جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية: علوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة
قسم: علوم المادة

مذكرة ماستر

ميدان: علوم المادة
فرع: الفيزياء
تخصص: فيزياء المادة المكثفة

رقم: أدخل رقم تسلسل المذكرة

إعداد الطالب:
حمير منال طجين الزهرة

يوم: 27/06/2022

طريقة شبه عكسية التغاير في معالجة نماذج تفاضلية

لجنة المناقشة:

نجوى بن صالح	MCB	جامعة بسكرة	رئيسا
وناسة حايف خايف	MCB	جامعة بسكرة	مقررا
مختار فالق	Prof	جامعة بسكرة	ممتحنا

السنة الجامعية : 2022/2021

الإهداء

اهدي ثمرة جهدي لمن ألبسني ثوب العلم ببركة أنفاسه أبي الغالي "حسين "

إلى من خضت دروب العلم بفيض تراتيل دعائها أمي " نزيهة " حفظها الله.

إلى عنوان الإيخاء وجذور المحبة إخوتي : " مراد, راضية , صورية, رمزي , هناء "

إلى توأم روحي التي شاركتني أجمل لحظات عمري في مشواري الجامعي "حفيظة "

إلى رفيقات عمري : " خلود, شهرة, فاطمة الزهراء, دنيا, هنادي, سهيلة "

إلى زميلتي ورفيقتي في هذا العمل " زهرة "

لكل عائلتي وأقاربي الذين لم اذكرهم لأن مكانتهم تتعدى حدود هذه الورقة.

منال حمير

الإهداء

الحمد لله و كفى و الصلاة على الحبيب المصطفى و أهله و من وفى أما بعد:

الحمد لله الذي وفقنا لتثمين هذه الخطوة في مسيرتنا الدراسية بمذكرتنا هذه

ثمرة الجهد و النجاح بفضله تعالى مهداة إلى الوالدين الكريمين حفظهما الله

و أدامهما نور الدرب

لكل العائلة الكريمة التي ساندتني ولا تزال :من إخوة و أخوات

إلى رفيقات المشوار اللاتي قاسمن معي اللحظات رعاهم الله و وفقهن

إلى زميلتي ورفيقتي في هذا العمل **"منال"**

إلى كل قسم علوم المادة و جميع دفعة 2022م

جامعة محمد خيضر ،بسكرة

إلى كل من كان لهم أثر على حياتي

و إلى كل من أحبهم قلبي و نسيهم قلمي.

الزهرة طجين

الشكر

الحمد لله الذي خصنا برعايته وحفظه وستره وأمدنا بعونه ووفقنا لإتمام هذا العمل فما كان لشيء أن يجري في ملكه إلا بمشيئته جل شانه وعظم قدره والصلاة والسلام على طه الصادق الأمين .

نتقدم بأسمى عبارات الشكر ونتوجه بعظيم الامتنان لكل من:

الأستاذة المؤطرة " **حايف خايف وناسة** " لتفضلها الكريم بالإشراف على هذه العمل وتكرمها بالنصح والإرشاد والتوجيه لإتمامه.

وأعضاء لجنة المناقشة الكرام لقبولهم مناقشة هذه المذكرة وإفادتنا بتصحيحاتهم وإثرائنا بتوجيهاتهم القيمة.

وإلى كل زميلاتي وزملائي في هذه الدفعة.

والى كل أساتذة قسم علوم المادة بالخصوص أساتذة الفيزياء الأستاذ فالق و الأستاذة سعيدي حنان على تزويدهم لنا بالمعلومات القيمة التي تخص هذا العمل.

الفهرس

المقدمة العامة

تمثل الفيزياء الكمومية (الكم) إحدى الدعائم الرئيسية التي تقوم عليها الفيزياء الحديثة، فهي تتبنى أفكار ومفاهيم متقدمة، يمكن على أساسها تفسير مختلف الظواهر الفيزيائية المجهرية بدقة [1].

يمكن تعريف ميكانيكا الكم على أنها مجموعة من النظريات الفيزيائية المرتبطة ببعضها البعض ظهرت في القرن العشرين، لتفسير الظواهر على مستوى الذرة و الجسيمات دون الذرية وقد دمجت بين الخاصية الجسيمية والخاصية الموجية ليظهر مصطلح الازدواجية الموجة- جسيم عن طريق دي بروغلي الذي افترض انه إذا كان يمكن للموجة أن تكون جسيما إذن يمكن أن يكون الجسيم أيضا موجة، ويمكن فهم خصائص هذه الموجة باستخدام معادلة تفاضلية غير نسبية اقترحها العالم النمساوي ارفين شرودينجر *Erwin shrodinger* تسمى معادلة شروذينجر وهي معادلة تفاضلية جزئية تصف دالة موجة الجسيم الكمي في نظام ذري، حيث في الحالة العادية تطبق معادلة شرودينجر المستقرة (المستقلة عن الزمن) على الانظمة الذرية البسيطة.

وقد استخدم شرودينجر النظرية المتغيرة كأداة تقريب في بداية تأسيس نظرية الكم بهدف تقديم مساهمات ممكنة في البحث عن حلول تقريبية للتغير لمعادلة شرودينجر. ومن هنا تم ظهور طريقة حساب المتغيرات لان معظم المشكلات في الفيزياء لا يمكن حلها تماما, وبالتالي تحتاج إلى معالجتها تقريبيا. ومن الطرق الشائعة الاستخدام نجد طريقة التغاير ومن ثم تم استنتاج معادلات اولر لاغرانج التي تحل العديد من مشاكل حساب المتغيرات [3،2].

تعتبر معادلة شرودينجر معادلة معقدة للغاية بحيث لا يمكن إيجاد الحلول الحقيقية لها الا في حالات قليلة وخاصة لذا يمكننا استخدام طرق تقريب تتيح لنا الحصول على حلول تقريبية قريبة إلى حد ما من الحلول الحقيقية وفقا لجودة التقديرات و الحسابات، وقد ظهرت العديد من الطرق التقريبية في السنوات الأخيرة لحساب طيف الطاقة لمعادلة شرودينجر من بينها الطريقة الشبه عكسية التغاير.

لذا يمكننا القول أن الهدف الرئيسي من هذا العمل هو حل معادلة شرودينجر من خلال تطبيق طريقة شبه عكسية التغاير باستخدام الجهد الجديد متعدد الثوابت لتحديد القيم الذاتية و الأشعة الذاتية.

قمنا بتقسيم عملنا هذا إلى ثلاثة فصول مرتبة على النحو التالي:

في الفصل الأول: سنقوم بضبط بعض المفاهيم الأساسية لمعادلة شرودينجر غير المعتمدة على الزمن وحلها بالنسبة لكل من الإحداثيات الكارتيزية والكروية .

في الفصل الثاني: سنناقش موضوع حساب المتغيرات من خلال استنتاج معادلة اولر لاغرانج التي تحل العديد من مشاكل حساب التغاير، كما سنتطرق لمشكلة المسار الأسرع بين نقطتين (مشكلة الزمن الأقصر) التي أدت إلى ظهور حساب التغايرات ثم نتعرف على مبدأ فيرما وعلى مفهوم الجيوديسية.

الفصل الثالث: يتضمن هذا الفصل موضوع عملنا الرئيسي حيث عرفنا خطوات طريقة شبه عكسية التغاير وقمنا بتطبيقها على حالة معينة من الكمون الجديد.

الفصل الأول

عموميات حول معادلة شرودينجر

1.I مقدمة

إن فيزياء الميكانيك الكلاسيكي التي تقتصر على دراسة النظم الجهرية لم تكن كافية لدراسة الظواهر الذرية لذا تم خلق إطار مفاهيمي جديد للفيزياء، تسمى هذه النظرية الجديدة بميكانيك الكم وظهرت في القرن العشرين لتفسير الظواهر على مستوى الذرة و الجسيمات دون الذرة حيث يتم تحديد حالة النظام الفيزيائي المدروس من خلال معرفة المتغيرات الديناميكية بواسطة الحلول الدقيقة لمعادلات تسمى بدوال الموجة التي تحتوي على جميع المعلومات حول حالة النظام و يتبع سلوكها معادلة تفاضلية غير نسبية اقترحها العالم النمساوي ارفين شرودينجر هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية حيث تعتبر من أهم المعادلات في ميكانيك الكم وقد اعتمدت على دراسة النظام المجهري، ومن ذلك يمكن معرفة و تحديد خصائص الأنظمة الفيزيائية [4 – 8].

في هذا الفصل سوف نتطرق لتعريف معادلة شرودينجر المفاهيم المتعلقة بها و كذلك حلها بالنسبة للإحداثيات الكارتيزية و بالنسبة للإحداثيات الكروية .

