الفصل السادس
خط التذبذب التوافقى
Linear Harmonic Oscillation

ففى الفصل الأخير: طاقة التردد لجزىء ثنائى الذرية قد فسر على أساس الشكل المبسط من دالة الجهد شكل (3) فى الفصل (5): حيث يعتبر التقريب البسيط لمنحنى مورس شكل (2) فى الفصل الخامس. للوصول لهذه النقطة وكل المشاكل التى قد تناولت بالشرح أخذت خطوة دالة الجهد البسيطة، حيث طاقة الوضع للنظام قد تعتبر ثابتة على المنطقة المعطاه للفراغ. وأفضل النماذج بالنسبة لطاقة التردد لجزىء ثنائى الذرية هو خط التذبذب التوافقى، من حيث أن طاقة الوضع تتغير بإستمرار بناءاً على تغير المسافة وأن هذا هو المطلوب فى هذا الفصل.

بعض من تلك المقدمة قد وردت أو قد أشير إليها فى الفصل الثانى وهو يهتم بالحركة التوافقية البسيطة للتذبذب،وحيث أنها قد نوقشت بناءاً على نقطة تقليدية الشكل. والحل الميكانيكى الكمى لمثل هذه النقطة وهى الحركة التذبذبية البسيطة التى سوف نتناولها بالشرح.

فنفترض جسيم لـه كتلة (m) يؤدى حركة توافقية بسيطة على طول المحور السينى (x). وتكون نقطة الوضع المتزن فى تلك الحالة تصبح عند (x) مساوية صفر. وعند هذه النقطة كما أشير سابقاً فى الفصل الثانى. أن القوة المخزونة (F) ستتناسب لمدى الإزاحة، ولكنها تؤثر فى الإتجاه الإنعكاسى وهكذا.

$$F = -kx \qquad -1$$

حيث (k) ثابت التناسب والذى يعرف بثابت القوة. وطاقة الوضع لأى جسيم سوف يعطى بالعلاقة :

$$\frac{dV}{dX} = -F \qquad -2$$

وهكذا

$$V = \int -F\,dx$$

بالإستبدال من المعادلة (1):

$$V = \int k\,x\,d\,x$$

بالإستبدال من المعادلة (1):

$$V = \int k\, x\, d\, x$$

or $$V = \frac{1}{2} k\, x^2 + \text{constant}$$

حيث ثابت التكامل سوف يعين وذلك بوضع طاقة الجهد بصفر. وبالنسبة للتذبذب المتوافق، فإنه من المناسب لأخذ طاقة الجهد بصفر عندما يكون التذبذب عند وضع الإتزان له، ولهذا فإن V=0 عند x=0. وهذا يؤدى إلى قيمة صفر لثابت التكامل وبالتالى يمكن إيجاد التذبذب بعد ذلك كما يلى :-

$$V = \frac{1}{2} k\, x^2 \qquad -3$$

والمعادلة (3) كما تراها مثل القطع المكافىء كما هو مبين بالشكل (1) وأنها ترينا أنه، عند أصغر قيمة لطاقة الوضع، وهذه الدالة تعتبر أفضل التقريبات لمنحنى مورس والذى يمكن أن نراه في شكل (1) للمقارنة:

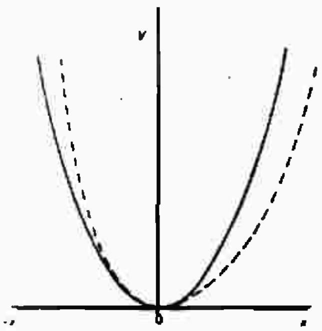

Fig. (1):Potential energy of a linear harmonic oscillator

وللتقريب لتلك المسألة وذلك من منظور نقطة ميكانيكا الكم فإن معادلة شرودنجر يمكن حلها. ويمكن أن نستدعى أن معادلة شرودنجر لأحادى الإحداثيات تأخذ ذلك الشكل:

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)\ \psi = 0 \qquad -4$$

وبالإستبدال للجهد (V) من المعادلة (3):

