جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعية والحياة
قسم علوم المادة

مذكرة ماستر

علوم مادة
فيزياء
فيزياء المواد

رقم: أدخل رقم تسلسل المذكرة

إعداد الطالب:
العفراء شبعاني

يوم: 24/06/2021

حل معادلة شرودينغر في الفضاء العادي مع هزاز توافقي زائد كمون ثنائي القطب في الاحداثيات القطبية

لجنة المناقشة:

حايف خايف	أ مساعد أ	جامعة محمد خيضر-بسكرة	رئيس
هدار مبارك	أ مساعد أ	جامعة محمد خيضر-بسكرة	مقرر
مومني مصطفى	أ.د	جامعة محمد خيضر-بسكرة	ممتحن

السنة الجامعية : 2020-2021

بسم الله الرحمن الرحيم

إهداء

إلى روح أبي الطاهر رحمة الله عليه

اهدي ثمرة جهدي هذا إلى اعز وأغلى إنسانة في حياتي، التي أنارت دربي بنصائحها، إلى من جاهدت وعانت الكثير من اجل تعليمي وكانت سببا في مواصلة دراستي ، إلى من منحتني العزيمة لمواصلة الدرب، وكانت بحرا صافيا يجري بفيض الحب والبسمة، إلى من زينت حياتي بضياء البدر وشموع الفرح، إلى من علمتني الصبر والاجتهاد، إلى الغالية على قلبي،

أمي

إلى اخوتي عبد القادر، دراجي، عمر، عمارة وقيس، واخواتي منال وسماح، إلى ابناء وزوجات اخوتي وابناء اخواتي حفظهم الله، إلى من ساندوني ويسروا لي الصعاب وشجعوني في كتابة هذه المذكرة صديقتي منئ عمر وأميرة صباحي، إلى رفيقاتي اللاتي عرفتني بيهم الجامعة سليمة، حيزية، عفاف، اسماء . إلى زملاء دفعتي فارس ونبيل واكرم.

إلى كل هؤلاء اهديهم هذا العمل المتواضع سائلة الله العلي التقدير أن ينفعنا به ويمدنا بتوفيقه.

شكر وعرفان

الحمد و الشكر أولا و أخرا لله فاطر السموات و الأرض رب كل شيء و مالكه الذي أوصلني لهذا المستوى المتقدم من العلم،الذي طالما دعوته فاستجاب دعواتي و أستخرته فأرشدني إلى الدرب الصحيح، الذي كان معي في كل خطوة أتقدم بها في هذا العمل، أمدني بقوة الصبر و العزيمة للتغلب على حاجز اليأس و وفقت بفضله العظيم في إتمام هذه المذكرة.

أتقدم وبكل معاني التقدير والإحترام بالشكر للأستاذ **هدار مبارك** لتفضله بالإشراف على هذا العمل، كما اتقدم بالشكر لأستاذي المحترم **فالق مختار** لمساعدته وتقديمه لي النصائح لإتمام هذا العمل .

كما اشكر اعضاء لجنة المناقشة الذين بذلوا جهدا في مراجعة هذا العمل المتواضع الاستاذة **حايف خايف** التي تراست اللجنة، والاستاذ **مومني مصطفى** الدي تشرف بالمناقشة .

الفهرس

الفهرس

الاهداء

الشكر والعرفان

المقدمة العامة: 1

الفصل الاول : مدخل عام حول معادلة شرودينغر والكمونات غير مركزية

تمهيد: 3

1. معادلة شرود ينغر: 3
2. الكمونات غير المركزية: 7
3. أمثلة عن الكمونات غير المركزية : 8
   1.3 كمون Makarov : 8
   2.3 كمون Hartman : 8
   3.3 جهد الهزاز شبه التوافقي على شكل حلقة: 8
   4.3 كمون Hautot : 9
   5.3 كمون Kratzer على شكل حلقة مزدوجة : 9
   6.3 كمون ثنائي القطب الكهربائي : 10

خاتمة: 12

الفصل الثاني : حل معادلة شرودينغر في الفضاء العادي مع هزاز توافقي ثنائي البعد

تمهيد : 13

1. حل معادلة شرودينغر مع هزاز توافقي ثنائي البعد: 13

الفصل الثالث : حل معادلة شرودينغر في الفضاء العادي مع هزاز توافقي زائد كمون ثنائي القطب في الإحداثيات القطبية