2.I معادلة شرودينجر في ميكانيك الكم

1.2.I تعريف:

في ميكانيك الكم معادلة شرودينجر هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية صاغها العالم الفيزيائي النمساوي ارفين شرودينجر1925حيث تصف هذه المعادلة كيفية تغير الحالة الكمية لنظام فيزيائي مع الزمن، كما تصف هذه المعادلة حالات النظم الكمية المعتمدة على الزمن حيث تعتبر بمثابة قانون التحريك الثاني لنيوتن الذي يعتبر أساسي في الفيزياء الكلاسيكية أو معادلات ماكسويل في الكهرومغناطيسية[9].
اعتمادا على التعبير الرياضي لميكانيك الكم نجد كل جملة فيزيائية تترافق مع فضاء هلبرت المركب الذي هو عبارة عن فضاء شعاعي حيث توصف كل حالة لحظية للجملة بشعاع وحدة في هذا الفضاء الشعاعي، و بالتالي يصبح شعاع الحالة بمثابة ترميز لاحتمالات النتائج الممكنة من عمليات القياس بكل أشكالها على هذه الجملة ،و عندما تتغير هذه الجملة مع الزمن يصبح شعاع الحالة دالة زمنية .

استنادا على خصائص معادلة شرودينجر فنجدها مقسمة الى قسمين جزء منها متعلق بالزمن و الجزء الآخر مستقل عن الزمن أو ما يسمى بمعادلة شرودينجر المستقرة، و هو موضوع دراستنا حيث تسمح هذه المعادلة المستقلة عن الزمن بإيجاد الحالات المحتملة و ذلك عن طريق الدالة الموجية التي

تحتوي على كافة المعلومات حول جسيمات النظام وهي حالة خاصة للمعادلة العامة التي تعتمد على الزمن حيث تعطي تطور دالة الموجة مهما كانت حالة النظام [10،11]. و تكتب من الشكل الآتي:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{1.1}$$

ψ: تمثل دالة الموجة للجسيم الكمي التي يتم من خلالها وصف الحالة الزمانية و المكانية له .

وتعطى في الإحداثيات الكارتيزية ب: $\Psi(\vec{r}) = \Psi(x, y, z)$

يمثل الطاقة الكلية للنظام المدروس و المعرف في الفيزياء الكمية بالمؤثر الهاملتوني ويكتب من الشكل: H

$$H = T + V(r) \tag{1.2}$$

حيث تخضع معادلة شرودينجر فقط للكمون (V) والموضع (r) وهي معادلة شرودينجر المستقرة وأغلب الكمونات التي يتم استعمالها هي كمونات مركزية تعرف بدالة متغيرالمسافة بين الجسم و نقطة المرجع حيث :

$$V(r^{\rightarrow}) = V(r)$$

2.2.I معادلة شرودينجر في ثلاث أبعاد بدلالة الإحداثيات الكارتيزية:

عندما يكون لدينا جسيم يتحرك في ثلاث أبعاد نستطيع تحديد طاقة النظام الفيزيائي بواسطة المؤثراالهاملتوني وفي حالة وجود كمون فتصبح معادلة الهاملتون كالتالي :

$$H = T + V(r) \tag{1.3}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \tag{1.4}$$

حيث: $T = \frac{p^2}{2m}$

ومنه نكتب H بدلالة مركبات الدفع الخطي كالتالي:

$$H = \frac{p^2{}_x}{2m} + \frac{p^2{}_y}{2m} + \frac{p^2{}_z}{2m} + V(r) \qquad (1.5)$$

حيث يمثل الحد الأول في العبارة مؤثر الطاقة الحركية و الحد الثاني يمثل مؤثر الطاقة الكامنة كما نجد كل من مؤثر الموضع و الدفع الخطي في ثلاث أبعاد كالتالي :

$$\vec{r} = x\,\overrightarrow{e_x} + y\,\overrightarrow{e_y} + z\,\overrightarrow{e_z} \qquad (1.6)$$

$$\vec{P} = p_x\overrightarrow{e_x} + p_y\overrightarrow{e_y} + p_z\overrightarrow{e_z} \qquad (1.7)$$

بعد التعريف يمكن كتابة مؤثر الطاقة (الهاملتون) لجسيم كتلته m يتحرك تحت تأثير الطاقة الكامنة المركزية الاختيارية و الطاقة الحركية T على الشكل الآتي:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \qquad (1.8)$$

بالتعويض في المعادلة (1.1) نجد:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\,\Delta\, + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (1.9)$$

في الإحداثيات الكارتيزية يكتب∇^2 كالآتي حيث أن:

$$\Delta = \nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad (1.10)$$

تهتم ميكانيك الكم في أغلب الأحيان بدراسة الحالات التي يكون فيها الكمون الذي يخضع له النظام غير متعلق بالزمن و في دراستنا هذه نبحث عن القيم الذاتية لمؤثر الطاقة غير المتعلق بالزمن أيضا و هي تمثل الطاقات الخاصة للجملة الفزيائية [12].

حيث أن معادلة شرودينجر المستقلة عن بالزمن في الإحداثيات الكارتيزية التي تصف حالة الجسيم غيرالنسبي بدالة موجية تحقق معادلة شرودينجركالآتي:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \qquad (1.11)$$

وتكون طاقة الجسيم محددة تماما وتساوي E, و دالة الموجة تحقق معادلة شرودينجر غير المتعلقة بالزمن (1.9).

حيث علاقة التنظيم لدالة الموجة في ثلاث أبعاد هي:

$$\iiint dr^3 |\psi(\vec{r})|^2 = 1 \qquad (1.12)$$

إذن دالة الموجة منظمة و تشكل أساسا متجانسا و متعامدا بالإضافة إلى أن الطاقة الكامنة تتعلق بالموضع $\vec{}$.

3.2.I معادلة شرودينجر في الإحداثيات الكروية:

عند دراسة أي نظام كمي في فيزياء الكم غير النسبي يمكن تحويل دراسته من الإحداثيات الكارتيزية إلى الإحداثيات الكروية و ذلك لتسهيل عملية الدراسة حيث نستعمل طريقة فصل المتغيرات في ذلك.

في ميكانيك الكم يستوجب تحديد دالة الموجة لأي جسيم أو نظام يتميز بطاقة حركية و كتلة و نظرا لكمون معادلة شرودينجر يعتمد فقط على المسافة يمكن تحويل دراسته إلى الإحداثيات الكروية أي في حقل مماثل كروي و ذلك اعتمادا على حل معادلة شرودينجر باستعمال فصل المتغيرات حيث تعبر حلول هذه المعادلة فيزيائيا على قيم معينة للطاقة أو نستطيع القول بأنها تدل الحلول على القيم المسموح بها للطاقة و التي تسمى : "القيم الذاتية" أما حلول دالة الموجة التي توافقها تسمى "الدوال الذاتية" أو"الخصائص"[13]. و منه يجب علينا حل معادلة شرودينجر التالية:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

مع التبسيط نجد:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E + V(r)]\psi = 0 \qquad (1.13)$$

حيث **"الابلاسيان "** دالة الموجة عبارته كالتالي:

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \qquad (1.14)$$

حيث يأخذ "**الابلاسيان**" الشكل الآتي:

$$\Delta = \frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\left(\mathrm{r}^2\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\right) + \frac{1}{\mathrm{r}^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\mathrm{r}^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad (1.15)$$

نعوض(1.15) في المعادلة (1.14) بحيث نتحصل على معادلة شرودينجر في الإحداثيات الكروية:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\mathrm{r}^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\mathrm{r}^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (1.16)$$

باستعمال طريقة فصل المتغيرات تكتب دالة الموجة على الشكل:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$$

ومنه تكتب على الشكل:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{Y(\theta,\varphi)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) + R(r)\frac{1}{r^2 sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)\right\} - [E - V(r)]R(r)Y(\theta,\varphi) = 0 \qquad (1.17)$$

بالقسمة على $R(r)\ Y(\theta,\varphi)$ والضرب في r^2 نتحصل على:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}R(r)\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = -\frac{1}{Y(\theta,\varphi)sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi) \qquad (1.18)$$

الطرف الأيسر يعتمد على r والطرف الأيمن يعتمد على φ و θ ومنه نستطيع أن نعرف الطرفين بثابت عبارته كالتالي:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\ R(r)\right)\ +\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]\,R(r)=\lambda^2R(r) \qquad (1.19)$$

و

$$-\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=\lambda^2\,Y(\theta,\varphi) \qquad (1.20)$$

λ^2: ثابت التفرقة معرف كالتالي: $l(l+1)$

تسمى المعادلة الأولى بالمعادلة الشعاعية، و تسمى المعادلة الثانية بالمعادلة الزاوية، حيث نلاحظ حل المعادلة الشعاعية يعتمد على اختيار الكمون المركزي بينما المعادلة الزاوية هي معادلة عامة صالحة لجميع الكمونات المركزية.