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E - \frac{1}{2} k\, x^2\right) \psi = 0 \qquad -5$$

حيث ثابت القوة (k) في المعادلة (5) يمكن أن يكتب فيما بعد من حيث أنه يمكن إشتقاقها من المعادلة (5)، والمعادلة (28) في الفصل الثانى على الحركة التوافقية البسيطة. وهذه المعادلة تعطى : -

$$W = 2\pi \gamma_e$$

and $\quad W = (k/m)^{1/2}$

حيث $\quad (k/m)^{1/2} = 2\pi \gamma_e$

or $\quad k = 4\pi^2 m \gamma_e^2 \qquad$ - 6

حيث (γ) والتردد للتذبذب للجسيم حول وضع الإتزان، وبالإستبدال في المعادلة (5):

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E - 2\pi^2 m \gamma_e^2 x^2\right)\psi = 0$$

or

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2} - \frac{16\pi^4 m^2\gamma^2 e\ x^2}{h^2}\right)\psi = 0 \qquad -7$$

وللتبسيط تضع

$$\frac{4\pi^2\gamma_e m}{h} = \alpha \qquad -8$$

عندما المعادلة (7) كذلك يمكن كتابتها كما يلى :

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2} - \alpha^2 x^2\right)\psi = 0 \qquad -9$$

هذه المعادلة ربما يكون الحل الأفضل بتغير المتغير من (x) وحتى متغير جديد آخر (q) حيث :

$$q = \sqrt{(\alpha)}\ x \qquad -10$$

فلو أن المتغير يتغير على هذا النمط، إذاً ففى الشق الأول للمعادلة (9)، فإن (ψ) يجب أن تفاضلها بالإحتفاظ لـ (q) مفضلاً ذلك عن الإحتفاظ بالقيم (x) وأن العلاقة بين d^2/dq^2 ، d^2/dx^2 يجب أن تعين (تبرهن). والآن :

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{dq} \cdot \frac{dq}{dx}$$

ومن المعادلة (10) وهى : -

$$\frac{dq}{dx} = \sqrt{(\alpha)}$$

حيث
$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{dq} \sqrt{(\alpha)} \qquad -11$$

ولكى نصل للتعبير بالنسبة d^2/dx^2، فإن المعادلة (11) يجب أن تتفاضل مرة ثانية بالإحتفاظ لـ (x).

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dq} \sqrt{(\alpha)}\right)$$

وبالإستبدال من المعادلة (11) وذلك للمقدار (d/dx)

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dq} \sqrt{(\alpha)} \left(\frac{d}{dq} \sqrt{(\alpha)}\right)$$

أو

$$\frac{d^2}{dx^2} = \alpha \frac{d^2}{dq^2}$$

بأخذ هذه العلاقة وكذلك من المعادلة (10) والمعادلة (9) يمكن كتابة المعادلة الآتية :-

$$\alpha = \frac{d^2\Psi}{dq^2} + \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2} - \alpha q^2\right)\psi = 0$$

أو بالقسمة من خلال (α)

$$\frac{d^2\Psi}{dq^2} + \left(\frac{8\pi^2 mE}{\alpha h^2} - q^2\right) \psi = 0 \qquad -11a$$

أو بالإستبدال للمقدار (α) من المعادلة (8) إلى الشق الأول في الأقواس في المعادلة (11a) حيث تعطى : -

$$\frac{d^2\Psi}{dq^2} + \left(\frac{2E}{h\gamma_e} - q^2\right)\psi = 0$$

والتى يمكن كتابتها كما يلى :-

$$\frac{d^2\Psi}{dq^2} + (\beta - q^2)\ \psi = 0 \qquad -12$$

حيث

$$\beta = \frac{2E}{h\gamma_e} \qquad -13$$

والأساس في هذه المسألة يمكن أن تختزل إلى أحد الحلول للمعادلة (12). حيث ربما بعد ذلك تعدل لتعطى الحل الصحيح.