تمهيد :.. 19

1. حل معادلة شرودينغر مع هزاز توافقي زائد كمون ثنائي القطب في الإحداثيات القطبية:..................... 19
   1.1 حل معادلة الجزء الزاوي :... 22
   2.1 حل معادلة الجزء القطري :.. 25

المناقشة.. 30

خاتمة عامة: 31

قائمة المراجع والمصادر

الملخص

المقدمة العامة

المقدمة العامة:

ميكانيكا الكم هي مجموعة من النظريات الفيزيائية التي ظهرت في القرن العشرين وخلقت مصطلح الازدواجية (موجة-جسيم)، والتي تتمثل في الخاصية الموجية والخاصية الجسيمية، ظهرت لتفسير الظواهر على مستوى الذرة والجسيمات دون الذرة.

من الظاهر اليوم أن ميكانيكا الكم مثل النظريات الأخرى، لها جانبان، الجانب الرياضي والجانب المفاهيمي، بالنسبة للجانب الرياضي هو طريقة متناسقة ومنسجمة وقد نجحت بشكل كبير في شرح وتوقع عدد كبير من الظواهر الذرية وتحت الذرية. لكن الجانب المفاهيمي كان موضوع مناقشات لا تنتهي وبدون استنتاجات متفق عليها، وبدون ميكانيكا الكم كان من المستحيل فهم مختلف الظواهر في الفيزياء المجهرية التي لا تظهر في عالمنا الكلاسيكي. في هذه النجاحات غير المنتهية لميكانيك الكم نجد انه قد تم تطوير الرياضيات وخاصة الفيزياء الرياضية لمساعدة ونجاح ميكانيكا الكم [1].

ميكانيكا الكم أعطت نتائج جيدة لأنظمة الجسيمات الموجودة في كمونات كولومبية او كمونات الهزاز التوافقي اين تكون الطاقة والدوال الموجية محددة بدقة. هذه الكمونات غير موجودة في العالم الميكروسكوبي ولكن هناك تنبؤات كثيرة لشكل كمونات الأنظمة الذرية وشبه الذرية، بعض هذه الكمونات لها نفس الخصائص الذرية مثل الكمونات غير المركزية [1].

الكمونات غير مركزية هي كمونات ليس لها تناظر كروي، فهي لا تتعلق فقط بنصف القطر r وإنما تتعلق بمعاملات أخرى كالزوايا، وهي تمثل طبيعة القوى غير المركزية، يأخذ هذا النوع أهميته من الأنظمة الفيزيائية الحقيقية، مثل الذرات والجزيئات التي نادرا ما تكون متناظرة كرويا مثل ذرات الهيدروجين .بدأت دراسة الكمونات غير المركزية بالأعمال التي قام بها Makarov عندما تناول بواسطة ميكانيكا الكم مسالة جسيم داخل كمون دوراني [2].وبعدها أعمال Hartmann حيث اعطى من خلالها الكمونات غير المركزية التي تسمح بفصل معادلة شرود نغر في الإحداثيات الكروية [3] ثم نظمت هذه الكمونات غير المركزية في عمل من اعمال Hautou [4] . هذه الأعمال مهدت الطريق لمزيد من الواقعية في الدراسات، حيث اعطى عبارات الكمونات غير المركزية التي يمكن حلها تحليليا في الميكانيكا الكلاسيكية وفي ميكانيكا الكم عندما تم معادلتي نيوتن وشرود نغر، ووجد بعض الحلول الدقيقة في الفضاء ثنائي البعد واخرى في الفضاء ثلاثي البعد [1] .

الكمونات غير المركزية التي يمكن من أجلها حل معادلة شرود نغر عن طريق فصل المتغيرات لها عدة تطبيقات، وخاصة في الكيمياء الكمية[5]، وقد تم استخدامها لوصف الديناميكا الكمية للجزيئات حلقية الشكل مثل جزيء البنزين، ولقد تم حل معادلة شرود نغر ثلاثية الأبعاد باستخدام تحويل Kustaanheimo-Stiefel ، وهناك تطبيق آخر للكمونات غير المركزية وهو تفاعل بين أزواج النواة المشوهة [6] .الكمونات بدون تناظر كروي لها بعض التطبيقات في نظرية النانو بنيوية [7] . على سبيل المثال تفيد الكمونات غير المركزية في نظرية علوم المواد في وصف المرونة الميكروسكوبية، والحصول على ثوابت مرنة لبلورة مكعبة [8].