يتم كتابة عبارة "الابلاسيان" في الإحداثيات الكروية على الشكل التالي:

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\mathrm{L}^2}{\hbar^2r^2} \qquad (1.21)$$

نعرف L^2 بالعبارة التالية:

$$L^2\ =\ -\hbar^2\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad (1.22)$$

L :العزم الحركي المداري.

بتعويض عبارة L^2 و تبسيط المعادلتين (1.19) و(1.20) نتحصل على :

$$[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\ (E-V(r))\right]-\frac{\lambda^2}{r^2}]R(r)=0 \qquad (1.23)$$

$$L^2Y(\theta,\varphi)\ =\lambda^2\hbar^2\ Y(\theta,\varphi) \qquad (1.24)$$

باستخدام طريقة فصل المتغيرات نقوم بحل المعادلة (1.24) و ذلك بوضع:

$$Y\,(\theta,\varphi)=T(\theta)F(\varphi) \tag{1.25}$$

بتعويض المعادلة (1.22) في المعادلة (1.24) نتحصل على:

$$F(\varphi)\left(\frac{\partial^2T(\theta)}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial T(\theta)}{\partial\theta}\right)+\frac{T(\theta)}{F(\theta)\sin^2\theta}\frac{\partial^2F(\varphi)}{\partial\varphi^2}+\lambda^2T(\theta)F(\varphi)=0 \tag{1.26}$$

بالقسمة على $T(\theta)F(\varphi)$ في والضرب $sin^2\theta$ نجد :

$$\frac{\sin^2\theta}{T(\theta)}\left(\frac{\partial^2T(\theta)}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial T(\theta)}{\partial\theta}\right)+\lambda^2\sin^2\theta=-\frac{\partial^2F(\varphi)}{\partial\varphi^2}\frac{1}{F(\varphi)} \tag{1.27}$$

يعتمد الطرف الأيسر علىθ، بينما يعتمد الطرف الأيمن على φ.

و منه نستطيع أن نعرف الطرفان بثابت يدعى ثابت التفرقة يرمز له ب: m^2.

$$\begin{cases}\dfrac{\sin^2\theta}{T(\theta)}\left(\dfrac{\partial^2T(\theta)}{\partial\theta^2}+\dfrac{1}{\tan\theta}\dfrac{\partial T(\theta)}{\partial\theta}\right)+\lambda^2\sin^2\theta=m^2\\[2ex] -\dfrac{\partial^2F(\varphi)}{\partial\varphi^2}\dfrac{1}{F(\varphi)}=m^2\end{cases} \tag{1.28}$$

بتبسيط المعادلتين نجد :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}+\lambda^2\right)T(\theta)=0 \tag{1.29}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+m^2\right)F(\varphi)=0 \tag{1.30}$$

3.I تعريف الدالة الموجية:

هو مصطلح يستخدم في ميكانيك الكم يدل على كمية متغيرة تعبر رياضيا عن المميزات الموجية للجسيم و هذا يعني أن قيمة الدالة الموجية لجسيم ما موجود في زمان و مكان محددين تتعلق باحتمالية تواجد ذلك الجسيم في تلك النقطة و في وقت محدد.

من خلال مقارنة الدالة الموجية بأمواج أخرى كالأمواج الصوتية نجد أنها تعبر عن سعة موجة الجسيم، مع أن السعة ليست ذات أهمية كبيرة فيزيائيا ، بينما يعتمد على مربع قيمة الدالة الموجية لإيجاد جسيم في مكان و زمان محددين.

1.3.I خصائص الدالة الموجية:

- ❖ الدالة الموجية مستنتجة من معادلة شرودينغر حيث تقدم لنا كافة معلومات الجسيم القابلة للقياس.
- ❖ إن كانت قيمة مربع الدالة الموجية تساوي الواحد كالآتي:

$$\iiint dr^3 |\psi(\vec{r})|^2 = 1 \tag{1.31}$$

فهذا يعني أن لإثبات وجود احتمالية جسيم في مكان ما، يجب أن مربع الدالة الموجية يساوي الواحد.

- ❖ تتميز هذه الدالة بالاستمرارية و قيمتها مفردة.
- ❖ يمكن من خلال هذه الدالة حساب القيمة الوسطية الفعلية أي القيمة المتوقعة لمتغير محدد، كما يمكن إيجاد التوزع المحتمل في الأبعاد الثلاثة.
- ❖ يمكن معرفة التطور الزمني للدالة الموجية بالاعتماد على معادلة شرودينجر المتعلقة بالزمن.

الفصل الثاني

حساب التغايرات

1.II مقدمة

قام كلا من العالمين لاجرانج و اولر بتطوير طريقة لاجرانج وتطبيقها على الميكانيكا ومنه صياغة ميكانيكا لاجرانج .وأدت مراسلاتهم هذه إلى بعض الاكتشافات الهامة والتي ساهمت في تحويل علم الميكانيكا إلى فرع من فروع التحليل الرياضي والذي أطلق عليه اسم حساب المتغيرات بالتفاضل والتكامل وقد اتخذ كل من اولر ثم لاجرانج خطوة مهمة في حساب التغايرات بوضع شروطهم الشهيرة والمعروفة باسم معادلات اولر- لاجرانج.

في حساب التفاضل والتكامل مفهوم القيمة القصوى و الدنيا والنقاط المثلى من المواضيع المهمة لذا يمكننا اعتبار إن حساب التغيرات هو البحث عن دوال قصوى أو دنيا وكمثال بسيط لفهم هذه المشكلة نفرض أننا نريد إيجاد منحنى له اقصر طول يربط بين نقطتين، إذ لم تكن هناك أية قيود فمن الواضح إن الحل خط مستقيم بين نقطتين، ومع ذلك إذا كان المنحنى مقيد بان يقع على سطح في الفضاء فان الحل اقل وضوحا، وقد تكون هناك العديد من الحلول لهذه المشكلة المعروفة باسم الخطوط الجيوديسية، ومن المشاكل ذات صلة نجد مشكلة الزمن الأقصر لجين برنولي ومبدأ فيرما أيضا الذي ينص على انه يمكن قياس اقصر وقت لتعيين مسار الضوء بين نقطتين، لذا سنناقش في هذا الفصل كل هذه المفاهيم التي تشمل جانب التغايرات [14].

2.II حساب التغايرات

إن المشكلة المطروحة هي إيجاد دالة أو مجموعة دوال تقلل تكامل معين إلى أدنى حد ممكن، تسمى هذه المشكلة حساب التغاير أوحساب التباين [15]. ويرجع الفضل في فهمها وكيفية حلها لكل من اولر و لاجرانج اللذان قدما مساهمات مهمة في هذا المجال.

1.2.II معادلات اولر لاجرانج

هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية تم تطويرها من قبل العالمين اولر و لاجرانج، تعتبر معادلة مهمة في طريقة التباين حيث تساعدنا في ايجاد القيمة القصوى للدالة، تنص على أن النقطة القصوى القابلة للاشتقاق يجب أن تكون نقطة ثابتة (نقطة حرجة) في نظرية التفاضل والتكامل، أو بمعنى آخر أن بافتراض أن حل دالة معروف (الحل الحقيقي) فان هذا الحل يجب أن يأخذ الحد الأدنى. نعتبر دالة

$y(x)$ تعتمد على متغير x، ودالة f تعتمد على ثلاثة متغيرات غير مستقلة عن بعضها البعض $f(y(x), y'(x), x)$.

حيث:

$$y'(x) = \frac{dy}{dx}$$

الدالة $y(x)$ معرفة و الدالة f تاخذ قيمة محددة لأجل قيمة معطاة x. تتعلق f بالمشتق $y'(x)$ في أغلب الأحيان خاصة في الميكانيك، علما ان الدالة f تعتمد ظاهريا على x, لكن ايضا على $y(x)$ و $y'(x)$ ضمنيا , لذا المشتق الكلي ل f بالنسبة ل x يكون كالاتي:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{df}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y'}\frac{dy'}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}y' + \frac{\partial f}{\partial y'}y'' \qquad (2.1)$$

نحدد التابعة $S[y]$ بالتكامل:

$$S[y] = \int_{x_1}^{x_2} f(y(x), y'(x), x)dx \qquad (2.2)$$

نريد إيجاد القيم الثابتة ل S بين النقاط الحدية الثابتة مثل $y(x_2)$ و $y(x_1)$. نختار y بحيث يكون $S[y]$ مستقرة أي:

$$\delta y = 0 \qquad (2.3)$$

نفرض أننا نعرف الدالة $y_0(x)$ مما يجعل S حدية. بما أن $[y_0]$ مستقرة، فان اختلاف صغير $\eta(x)$ للدالة $y(x)$ يعني أن التباين $\delta S = 0$ من الرتبة الأولى ل $\eta(x)$. نكتب:

$$y(x) = y_0 + \eta(x) \qquad (2.4)$$

حيث $\eta(x) \ll y_0(x)$ ونحسب المتغير للتابعي من اجل قيمة ثابتة ل x

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} [f(y_0(x) + \eta(x), y'_0(x) + \eta'(x), x) - f(y_0(x), y'_0(x), x)]\, dx \qquad (2.5)$$