الحل التقريبى : Approximate solution

عند قيمة عالية للمقدار (q) والتى تقابلها أعلى قيمة للحد x. كما في المعادلة (10) إذا $q^2 >> \beta$ كما أن المعادلة (12) يمكن أن تكتب كما يلى :-

$$\frac{d^2\Psi}{dq^2} - q^2 \psi = 0 \qquad - 14$$

علاوة على ذلك لو أن (q) كبيرة جداً، إذاً $q^2 \simeq (q^2 + 1)$، فإن المعادلة (14) تكتب على هذا الشكل :-

$$\frac{d^2\Psi}{dq^2} - (q^2 + 1) \quad \psi = 0 \qquad - 15$$

والخاصية لهذا التقريب وهو أن أى الحل للمعادلة (15)، يجب أن يكون حل مقرب للمعادلة (12) لأعلى قيمة (q) والمعادلة (15) بعد ذلك يكون حلها هو : -

$$\psi = K\, e^{1/2}\, q^2 \qquad - 16$$

أو

$$\psi = K\, e^{-1/2}\, q^2 \qquad - 17$$

حيث (K)- ثابت :

ففى المعادلة (16) يمكن أن نرى أن مثل $q \to \infty$ إذاً تكون $\psi \to \alpha$ ولهذا الحل ربما يكون غير مقبول مثل دالة الموجه التى تكون مطلوبة التحديد. والحل الوحيد والذى يكون له إعتبار وهو المعادلة (17). وهذه المعادلة عبارة عن حل تام للمعادلة (15) والشكل المأخوذ هو بواسطة المعادلة (12) عندما $q \to \infty$. وفيما بعد من الممكن أن نقول أن المعادلة (17) عبارة عن حل مقارب للمعادلة (12) عندما $q \to \alpha$.

الحال التام: (الصحيح) Exact solution:

مرة أخرى نعود ونقول أن المعادلة (17) يجب أن يتوافر فيها بعض الأمور، لو أن ذلك هو الحل للمعادلة (12). هذا التصرف لو أن قيمة $q \to \infty$. مثل هذا التكيف يمكن أن يؤخذ وذلك بمضاعفة الناتج بسلسلة أسية لبعض التصور. هذه الإفتراضات هى لو أن ثابت المعادلة (17) قد يستبدل بسلسلة أسية، والتكيف الضرورى سوف يتم شريطة أن هذه السلسلة الأسية للشكل الأيمن. وعليه فإن الحل للمعادلة (12) ربما إلى حد بعيد تأخذ الشكل الآتى : -

$$\psi = e^{-1/2\, q^2} \,.\, H_{(q)} \qquad -18$$

حيث أن $H_{(q)}$ سلسلة أسية لا نهائية وتعطى بواسطة الآتى : -

$$H_{(q)} = \Sigma A_m q^m = A_0 + A_1 q + A_2 q^2 + \ldots\ldots\ldots\ldots$$

هـــــذا النـــوع مـــن السلسلـــة الأسيـــــة يعــــــرف بمتعــدد الحـــدود لهيرمايـــت Hermite polynomial.

ولنرى لو المعادلة (18) تعتبر الحل للمعادلة (12) فإنها تستبدل في الجذر الثانى من المعادلة (12)، ثم بعد ذلك تفاضل مرتين، وربما تستبدل للجزء الأول للمعادلة (12). وعليه فالفرض الأول يمكن أن يعنى بالتفاضل وللبساطة فالإشتقاق الأول والثانى سوف نرمز له بالأولى (بالفردى) والمضاعف الأولى على التوالى. ولنا أن نتذكر أن الجانب الأيمن من المعادلة (18) عبارة عن حاصل ضرب والذى يجب تفاضله كما أن الإشتقاق الأول للدالة ψ، وأما ψ^* سوف تعطى بواسطة : -

$$\psi^* = e^{-1/2\, q^2} - H - q\, e^{-1/2\, q^2} \,.\, H \qquad -19$$

حيث أن متعدد الحدود سنشير إليه بالرمز (H). هذه المعادلة يجب تفاضلها مرة أخرى ولاحظ أن كلا الترمين للجزنية على الجانب الأيمن عبارة عن نواتج.