يوجد حاليا العديد من الدراسات في مجال الكمونات غير المركزية بعضها اعتمد فيها الطريقة التحليلية وأخرى اعتمد فيها الطرق التقريبية او بتقنيات رقمية [9] ، مثل طريقة التكرار العرضية تقريب Pekeris [10]، طريقة التحليل إلى عوامل [11]، حلول متعددة الحدود المتعامدة[12]، شكليات ميكانيكا الكم فائق التناظر (SUSYQM) [13] وتحويل لابلاس[14] .

وقد درست الحلول التحليلية الدقيقة للكمونات غير المركزية وتعميماتها في النسبية وغير النسبية لسنوات عديدة وهناك حاليا الكثير من الاعمال [15] [16] .

يتمحور هذا الموضوع حول معالجة مشكلة في ميكانيكا الكم غير النسبية من خلال حل معادلة شرود نغر في فضاء ثنائي الأبعاد في إطار الفضاء العادي.

اعتمدنا خطة تستوفي شروط العمل بكل جزئياته، انطلاقا من مقدمة وثلاث فصول وخاتمة على النحو التالي :

الفصل الأول: جاء بعنوان مدخل حول معادلة شرود نغر وتطرقنا فيه إلى جزئين الأول خصصناه للتعريف بهذه المعادلة وحلها في الإحداثيات الكروية .أما الثاني تكلمنا فيه عن بعض الكمونات غير المركزية .

الفصل الثاني: ركزنا فيه على حل معادلة شرود نغر مع هزاز توافقي في الفضاء ثنائي الأبعاد في الفضاء العادي .

الفصل الثالث : كان بعنوان حل معادلة شرود نغر مع هزاز توافقي زائد كمون ثنائي القطب في الإحداثيات القطبية حيث استخرجنا عبارة الطاقة والدالة الموجية .

الفصل الأول: مدخل عام حول معادلة

شرودينغر الخطية و الكمونات غير المركزية

تمهيد:

معادلة شرودينغر هي المعادلة الأساسية لميكانيكا الكم غير النسبية .فهي تلعب الدور الأساسي في ميكانيكا الكم مثل معادلة نيوتن في الميكانيكا الكلاسيكية ومعادلات ماكسويل في الكهرومغناطيسية. وتصف التطور الزماني والمكاني لحالة الجسم الكمومي. وهي عبارة عن معادلة تفاضلية تحتوي على مشتقات جزئية من الدرجة الأولى حينما تتعلق بالوقت ومعادلة من الدرجة الثانية حينما تتعلق بإحداثيات الفضاء [17]. تمت صياغتها نهاية عام 1925 ونشرها في بداية عام 1926 من طرف الفيزيائي النمساوي اروين شرودينغر [18]. في هذا الفصل نقوم بدراسة معادلة شرودينغر الثابتة في الكمونات المركزية، ثم شرح مختصر للكمونات غير المركزية التي تساعدنا في دراسة الفصول القادمة.

1.معادلة شرود ينغر:

الدالة الموجية تمثل حل معادلة شرود ينغر في النظام الكمي فهي مسلمة كمومية تصف حركة الجسيمات الكمومية، وتعطي كل المعلومات التي تخص الحالات الكمومية.

يجب أن تستوفي الدالة الموجية $\Psi(\vec{r},t)$ الشروط التالية:

- يجب أن تكون مستمرة مع $\vec{r}$.
- $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ يجب أن تكون مستمرة، ويتم تطبيق هذه القيود بشرط الحد من الحلول.
- يجب أن تكون منتظمة، هذا يعني أن الدالة الموجية تقترب من الصفر كما أن $\vec{r}$ يقترب من اللانهاية وهذا يعني:

$$\int \Psi^*(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t)\mathrm{d}^3r = \int\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2\mathrm{d}^3r = 1 \qquad \text{(I-1)}$$

$$P(\vec{r},t) = \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 \qquad \text{(I-2)}$$

ويمكن في هذه الحالة قراءة الكمية$|\Psi|^2$ بشكل مباشر على أنها الكثافة الفراغية لاحتمالية وجود الجسيم.