في الرتبة الأولى ل $\eta(x)$ و $\eta'(x)$ ، لدينا:

$$f\,(y_0(x) + \eta(x), y'_0(x) + \eta'(x), x)$$

$$\simeq f\big(y_0(x), y'_0(x), x\big) + \frac{\partial f}{\partial y}\eta(x) + \frac{\partial f}{\partial y}\eta'(x) \qquad (2.6)$$

إذا:

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} \left[\eta(x)\frac{\partial f}{\partial y} + \eta'(x)\frac{\partial f}{\partial y'}\right] dx \qquad (2.7)$$

نقوم بمكاملة التكامل الثاني باستعمال التكامل بالتجزئة، فنجد

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} \left[\eta(x)\frac{\partial f}{\partial y} - \eta'(x)\frac{d}{dx}\frac{\partial f}{\partial y'}\right] dx + \left[\eta(x)\frac{\partial f}{\partial y'}\right]_{x}^{x} \qquad (2.8)$$

بما أن $y(x_1)$ و$y(x_2)$ مثبتين، $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$ والحد الأخير من المعادلة ينعدم. يصبح لدينا :

$$\delta S = \int_{x_1}^{x_2} \eta(x)\left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial f}{\partial y'}\right] dx \qquad (2.9)$$

من اجل $\delta S = 0$ مهما كان $\eta(x)$ سيكون لدينا:

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial f}{\partial y'} = 0 \qquad (2.10)$$

هذه هي معادلة اولر لاجرانج، والتي تكتب بشكل اكثر وضوحا كالتالي:

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial' y \partial x} - \frac{\partial^2 f}{\partial' y \partial y} y' - \frac{\partial^2 f}{\partial y'^2} y" = 0 \qquad (2.11)$$

بشكل عام معادلات اولر لاجرانج تكون معادلة تفاضلية عادية غير خطية من الدرجة الثانية، عادة ما يكون من الصعب جدا حلها مباشرة.

- **حالات خاصة**

هناك نوعان من التبسيط الخاص لمعادلات اولر لاجرانج والتي من السهل جدا إيجادها يمكن توضيحهم كالتالي :

1. نفرض أن $f = f(x, y')$ أي أن f لا تعتمد على y في هذه الحالة تشير معادلات اولر لاجرانج الى:

$$\partial f / \partial y = cost \qquad (2.12)$$

هذه معادلة تفاضلية عادية من الدرجة الأولى، وبالتالي يسهل التعامل معها

2. نفرض أن $f = f(y, y')$ أي أن f لا تعتمد على x في هذه الحالة يشير الشكل الثاني من معادلة اولر لاجرانج إلى:

$$f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} = const \qquad (2.13)$$

وهي معادلة *Beltrami* .

3.II بعض الأمثلة:

نقدم بعض الأمثلة الملموسة

1.3.II الزمن الأقصر :

نضع في اعتبارنا النقطة $A(0,0)$ الموجودة في المستوي العمودي، والمتصلة بالنقطة $B(a, b)$ بواسطة toboggan يعطى شكله بواسطة الدالة $y = f(x)$ ، حيث يمكن الانزلاق بدون احتكاك من النقطة A على طول toboggan، كيف نختار شكل الدالة بحيث يكون وقت الوصول إلى النقطة B اقصر زمن ممكن؟

يمكننا حساب وقت الانتقال بين النقطتين A و B (العددي) باعتبار التابعة كالتالي:

$$\sqrt{2g}\mathrm{T} = \int_0^a f(y, y')\, dx \qquad (2.14)$$

$$f(y, y') = \sqrt{\frac{1 + y'^2}{y}} \qquad (2.15)$$

في الحالة الثانية من التكامل الأول، تشير معادلة اولر- لاجرانج إلى:

$$\sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} - \ y'\sqrt{\frac{1}{y}}\frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = K \qquad (2.16)$$

حيث K ثابت، و هذا يعني أن:

$$y' = \sqrt{\frac{2c}{y} - 1} \qquad (2.17)$$

حيث $2c = 1/K^2$ نحل المعادلة التفاضلية حدوديا، نفرض:

$$y = 2\mathrm{c}\ \sin^2\theta$$

$$= \mathrm{c}(1 - \cos 2\theta) \qquad (2.18)$$

بحيث يكون ف المبدأ $\theta = 0$، اذن:

$$x = \int \frac{\sqrt{2c}\, sin\,\theta}{\sqrt{2c}\, sin\,\theta} 2c\ \ sin\left(\frac{\theta}{2}\right) cos\,\frac{\theta}{2} d\theta$$

$$= c\int (1 - cos\,\theta)\, d\theta$$

$$= \qquad 2c\left(-\frac{1}{2} cos\, 2\theta\right) \qquad (2.19)$$

2.3.II مبدأ فيرما:

مبدأ فيرما هو مبدأ فيزيائي سمي على اسم العالم الفرنسي *Fermat* الذي اقترح الفكرة التي تنص على أن المسار الذي يسير بين نقطتين بواسطة أشعة الضوء هو المسار الذي يمكن اجتيازه في اقل وقت.

يرتبط معامل الانكسار في الوسط بسرعة الضوء من خلال :

$$n = 1/\mathrm{c} \qquad (2.20)$$

للعثور على المسار، نقوم بتصغير:

$$\mathrm{T} = \int dt = \int = \frac{ds}{c} = \int n\, ds \tag{2.21}$$

نضع $n(y,x)$ في بعدين, نبحث عن y حيث $\delta T = 0$

$$\mathrm{T}= \int \sqrt{1+y'^2}\, n(x,y)dx \tag{2.22}$$

بالنسبة ل n المستقل عن، يعطي التكامل الأول:

$$\frac{ny'}{\sqrt{1+\mathrm{y}^2}} = k \tag{2.23}$$

حيث K ثابت، إذا كان أيضا مستقل عن x إذن:

$$y' = cost \tag{2.24}$$

يمكننا كتابة $y' = tan\theta$، اذن:

$$y' = \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = cons\mathrm{t} \tag{2.25}$$

عندما يكون بين وسطين، لدينا

$$K = n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2 \tag{2.26}$$

3.3.II الجيوديسية :

عند سقوط شيء سقوطا حرا نعلم انه يسلك مسار مستقيم وعندما يتحرك شيء على سطح جسم فضائي في حالة طبيعية فانه يسير على اقصر مسار ويعرف بالجيوديسية التي يمكن اعتبارها على إنه المسار ذو الطول الأدنى بين نقطتين ثابتتين على سطح معين[16] .

$$S = \int ds \tag{2.27}$$

حيث:

$$ds^2 = d\theta^2 + \sin^2(\theta)\, d\emptyset^2 \qquad (2.28)$$

$$\theta: 0 \to \pi, \emptyset: \to 2\pi, r = 1$$

نختار θ كمتغير مستقل، وبالتالي نبحث عن الحل على شكل $\emptyset(\theta)$:

$$\mathrm{S} = \int f(\theta, \emptyset, \emptyset')\, d\theta \qquad (2.29)$$

مع:

$$f = \sqrt{1 + sin^2(\theta)\emptyset'^2)} \qquad (2.30)$$

حيث الفتحة تشير الى التفاضل بالنسبة الى θ. الان، f مستقلة عن $\emptyset$ ، مما يعني أن $\partial/\partial\emptyset'$ ثابت.

$$\frac{\sin^2(\theta)\emptyset'}{\sqrt{1 + \sin^2(\theta)\emptyset'^2}} = K \qquad (2.31)$$

تعطي هذه المعادلة مسار دائرة كبرى.

الفصل الثالث

تطبيق طريقة شبه عكسية التغاير على عائلة الكمون الجديد

1.III مقدمة

أنشأنا مجموعة من الصيغ المتغيرة من أجل معادلة شرود نغر باستخدام طريقة شبه معكوسة. تبين أن هذه الطريقة هي أداة قوية لاستخدام مبادئ التغاير للعديد من المشاكل الفيزيائية الخطية وغير الخطية مباشرة دون استخدام مضاعف لاجرانج، حيث تعطي نظرة فيزيائية لطبيعة حلول المشكلة [9، 3، 2].

محتوى هذا الفصل منظم على النحو التالي: يحتوي القسم **2** على تعريف عائلة الكمون الجديد والكمونات المركزية التي يؤول اليها بتغيير قيمة المعلمات التي يحتويها، في القسم **3**، نقدم الحجج الضرورية التي تكمن وراء صياغة التغاير فيما يتعلق بالمشاكل الكمية. في القسم **4**، تم اقتراح بعض التطبيقات لتجريب الطريقة ويتم تقديم الرسومات البيانية في القسم **5**.