$$\psi`` = e^{-1/2\, q^2} \,.\, H`` - 2q\, e^{-1/2\, q^2} \,.\, H` + q^2 e^{-1/2\, q^2} \,.\, H - e^{-1/2\, q^2} \,.\, H$$

أو

$$\psi`` = e^{-1/2\, q^2} \left( H`` - 2q\, H` + q^2 H - H \right) \qquad -20$$

بالإستبدال لكل من المعادلة (20) ، المعادلة (18) للمعادلة (12)

$$e^{-1/2\, q^2} \left(H - 2q\, H` + q^2 H - H \right) + (\beta - q^2)\, e^{-1/2\, q^2} \,.\, H = 0$$

بالقسمة على جزئية الأس نجد أن : -

$$H`` - 2q\, H` + q^2 H - H + \beta - q^2 H = 0$$

أو

$$H`` - 2q\, H` + (\beta - 1)\, H = 0 \qquad -21$$

إذاً المعادلـة (18) عبـارة عـن الحـل لدالـة الموجيـة بشـرط أن تكـون المعادلـة (21) صحيحة. والباقى لفحص الظروف وذلك للمعادلة (21) والتى بها تكون صحيحة وفعالة. فلو أن :-

$$H = \Sigma A_m q^m \qquad -22$$

إذاً

$$H' = \Sigma m A_m q^{m-1} \qquad -23$$

وكذلك

$$H'' = \Sigma m (m-1) A_m q^{m-2} \qquad -24$$

بالإستبدال في المعادلة (21) نحصل على :

$$\Sigma m (m-1) A_m q^{m-2} - 2 \Sigma m A_m q^m + (\beta - 1) \Sigma A_m q^m = 0 \qquad -25$$

ومن شكل المعادلـة (25) نجد أنها حقيقيـة لأى قيمـة للحد (q)، والتـى تعنـى عبـارة عن مجموع معاملات لأى أس محدد للرمز (q) ويجب أن يكون بصفر. وفى كل الثلاث مجاميع على الجانب الأيسر من المعادلة (25) الأس المحدد لـ (q) سوف يظهر (q^u) فرضاً. والمعامل للحد (q) في الشق الأول من المعادلة (25) يمكن إيجاده وذلك بوضع $m=\gamma+2$ والمعامل q^γ للشقين الآخرين يمكن أيضاً إيجاده بوضع $m=\gamma$. بتمثيل هذا العمل، ثم بوضع المجموع للثلاث معاملات هذه ومساواتها بصفر سوف نحصل على :-

$$(\gamma + 2)(\gamma + 1) A_{(\gamma+2)} - 2\gamma A_\gamma + (\beta - 1) A_\gamma = 0$$

أو

$$(\gamma + 2)(\gamma + 1) A_{(\gamma+2)} = (2\gamma + 1 - \beta A_\gamma \qquad -26$$

هذه المعادلـة (26) عبـارة عن صيغة وضـعية والتـى تمكن حسـاب $A_{(\nu+2)}$ فـي الشق الأول (A_ν). إذاً مـع بدايـة (A_0) ، المعـاملات A_2, A_4, A_6 يمكـن حسـابهم وبـدءاً مـن A_1، فالمعـاملات A_3, A_5, A_7 .... يمكن حسابهم في هذا الطريق يمكن تولد سلسلة أسية لإثنين والتى تكون الحل للحد $H_{(q)}$ في المعادلة (18).

$$H_q = A_0 + A_2 q^2 + A_4 q^4 + ... \qquad -27$$

and

$$H_q = A_1 q + A_3 q^3 + A_5 q^5 + ... \qquad -28$$

فلو أن تلك المعادلتين وهما (27) , (28) عبـارة عن سلسلة لا نهائيـة. هذا التفسير غير مقبول الحل كما هو مطلوب لدالة الموجه بأن تكون نهائية (محددة). والسلسلة يجب إذا محددة في بعض الطرق.

or $$H(q) = A_1 q + A_3 q^3 + A_5 q^5 + \ldots\ldots A_\gamma q^\gamma$$

مثل هذه الصورة التى هى متعددة الحدود تعرف متعددة الحدود لهيرمايت لدرجة (v). ولاحظ أن (v) يجب أن تكون عدد صحيح كما أنـه فقط أن يكون عدد صحيح للأجزاء في السلسلة.