وعندما لا تعتمد كثافة الاحتمال على الزمن، نقول إن النظام موجود في حالة مستقرة [19].

الشكل العام لمعادلة شرود ينغر لنظام كمي تعطى بالعلاقة التالية :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r},t) \qquad \text{(I-3)}$$

وهذه معادلة تفاضلية جزئية تتضمن أربع متغيرات، هي الإحداثيات الثلاثة لموضع الجسم، يضاف إليها الزمن، وهي متغيرات منفصلة حينما لا تكون الطاقة دالة زمنية.

حيث :

- $\hbar$ ثابت بلانك
- H مؤثر الهاميلتون يصف الطاقة الكلية للنظام المدروس الذي يتم تحديدها من

خلال مجموع الطاقة الحركية E_c والطاقة الكامنة. عبارتها من الشكل التالي:

$$H(\vec{r},t) = E_c + V(\vec{r},t) \tag{I-4}$$

حيث: $E_c = \frac{P^2}{2m}$

لذلك لدراسة دالة الموجة $\Psi(r)$ للجسيم المتحرك في المجال التناظر المركزي $V(r)$ يجب علينا حل معادلة شرود نغر[20].

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\Psi = 0 \tag{I-5}$$

حيث:

- m كتلة الجسيم
- $V(r)$ الطاقة الكامنة
- $\Delta\Psi$ لابلاسيان لدالة الموجة عبارته كالتالي :

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \tag{I-6}$$

بحيث يتم كتابة لابلاسيان في الإحداثيات الكارتيزية بالشكل التالي :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

فيزيائيا معادلة شرود ينغر تعتبر معادلة تفاضلية ذات اشتقاقات جزئية لها حلول لقيم معينة للطاقة E، أو بمعنى آخر هي القيم المسموح بها للطاقة E، حيث تدعى بالقيم الذاتية، والحلول Ψ التي توافقها تدعى "بالدوال الذاتية".

يمكن كتابة هذه المعادلة من الشكل التالي:

$$H\Psi(r) = E\Psi(r) \tag{I-7}$$

H هو مؤثر الهاملتون المرتبط بالطاقة E :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \tag{I-8}$$

كمون المعادلة (I-5) يعتمد فقط على المسافة r، هذا يشير انه يمكننا تحويل الإحداثيات الديكارتية إلى الإحداثيات الكروية $\Psi(r) \to \Psi(\mathrm{r},\theta,\varphi)$ لهذا نقوم بالتذكير بالعلاقة بين التمثيلين من خلال التعريفات التالية:

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \;\; ; 0 \le r < \infty \\ \varphi = \tan^{-1}(x/y); 0 \le \varphi \le 2\pi \\ \theta = cos^{-1}(z/r); 0 \le \theta \le \pi \end{cases} \tag{I-9}$$

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\ \cos\varphi \end{cases} \tag{I-10}$$

حيث يأخذ لابلاسيان في الاحداثيات الكروية الشكل التالي:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{I-11}$$

فتصبح معادلة شرود ينغر بالشكل التالي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + \mathrm{V(r)}\right]\Psi(\mathrm{r},\theta,\varphi) = E\Psi(\mathrm{r},\theta,\varphi) \tag{I-12}$$

نلاحظ أن الحد الأول يعتمد على r فقط، لذلك باستعمال **فصل المتغيرات** نقوم بحل المعادلة (I-12).

وكخطوة أولى نقوم بكتابة دالة الموجة $\Psi(\mathrm{r},\theta,\varphi)$ على الشكل التالي:

$$\Psi(\mathrm{r},\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi) \tag{I-13}$$

بالتعويض في المعادلة (I-12) نجد

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\mathrm{V(r)}\right]R(r)Y(\theta,\varphi)=E\,R(r)Y(\theta,\varphi) \quad \text{(I-14)}$$

نقسم على $R(r)Y(\theta,\varphi)$، ونضرب في r^2، فنتحصل على:

$$\frac{1}{R(r)}\left[\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right)R(r)+\frac{2m_e}{\hbar^2}r^2\big(E-V(r)\big)R(r)\right]=-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=cst \quad \text{(I-15)}$$

نلاحظ أن:

بما ان الطرف الأيسر يعتمد فقط على **r** الطرف الأيمن يعتمد فقط على $\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}$ يمكن وضع الطرفين يساوي للثابت C