2.III عائلة الكمون الجديد من الشكل: $\frac{A}{r^2}-\frac{B}{r}+Cr^{\delta+1}$

يتضمن هذا الكمون كمونات مختلفة حسب قيم المعلمات التي يحتويها:

- باختيار $C=0$، يتحول هذا الكمون إلى كمون *Kratzer*، والتي يمكن حلها من الناحية التحليلية باستخدام طرق مختلفة. تم استخدام هذه الكمون على نطاق واسع حتى الآن لوصف التركيب الجزيئي والتفاعلات.

- يتم الحصول على كمون *Gol'dman-Krivchenkov* باختيار $A\neq 0$ $B=0$ و $\delta=2$ ويتم حلها بشكل تحليلي باستخدام طرق مختلفة. علاوة على ذلك، يصبح هذا الكمون هو جهد المذبذب التوافقي المدبب عندما يكون $A=0$ و $B=1$ و $\delta=2$ [10].

- يتم الحصول على صيغة *Coulomb plus* للجهد الخطي باختيار $A=0$ و $\delta=1$ ويتم حلها بطرق مختلفة مثل طريقة *The envelope* التقريبية وطرق التغاير [10]. أثار هذا الكمون اهتمامًا كبيرًا بالفيزياء الذرية والجزيئية.

- يتم الحصول على كمون الهزاز التوافقي زائد كمون كولوم باختيار $A=0$ و $\delta=2$. يتم حل هذا النموذج باستخدام طريقة العزم وطريقة *Shifted* $1/N$ *expansion* وطريقة *The envelope* [10]. بالإضافة إلى ذلك، يتم تطبيقه لفحص تأثير زيمان التربيعي وتأثير المجال المغناطيسي في ذرة الهيدروجين.

تم استخدام هذه الكمون على نطاق واسع لوصف الحالات المرتبطة والحالات المنفصلة لأنظمة التفاعلات وتم نشر عدد كبير من الأوراق البحثية عن الحلول الدقيقة والرقمية لهذا الكمون. وبالتالي، سيكون من المثير للاهتمام والمهم حل معادلة شرودينجر الشعاعية غير النسبية لعائلة الكمون المشار اليه سابقا لحالات كمية مختلفة n و l.

3.III طريقة شبه عكسية التغاير

نبدأ بمعادلة شرودينجر الشعاعية من اجل كمون $V(r)$، لديه تناظر كروي، أي جسيم يتحرك تحت تأثير كمون مركزي، لكن هذه الطريقة تظل قابلة للتطبيق أيضًا على التفاعلات والأنظمة الكمية الأخرى.

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+(w(r)-E)R=0 \qquad (3.1)$$

حيث:

$$w(r)=V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \qquad (3.2)$$

$w(r)$ هو الكمون الفعال، l يشير إلى العدد الكمي للزخم الزاوي، $m(E)$ هي كتلة (طاقة) الجسيم، $\hbar$ يمثل ثابت بلانك.

يمكننا إعادة كتابة المعادلة (3.1) على النحو التالي:

$$U(r;R;R',R'')=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dr^2}-\frac{\hbar^2}{mr}\frac{dR}{dr}+(w(r)-E)R=0 \qquad (3.3)$$

حيث تشير الرموز $'$ و $''$ إلى المشتقات بالنسبة ل r. تم وصف شرط الاتساق لوجود التكامل التابعي في [5]. بالنسبة للحالة أحادية البعد $(1D)$، لدينا:

$$\frac{\partial U}{\partial R'}=\frac{d}{dr}\left(\frac{\partial U}{\partial R''}\right) \qquad (3.4)$$

من السهل التحقق من عدم استيفاء شرط الاتساق (3.4) عند تطبيقه على المعادلة (3.3). لذاك نستخدم العامل المساعد $g(r)$ ونعيد كتابة المعادلة (3.3) على النحو التالي:

$$Y(r;R;R',R'') = g(r)U(r;R;R',R'') = 0 \qquad (3.5)$$

في المعادلة (3.4)، قمنا باستبدال U بـ Y. الآن تم استيفاء شرط الاتساق بشرط $g(r) = r^2$.

الآن، يمكن اشتقاق المعادلة التفاضلية (3.5) من دالة محددة باعتبارها الشرط مستقر. للعثور على هذا التابع، نطبق الطريقة شبه العكسية التي تقدم حتى الآن أفضل تقنية لإنشاء مبادئ التغاير للعديد من المشكلات الفيزيائية. الفكرة الأساسية للطريقة شبه العكسية موضحة في [12]. نبني كشكل بديل تابعي عام للمعادلة (3.5) على النحو التالي:

$$J(R) = \int_0^{+\infty} L dr \qquad (3.6)$$

حيث L هي دالة لاجرانج، نأخذ الشكل التجريبي التالي:

$$L = a\frac{\hbar^2}{2m}\left(r\frac{dR}{dr}\right)^2 + b(w(r) - E)(rR)^2 + F \qquad (3.7)$$

حيث F هي دالة غير معروفة لـ R و/ أو مشتقاتها ، a و b ثوابت كيفية يتعين تحديدها. يعطي شرط استقرار المعادلة (3.7) المعادلة التالية حسب منهج أويلر:

$$-a\frac{\hbar^2}{m}r^2\frac{d^2R}{dr^2} - 2a\frac{\hbar^2}{m}r\frac{dR}{dr} + 2b(w(r) - E)\, r^2R + \frac{\delta F}{\delta R} = 0 \qquad (3.8)$$

نشير إلى $\frac{\delta F}{\delta R}$ كمشتق تغايري لـ F بالنسبة ل R، معبرًا عنه بـ:

$$\frac{\delta F}{\delta R} = \frac{\partial F}{\partial R} - \frac{d}{dr}\left(\frac{\partial F}{\partial R'}\right) + \frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{\partial F}{\partial R'}\right) - \cdots \qquad (3.9)$$

نبحث عن F, a و b بمطابقة المعادلة (3.8) بالمعادلة الأصلية. الآن يمكن تحديد المجهول F و a و b على النحو التالي:

$$a = b = \frac{1}{2}, F = 0 \qquad (3.10)$$

وأخيرًا، نحصل على مبدأ التغاير الضروري للمعادلة (3.6)، والذي ينص على:

$$J(R) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{dR}{dr}\right)^2 + (w(r) - E)R^2\right\} r^2 dr \qquad (3.11)$$

قد يكون من المفيد في كثير من الأحيان فحص أمثلة كاختبار لهذه الطريقة. هذه النقطة موضحة في القسم التالي.

4.III تطبيق عددي

يمكن كتابة معادلة شرودينجر الشعاعية المستقلة عن الزمن مع الكمون الفعال المركزي $w(r)$ بعد بعض التبسيطات على النحو التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E\right)R(r) = 0 \qquad (3.12)$$

يتم وضع المعادلة السابقة بالشكل التالي:

$$U(r; R; R', R'') = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R(r)}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{dR(r)}{r} + (w(r) - E)R(r) = 0 \qquad (3.13)$$

لكي نستطيع بناء لاجرانج المشكلة المدروسة، سوف نتحقق أولاً مما إذا كان النموذج السابق يسمح بصياغة متغيرة. نستخدم شرط الاتساق لوجود التكامل التابعي التالي:

$$\frac{\partial U}{\partial R'} = \frac{d}{dr}\left(\frac{\partial U}{\partial R''}\right) \qquad (3.14)$$

بتطبيق هذا الشرط نجد أنه غير محقق. في هذه الحالة، نقوم بإجراء تحويل معين مثل:

$$Y(r; R; R', R'') = g(r)U(r; R; R', R'') = 0 \qquad (3.15)$$

نأخذ $g(r) = r^2$ لتصبح الآن النظرية جاهزة للاستخدام.