إعتبر المعادلة (18) وربما يحدث تقارب كلما (q) تصبح كبيرة، فإن جزئ الأسس يصبح صغير، وبالتالى يصبح متعدد الحدود لهيرمايت كبير. لأن متعدد الحدود لهيرمايت يعتبر محدد لواحد درجة (v)، وعلى أى حال فإن قوة جزئية الأسس تعتبر أقوى من جزئية متعدد الحدود، وبالموازنة (ψ) تتلاشى للصفر مثلما (q) تقترب للانهاية. فعندما يكون متعدد الحدود محدد لدرجة v فلهذا تعتبر المعادلة (18) مقبولة الحل لمعادلة شرودنجر. ومتعدد الحدود لهيرمايت لدرجة (v) والتى تعتبر ممثلة مثل $H_v(q)$، ولهذا فإن الحل لمعادلة شرودنجر يمكن كتابتها كما يلى : -

$$\psi_v = H_v(q) \cdot e^{-\frac{1}{2} q^2} \qquad -29$$

وعندما نعادل دوال إيجن (الذاتية) eigenfunctions سوف نعطى بالعلاقة :-

$$\psi_v = \left[\frac{\sqrt{(\alpha / \pi)}}{2^v . v!} \right]^{\frac{1}{2}} H_v(q) \cdot e^{-\frac{1}{2} q^2} \qquad -30$$

ولقد أشرنا سابقاً أن متعدد الحدود سيكون محدود لدرجة (v) عندما: -

$$(2v + 1 - \beta) = 0$$

وعندما

$$2v + 1 = \beta \qquad -31$$

بالإستبدال (β) من المعادلة (13)

$$2v + 1 = \frac{2E}{hv_e}$$

والتى يمكن تعديلها إلى الشكل

$$E_v = (v + \frac{1}{2}) hv_e \qquad -32$$

ومثلما (v) تكون درجة لمتعدد الحدود، فإننا نملك فقط قيم لأعداد صحيحة وبالطبع، القيمة بصفر. والمعادلة (32) على أى حال ترينا أن طاقة النظام تكون مكمه بالوحدة للحد $(h\gamma e)$ ، (v) تعرف بعدد الكم الترددى والتى تعطى بالآتى :-

$$v = 0, 1, 3, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

ومثلما (v) تكون درجة لمتعدد الحدود، فإننا نملك فقط قيم لأعداد صحيحة وبالطبع، القيمة بصفر. والمعادلة (32) على أى حال ترينا أن طاقة النظام تكون مكمه بالوحدة للحد (hγe) ، (v) تعرف بعدد الكم الترددى والتى تعطى بالآتى :-

$$v = 0, 1, 3, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

ومن الملاحظ أن طاقة النظام لا يمكن أن تكون بصفر على الإطلاق. وأقل قيمة للطاقة والتى يقابلها الحالة γ=0 ستعطى بالعلاقة (32) مثل :-

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu_e$$

حيث تكون الطاقة بصفر للنظام. وكما لاحظنا سابقاً في الفصل (3) أن كل تردد الأنظمة يجب أن يكون نقطة الصفر للطاقة، عندما يكون الجسيم في أحد المحاور للصندوق المدروس مثل المثال البسيط للنظام المتردد.

