إذا علمت أن :

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

الحل:

(1)

$$\psi(x,t) = Ae^{-x^2} e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| Ae^{-x^2} e^{i(kx-\omega t)} \right|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| e^{-x^2} \left[e^{i(kx-\omega t)} \right] \right|^2 dx = 1$$

$$2A^2 \int_0^{+\infty} e^{-2x^2} \left| \left[e^{i(kx-\omega t)} \right] \right|^2 dx = 1$$

$$2A^2 \int_0^{+\infty} e^{-2x^2} \left| \left[e^{-i(kx-\omega t)} e^{i(kx-\omega t)} \right] \right| dx = 1$$

$$2A^2 \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right) = 1 \Rightarrow A^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Rightarrow A = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

ثانيا :احتمال تواجد الجسيم في الفاصل (x , x+dx)

(2)

$$dp = |\psi(\mathrm{r},t)|^2 dv = \psi^*(\mathrm{r},t)\psi(\mathrm{r},t)dv$$

$$dp = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left|e^{-x^2}e^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}\right|^2 dx$$

$$dp = \sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-2x^2}dx$$

ثالثا :الاحتمالية الكلية :

(3)

$$p = \int_{-\infty}^{+\infty}\left|Ae^{-x^2}e^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}\right|^2 dx$$

$$p = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|e^{-x^2}\left[e^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}\right]\right|^2 dx$$

$$p = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{0}^{+\infty}e^{-2x^2}\left|\left[e^{i(kx-\omega t)}\right]\right|^2 dx$$

$$p = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{0}^{+\infty}e^{-2x^2}\left|\left[e^{-i(kx-\omega t)}e^{i(kx-\omega t)}\right]\right|dx$$

$$p = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)$$

$$\Rightarrow \mathrm{p} = 1$$

H.W/ جسيم موجود في المجال($a \le x \le a$ -) أوجد ثابت المعايرة لدالته الموجية التالية:

$$\psi_{(X)} = A\cos\frac{\pi}{2a}x$$

مثال / اذا كانت الدالة الموجية التي تصف جسيم في صندوق (في حالة البعد الواحد) عند الزمن يساوي صفر هي :

$$\psi(x,0)=\frac{3\Phi_2+4\Phi_9}{\sqrt{25}}$$

بين هل الدالة عيارية ؟

الحل/

$$\int\psi^*\psi dx=\int(\frac{3\Phi_2+4\Phi_9}{\sqrt{25}})(\frac{3\Phi_2+4\Phi_9}{\sqrt{25}})dx$$

$$\int\psi^*\psi dx=\int\left[\frac{3\Phi_2\times3\Phi_2}{25}+\frac{3\Phi_2\times4\Phi_9}{25}+\frac{4\Phi_9\times3\Phi_2}{25}+\frac{4\Phi_9\times4\Phi_9}{25}\right]dx$$

$$\int\psi^*\psi dx=\int\left[\frac{9\Phi_2\Phi_2}{25}+\frac{12\Phi_2\Phi_9}{25}+\frac{12\Phi_9\Phi_2}{25}+\frac{16\Phi_9\Phi_9}{25}\right]dx$$

$$\int\psi^*\psi dx=\frac{9}{25}+0+0+\frac{16}{25}$$

$$\int\psi^*\psi dx=\frac{25}{25}=1$$

2-3-2-التعامد Orthogonal

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_n^*\Psi_m\,dx=0$$

حيث ان $\Psi_n^*\neq\Psi_m$

يمكن دمج شرط المعايرة وشرط التعامد في علاقة رياضية واحدة وكما يأتي :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n \Psi^*{}_m dv = \delta_{nm}$$

$n = m \Rightarrow \delta_{nm} = 1$ ➡ (Normalization condition) شرط المعايرة

$n \neq m \Rightarrow \delta_{nm} = 0$ ➡ (Orthogonality condition) شرط التعامد