للتطبيق، سنأخذ عائلة الكمون الجديد على النحو التالي:

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} + Cr^{\delta+1}$$

من أجل $\delta = -1$

يؤدي ادخال الكمون على المعادلة (3.1) إلى:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left(\frac{A}{r^2}-\frac{B}{r}+Cr^{\delta+1}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}-E\right)R=0 \qquad (3.16)$$

بتبسيط المعادلة (3.16) من أجل $\delta = -1$، نحصل على:

$$-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{1}{r^2}(-\varepsilon^2 r^2+\alpha^2 r-\beta^2)R=0 \qquad (3.17)$$

حيث تكون المعلمات بدون بعد على النحو التالي:

$$\varepsilon^2=-\frac{2m}{\hbar^2}(E-C),\ \ \alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}B,\ \ \beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}[A+\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)]$$

دالة لاجرانج التجريبية مع الكمون الجديد هي:

$$a\left(r\frac{dR}{dr}\right)^2-b(-\varepsilon^2 r^2+\alpha^2 r-\beta^2)(rR)^2+F \qquad (3.18)$$

وكذلك معادلة أويلر التجريبية كالتالي:

$$-2ar^2\frac{d^2R}{dr^2}-4ar\frac{dR}{dr}-2b(-\varepsilon^2 r^2+\alpha^2 r-\beta^2)R+\frac{\delta F}{\delta R}=0 \qquad (3.19)$$

نحن نبحث F، a وb بمطابقة المعادلة (3.19) بالمعادلة الأصلية. الآن يمكن تحديد المجاهيل F، a و b على النحو التالي:

$$a=b=\frac{1}{2},\qquad F=0$$

أخيرًا نتحصل على مبدأ التغاير المطلوب للعلاقة (3.18) وهو:

$$J(R)=\int_0^{+\infty}\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{dR}{dr}\right)^2-\frac{1}{r^2}(-\varepsilon^2 r^2+\alpha^2 r-\beta^2)R^2\right\}r^2dr \qquad (3.20)$$

بالنسبة لهذا الاختبار، سوف نختار عدة متغيرات من دوال الاختبار التي تحتوي على معلمات متغيرة مستخلصة من حالة استقرار الوظيفة $J(R)$. نعتمد نظام الوحدة الذرية حيث$\hbar = m = 1$.

نأخذ الدالة الموجية بالشكل العام التالي:

$$R(r) = ar^{\frac{1}{2}(\nu-1)} e^{-kr} L_n^{\nu}(n, \nu, 2kr)$$

حيث: $\nu = \sqrt{1 + 4\beta^2}$

حيث a و k كميات ثابتة يتم تحديدها، وتستخدم كمعلمات متغايرة للمشكلة قيد النظر. يتم الاستدلال على هذه المعلمات المتغايرة من التابعي التغايري $J(R)$ الخاضع لشرط التصغير:

$$\delta J(R) = 0 \qquad (3.21)$$

مثال 1: $\boldsymbol{n = 1, l = 0\ A = 1, B = 1, C = 0.5}$

يتم التعبير عن الحل الذي نبحث عنه بالشكل:

$$R_{n,l}(r) = are^{-kr} L_n^{\nu}(1,3,2kr) \qquad (3.22)$$

نعوض (3.22) في (3.20) ، وباستخدام برنامج ماتيماتيكا Mathematica نحصل على $J(a, k)$ كدالة للمعلمات a ، k والطاقة:

$$J(a, k) = a^2 \left(\frac{1.125 + k(-0.75 + 1.125k) - 2.25E}{k^5} \right) \qquad (3.23)$$

ينتج عن شرط التصغير (3.21) بالنسبة ل a و k العبارات التالية:

$$\frac{\partial J(a, b, c, k)}{\partial a} = \frac{2a(1.125 + k(-0.75 + 1.125k) - 2.25E)}{k^5} \qquad (3.24)$$

$$\frac{\partial J(a, b, c, k)}{\partial k} = \frac{a^2(-0.75 + 2.25k)}{k^5} - \frac{5a^2(1.125 + k(-0.75 + 1.125k) - 2.25E)}{k^6} \qquad (3.25)$$

ينتج عن حل جملة المعادلات القيمة k والطاقة E، ويمكن تحديد الثابت a من شرط التنظيم:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\begin{cases} k = 0.333333 \\ E = 0.444444 \end{cases} \quad (3.26)$$

من هذه النتائج، نحدد الحالة المثارة الاولى: الحالة $1s$، ودالة الموجة $R_{10}(r)$.

مثال 2: $n = 2, l = 0\ A = 1, B = 1, C = 0.5$

يتم التعبير عن الحل الذي نبحث عنه بالشكل:

$$R_{n,l}(r) = are^{-kr} L_n^\nu(2,3,2kr) \quad (3.27)$$

نعوض (3.27) في (3.20)، وباستخدام برنامج ماتيماتيكا Mathematica نحصل على $J(a,k)$ كدالة للمعلمات a، k والطاقة:

$$J(a,k) = a^2 \left(\frac{3.75 + k(-1.875 + 3.75k) - 7.5E}{k^5} \right) \quad (3.28)$$

ينتج عن شرط التصغير (3.21) بالنسبة ل a و k العبارات التالية:

$$\frac{\partial J(a,b,c,k)}{\partial a} = \frac{2a(3.75 + k(-1.875 + 3.75k) - 7.5E)}{k^5} \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial J(a,b,c,k)}{\partial k} = \frac{a^2(-1.875 + 7.5k)}{k^5} - \frac{5a^2(3.75 + k(-1.875 + 3.75k) - 7.5E)}{k^6} \quad (3.30)$$

ينتج عن حل جملة المعادلات القيمة k والطاقة E، ويمكن تحديد الثابت a من شرط التنظيم:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\begin{cases} k = 0.25 \\ E = 0.46875 \end{cases} \quad (3.31)$$

من هذه النتائج، نحدد الحالة المثارة الثانية: الحالة $2s$، ودالة الموجة $_{20}(r)$.

مثال 3: $n = 2, l = 1\ A = 1, B = 1, C = 0.5$

يتم التعبير عن الحل الذي نبحث عنه بالشكل:

$$R_{n,l}(r) = ar^{1.56}e^{-kr}L_n^{\nu}(2,4.12,2kr) \tag{3.32}$$

نعوض (3.32) في (3.22)، وباستخدام برنامج ماتيماتيكا Mathematica نحصل على $J(a,k)$ كدالة للمعلمات a ، k والطاقة :

$$J(a,k) = a^2\left(-\frac{6.48749}{k^{5.12}} + \frac{14.8016}{k^{4.12}} + \frac{14.7915 - 29.583E}{k^{6.12}}\right) \tag{3.33}$$

ينتج عن شرط التصغير (4.25) بالنسبة ل a و k العبارات التالية:

$$\frac{\partial J(a,b,c,k)}{\partial a} = 2a\left(-\frac{6.48749}{k^{5.12}} + \frac{14.8016}{k^{4.12}} + \frac{14.7915 - 29.583E}{k^{6.12}}\right) \tag{3.34}$$

$$\frac{\partial J(a,b,c,k)}{\partial k} = a^2\left(\frac{33.216}{k^{6.12}} - \frac{60.9824}{k^{5.12}} - \frac{6.12(14.7915 - 29.583E)}{k^{7.12}}\right) \tag{3.35}$$

ينتج عن حل جملة المعادلات القيمة k والطاقة E، ويمكن تحديد الثابت a من شرط التنظيم:

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\begin{cases} k = 0.219149 \\ E = 0.475971 \end{cases} \tag{3.36}$$

من هذه النتائج، نحدد الحالة المثارة الثانية: الحالة $2p$، ودالة الموجة $_{21}(r)$.

وبنفس الطريقة نجد الحالات الأخرى من أجل $n = 3, l = 0, l = 1, l = 2$ والطاقات المتاحة ونضعها في الجدول (1.3) مع المقارنة بقيم الطاقات الدقيقة التي تم التحصل عليها باستعمال طريقة نيكيفوروف [13].

من أجل $\boldsymbol{\delta = -2}$

بتبسيط المعادلة (3.16) من أجل $\boldsymbol{\delta = -2}$ ، نحصل على:

$$-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{1}{r^2}(-\mathcal{E}_1^2r^2+\alpha_1^2r-\beta^2)R=0 \qquad (3.37)$$

حيث تكون المعلمات بدون بعد على النحو التالي:

$$\mathcal{E}_1^2=-\frac{2m}{\hbar^2}E,\alpha_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}(B-C),\beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left[A+\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)\right]$$

مبدأ التغاير الخاص بالعلاقة (3.18) وهو:

$$J(R)=\int_0^{+\infty}\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{dR}{dr}\right)^2-\frac{1}{r^2}(-\mathcal{E}_1^2r^2+\alpha_1^2r-\beta^2)R^2\right\}r^2dr \qquad (3.38)$$

نأخذ دالة الموجة على الشكل التالي:

$$R(r)=ar^{\frac{1}{2}(\nu-1)}e^{-k_1r}L_n^{\nu}(n,\nu,2k_1r)$$

مع:

$$\nu=\sqrt{1+4\beta^2}$$

النتائج المتحصل عليها في هذه الحالة مدونة في الجدول (2.3).