ويمكن توضيح طاقة المستويات في الشكل (2) للتردد التوافقى الخطى مع إحتمالية التوزيع لثلاث مستويات حيث قد يستخدم مستويات مختلفة للطاقة كالمحور السينى لتلك الدوال. ومن الواجب أن نلاحظ أن لأقل مستوى طاقة بمعنى (v=0) حيث يوجد أعلى إحتمالية للتردد واضحة عند موضع الإتزان. في هذا التحديد فإن ناتج ميكانيكا الكم يكون مختلف تماماً عن النتيجة التقليدية. ومع الحركة التوافقية البسيطة لكتلة متصلة بسلك زنبركى. كمثال فإن الكتلة يجب أن تكون مستقرة عند إما نهاية المطاف. بينما هى تتحرك مع أقصى سرعة خلال موضع الإتزان. من هنا، حيث الجسيم يمكث أكبر زمن عند نهاية الطرف، وأقل زمن ممكن خلال موضع الإتزان، إختبارات أخرى للشكل (2) حيث نرى أن فمثلما يزداد عدد الكم. فإن إحتمالية وجود التردد التوافقى الخطى يصبح أكبر تجاه نهايات ترحاله. وهذا يكون التوضيح ليقابل الأساس بواسطة ناتج ميكانيكا الكم الذى يصبح مشابه مع الناتج التقليدى في النهاية.

ولنا أن نعود عندما نمثل الحركة الإنتقالية للجزىء من طاقة أقل إلى طاقة أعلى للحالة الإلكترونية على الشكل التخطيطى لطاقة الوضع، فالإنتقال سوف يرسم كخط من نقطة الوسط لأقل مستوى إهتزازى في أقل حالة إلكترونية. هذا لأن الحل لميكانيكا الكم السابق يرى بإعتبار أنه أقصى موضع محتمل للإهتزاز في هذه الحالة.

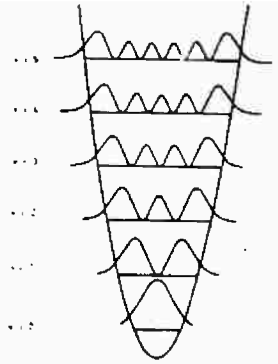

Fig. (2): Energy levels of a linear harmonic oscillator

أحد المحاور البسيطة للصندوق الذى اتخذ في الفصل الثالث والذى يمكن أخذه كتقريب جيد لأقل جزء لمنحنى مورس. شكل (2) في الفصل الثالث يرينا أن مستويات الطاقة للصندوق البسيط يصبح أكثر بعداً أو منعزلاً مع زيادة الطاقة، تقريب آخر لمنحنى مورس يعين بواسطة دالة الجهد مثلما هو مفسر في شكل (3) الفصل الخامس، مرة أخرى كما هو في شكل (5) من نفس الفصل، وهو أن مستويات الطاقة للنظام تصبح أكثر بعداً مع زيادة الطاقة. وكما نرى من شكل (1) أن تردد التوافق الخطى يعتبر أكثر تقريباً لأقل جزء في منحنى مورس، ومن المهم أن نلاحظ أن مستويات الطاقة للتردد غالباً ما تكون مفرغة عند الإرتحال للمقدار ($h\nu_e$) مهملاً الطاقة الكلية. يحدث هذا لأن طاقة الجهد المتردد التوافقى ليست ثابتة (كما في النموذج البسيط)، ولكن تتغير بإستمرار ومتماثلة مع المحور السينى.

بالنسبة للجزئ ثنائى الذرية التردد ليست توافقية كما هو منظور من الحقيقة وهى أن منحنى مورس ليس متماثل (شكل 1). وهذا يقودنا إلى أن مستويات التردد في الجزىء الحقيقى يصبح أكثر تقارباً مع زيادة الطاقة حتى يندمج كسلسلة متصلة عندما يتفكك الجزىء. وبالنسبة لمستويات الطاقة للتردد الغير متآلف، المعادلة (22) يمكن أن تتلائم بإضافة جزئية أخرى لتعطى :-

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\, h\nu_e - (v + \frac{1}{2})^2\, h\nu_e x_e \qquad -33$$

حيث x_e ثابت يعرف بالثابت غير متآلف.