من أجل $\boldsymbol{\delta = -3}$

بتبسيط المعادلة (3.18) من أجل $k=-3$، نحصل على:

$$-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{1}{r^2}(-\mathcal{E}_1^2r^2+\alpha^2r-\beta_1^2)R=0 \qquad (3.39)$$

حيث تكون المعلمات بدون بعد على النحو التالي:

$$\mathcal{E}_1^2=-\frac{2m}{\hbar^2}E,\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}B,\beta_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}(A+C)+l(l+1)$$

مبدأ التغاير الخاص بالعلاقة (3.18) وهو:

$$J(R) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{dR}{dr}\right)^2 - \frac{1}{r^2}(-\mathcal{E}_1^2 r^2 + \alpha^2 r - \beta_1^2)R^2\right\} r^2 dr \quad (3.40)$$

نأخذ دالة الموجة على الشكل التالي:

$$R(r) = ar^{\frac{1}{2}(\nu-1)} e^{-k_1 r} L_n^{\nu}(n, \nu, 2k_1 r)$$

مع:

$$\nu = \sqrt{1 + 4\beta_1^2}$$

النتائج المتحصل عليها في هذه الحالة مدونة في الجدول (3.3).

النتائج الخاصة بالقيم المختلفة ل δ توضع في الجداول التالية مع مقارنة النتائج بالمتحصل عليها بطريقة نيكيفوروف [13]. قمنا بايجاد الطاقات المتحصل عليها بطريقة نيكيفوروف عن طريق تعويض كل الثوابث المستعملة في تجريب الطريقة الجديدة في العبارة التحليلية للطاقات.

جدول 1.3: يحتوي على الحلول من أجل $\delta = -1$، الحالات $n = 1, l = 0$، $n = 2, l = 0, l = 1$، $n = 3, l = 0, l = 1, l = 2$، محسوبة باستعمال طريقة شبه عكسية التغاير.

$A = 1$ $B = 1$ $C = 0.5$ $\delta = -1$					
n	l	k	ε	E الطريقة	E الدقيقة[13]
1	0	0.3333333	0.3333333	0.444444	0.444444
2	0	0.2500000	0.2500000	0.468750	0.468750
	1	0.2191490	0.2192213	0.475971	0.475971
3	0	0.2000000	0.2000000	0.480000	0.480000
	1	0.1797560	0.1798054	0.483835	0.483835
	2	0.1568730	0.1569267	0.487687	0.487687

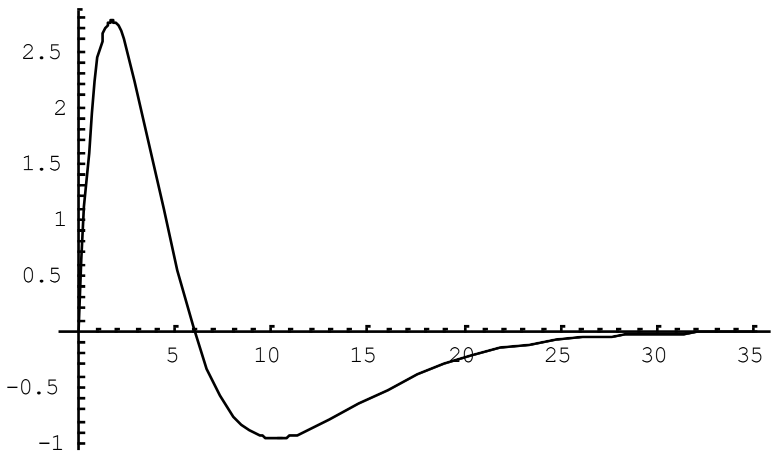
جدول 2.3: يحتوي على الحلول من أجل $\delta = -2$، الحالات $n = 1, l = 0$، $n = 2, l = 0, l = 1$، $n = 3, l = 0, l = 1, l = 2$، محسوبة باستعمال طريقة شبه عكسية التغاير.

$A = 1 \quad B = 1 \quad C = 0.5 \quad \delta = -2$					
n	l	k	ε	E الطريقة	E الدقيقة[13]
1	0	0.1666666	0.1666666	-0.0138889	-0.0138889
2	0	0.125	0.125	-0.0078125	-0.0078125
	1	0.102621	0.109837	-0.0060320	-0.00600737
3	0	0.1	0.1	-0.0050000	-0.0050000
	1	0.0898778	0.0899029	-0.00404126	-0.00404127
	2	0.0784367	0.0784648	-0.00307836	-0.00307837

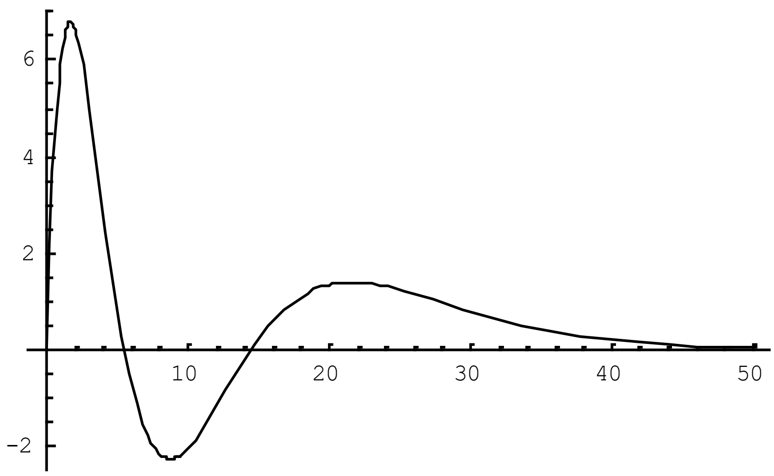
جدول 3.3: يحتوي على الحلول من أجل $\delta = -3$، الحالات $n = 1, l = 0$، $n = 2, l = 0, l = 1$، $n = 3, l = 0, l = 1, l = 2$، محسوبة باستعمال طريقة شبه عكسية التغاير.

$A = 1 \quad B = 1 \quad C = 0.5 \quad \delta = -3$					
n	l	k	ε	E الطريقة	E الدقيقة[13]
1	0	0.3025210	0.3027754	-0.0458365	-0.0458365
2	0	0.2322580	0.2324082	-0.0270068	-0.0270068
	1	0.2108470	0.2087230	-0.0217826	-0.0217804
3	0	0.1884820	0.1885804	-0.0177813	-0.0177813
	1	0.1726350	0.1726730	-0.0149079	-0.0149080
	2	0.1528410	0.1528730	-0.0116850	-0.0116851

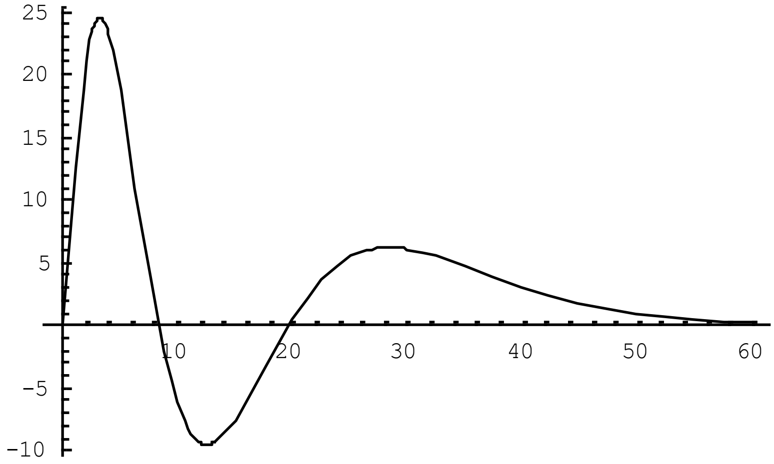
4.III التمثيلات البيانية:



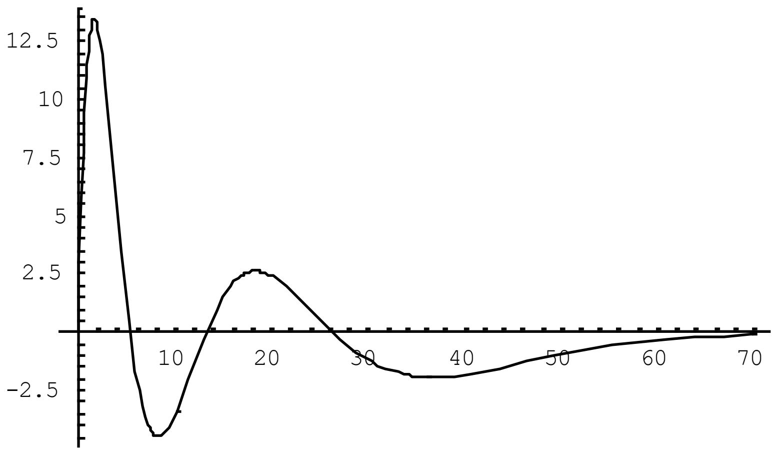
الشكل1.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الأولى R_{10} $(n = 1\ , l = 0\ , \delta = -1)$



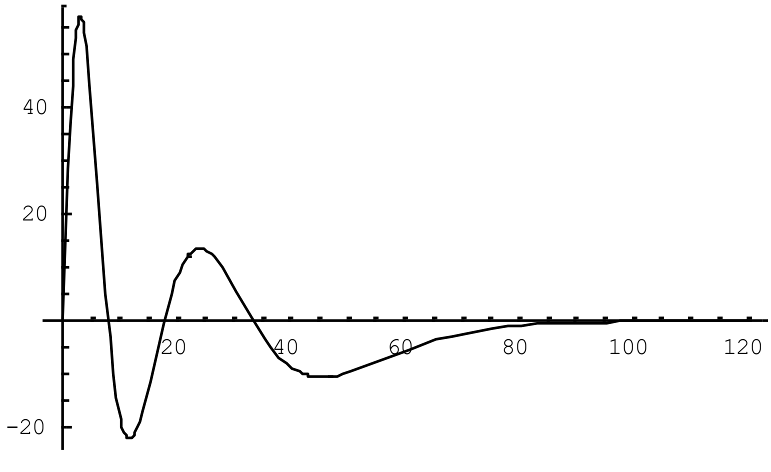
الشكل2.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الثانية R_{20} $(n = 2\ , l = 0\ , \delta = -1)$



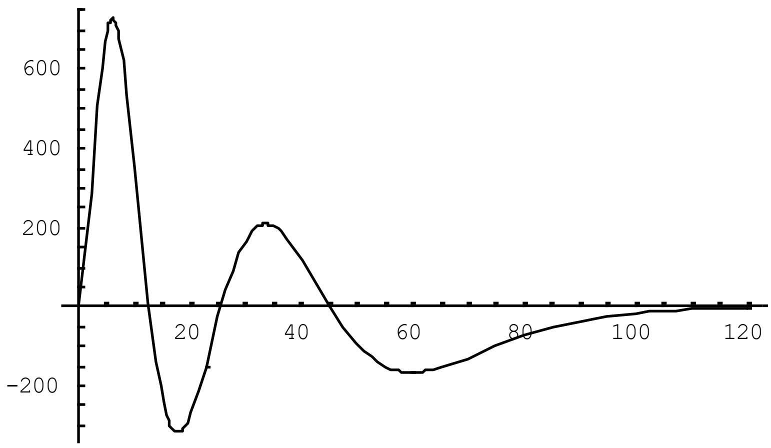
الشكل3.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الثانية $_{21}$ $(n = 2\ , l = 1\ , \delta = -1)$



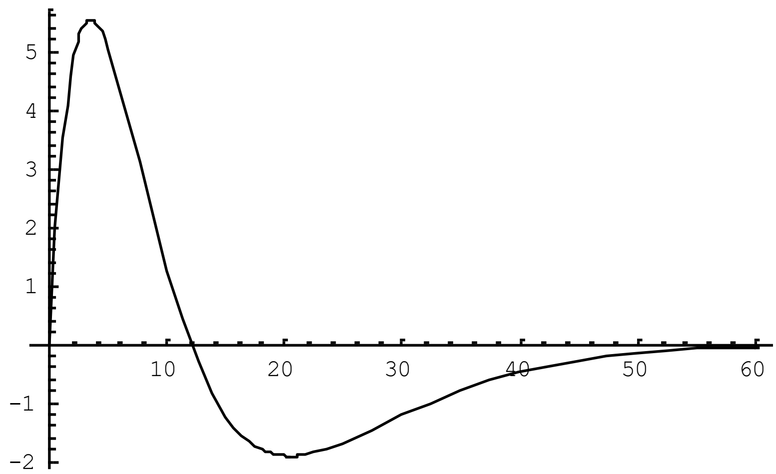
الشكل4.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الثالثة R_{30} $(n = 3\ , l = 0\ , \delta = -1)$



الشكل5.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الثالثة R_{31} $(n = 3\ , l = 1\ , \delta = -1)$



الشكل 6.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الثالثة R_{32} $(n = 3 , l = 2 , \delta = -1)$



الشكل 7.3: $y(x) = R(r)$ يمثل الحالة المثارة الأولى R_{10} $(n = 1 , l = 0 , \delta = -2)$

5.III خاتمة

في هذا الفصل، تم تطبيق طريقة شبه عكسية التغاير على معادلة شرودينجر. تم تحقيق الهدف المتمثل في الحصول على حلول تقريبية لمعادلة شرودينجر باستخدام أمثلة محددة. باستخدام بعض الأمثلة التوضيحية، فقد تبين أن طريقة شبه عكسية التغاير هي طريقة حل فعالة ومباشرة لإيجاد حلول معادلة شرودينجر.

استخدمنا عائلة الكمون الجديد كاختبار لهذه الطريقة للحصول على الطاقات المرتبطة وكذلك الحالات الكمومية. قمنا بمقارنة النتائج المتحصل عليها بالتي وجدت باستعمال الطريقة التحليلية نيكيفوروف وكانت متوافقة.

الخاتمة العامة

في ميكانيك الكم تعطى حالة النظام من خلال دالة الموجة التي تمثل حل معادلة شرودينجر. لذا يتضمن هذا العمل حل معادلة شرودينجر الشعاعية بطريقة شبه عكسية التغاير حيث قدمنا في الفصل الأول تذكيرا عاما حول معادلة شرودينجر المستقرة ونضرا لأنه لا يمكن حل هذه المعادلة بشكل عام بالطرق التحليلية قدمنا في الفصل الثاني الطريقة التقريبية (طريقة التغاير) حيث تحدثنا عن موضوع حساب التغايرات من خلال تقديم معادلات اولر لاغرانج التي تطرح العديد من الحلول لمشاكل حساب التغايرات كما عرضنا بعض الأمثلة الملموسة التي توضح مفهوم حساب التغايرات أما في الفصل الثالث طبقنا طريقة شبه عكسية التغاير باستخدام الجهد الجديد.

ناقشنا النتائج التي تم الحصول عليها بواسطة طريقة شبه عكسية التغاير من خلال إجراء مقارنة مع النتائج التي تم الحصول عليها بواسطة كثيرات حدود لاغرانج لحل معادلة شرودينجر الشعاعية حيث وجدنا توافق كبير بين النتائج حيث نستنتج أن طريقة التغاير شبه العكسي هي أداة رياضية فعالة لبناء صيغة متغيرة لمعادلة تفاضلية موجية.

قائمة المراجع

الأستاذ بن عامر علي، دروس في ميكانيك الكم -1- المدرسة العليا للأساتذة المجاهد الفريق احمد قايد صالح -بوسعادة 2020 . [**1**]

[**2**] A. Zerarka, K. Libarir, *Commun Nonlinear Sci*Numer Simulat, 14 (2009) 3195–3199 (www.elsevier.com/locate/cnsns).

[**3**]O. Haif Khaif, Thèse de Doctorat, université de Biskra, (2018).

د. هشام العطار، ميكانيكا الكم 2، نظرية الاضطراب. [**4**]

د. سعد الله القاري، كيمياء الكم 1 ، التركيب الالكتروني للذرات، د. رفعت هلال عروض ميكانيكا الكم(Pdf). [**5**]

[**6**] K. Libarir, Thèse de Doctorat, université Mohamed khider-Biskra, (2018).

[7] E. Bendaoud,K . Chami, Thèse de Master, université Mohamed Boudiaf-M'sila, (2019).

حساب المتغيرات وميكانيك لاغرانج ،جلال الحاج عابد، (2008). [**8**]

[**9**] A. Zerarka, O. Haif Khaif, Commun Nonlin Sci Numer Simul;10(7):737–45, (2005).

[**10**] H. Ciftci, R. L. Hall and Q. D. Katatbeh, J. Phys. A: Math. Gen. 36 7001, (2003).

[11] Atherton RW,Homsy GM. Stud Appl Math 1975;54:31.

[12] Hao TH. Search for variational principles in electrodynamics by lagrange method. Int J Nonlin Sci Numer Simul 2005; 6(2):209-10.

[13] Akaninyene Daniel Antia1, Ita Okon Akpan,… and all, (2015).

الملخص

قمنا بإدخال مبدأ التغاير للبحث عن الحلول في إطار كوانتي. استعملنا طريقة شبه عكسية التغاير في معالجة معادلة شرودينجر. عالجنا الطاقات والحالات الموافقة لأنظمة عائلة الكمون الجديد من الشكل: $V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} + Cr^{\delta+1}$ ، من أجل حالات محددة حسب قيم A, B, C و δ.

النتائج المتحصل عليها في هذا العمل كانت جد مرضية.

الكلمات المفتاحية: معادلة شرودينجر، الدوال الموجية، التغاير

Abstract

We introduced the variational formalism to search solutions in the quantum framework. We used the semi inverse variational method in the treatment of Schrödinger equation. We treated the energies and corresponding bound states for the systems of the family of the new potentials: $V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} + Cr^{\delta+1}$, for specific cases according to the values of A, B, C et δ.

Results very satisfactory were obtained of this work.

Keywords: Schrödinger equation, wavefunction, variational