لأسباب فيزيائية (كمية)، نكتب ثابت الفصل C على الشكل $C=l(l+1)$.وهذا يقودنا إلى المعادلات التفاضلية التالية:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{2m_e}{\hbar^2}r^2\big(E-V(r)\big)R(r)=l(l+1)R(r) \quad \text{(I-16)}$$

$$-\frac{1}{\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=l(l+1)Y(\theta,\varphi) \quad \text{(I-17)}$$

المعادلة الأولى (I-16) تسمى **بالمعادلة القطرية** والمعادلة الثانية (I-17) **تسمى بالمعادلة الزاوية**، من الواضح أن حل المعادلة القطرية يعتمد على اختيار الكمون المركزي $V(r)$ بينما المعادلة الزاوية هي معادلة عامة صالحة لجميع الكمونات المركزية.

في معادلة شرودينغر القطرية التي تصف حركة جسيم غير نسبي، منغمس في الكمون المركزي $V(r)$ حيث يتم كتابة عبارة لابلاسيان في الإحداثيات الكروية على الشكل التالي:

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{L^2}{\hbar^2 \mathrm{r}^2} \quad \text{(I-18)}$$

حيث :

$$\mathrm{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \quad \text{(I-19)}$$

- L هو العزم الحركي المداري

من المعروف أن الدوال الذاتية ل L^2 هي دوال تسمى التوافقيات الكروية $Y_l^m(\theta,\varphi)$، لها قيم ذاتية تساوي $\hbar^2 l(l+1)$

حيث : $l=1,2,\ldots$ و m تتغير قيمته من $-l \le m \le +l$.اذن:

$$L^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \qquad \text{(I-20)}$$

لذلك تصبح معادلة شرود ينغر كما يلي :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right)+\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\right]\Psi(r,\theta,\varphi) = E\Psi(r,\theta,\varphi) \qquad \text{(I-21)}$$

اين:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right)+\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r) \qquad \text{(I-22)}$$

حيث نرى انه يتطابق فقط مع r، لذلك تكتب معادلة شرود ينغر من الشكل :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\right]R_{n,l}(r) = ER_{n,l}(r) \qquad \text{(I-23)}$$

نضع $S_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$ ومنه الدالة $S_{n,l}(r)$ تحقق المعادلة التفاضلية التالية :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\right]S_{n,l}(r) = ES_{n,l}(r) \qquad \text{(I-24)}$$

نلاحظ أن المعادلة (I-24) لها شكل نظام أحادي البعد إلا أن الطاقة الكامنة يضاف V لها المصطلح $\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}$ الذي يطلق عليه مصطلح **قوة الطرد المركزي** والتي تختفي عند $l=0$.

2.الكمونات غير المركزية:

في حالة تحرك الجسيم في الكمونات غير المركزية، من الافضل استخدام نظام الإحداثيات الكروية (نظام ثلاثي الابعاد) لحل معادلة شرود نغر.

تم طرح سؤال بطريقة طبيعية : ما هي الكمونات غير المركزية؟ للإجابة على هذا السؤال، من الضروري تحديد الكمونات المركزية باختصار، الكمون المركزي $V(r)$ هو جهد يعتمد فقط على المسافة r في أصل الإحداثيات لذلك يسمح لنا هذا التعريف بالقول إن الكمونات غير

المركزية هي دوال لا تعتمد فقط على نصف القطر r ، بل تعتمد كذلك على الزاوية القطبيةθ او الزاوية φ او الزاويتين معا في حالة ثلاثي الأبعاد.

الاعتماد على الكمونات غير المركزية $V(r,\theta,\varphi)$ في ثلاثة متغيرات تؤدي إلى دراسة معادلة شرود ينغر لإعطاء القارئ على الأقل فكرة عما سيأتي لاحقا في هذا الفصل التمهيدي. في هذا النظام وضعنا الشكل العام للهاملتون لجسيم الكتلة m والزخم p المتحرك في جهد من النوع غير المركزي $V(r,\theta,\varphi)$ ، ومستقلة عن الزمن.

3.أمثلة عن الكمونات غير المركزية :

هناك أنواع مختلفة من الكمونات غير المركزية التي تمت دراستها باستخدام طريقة تغيير المتغير، نذكر من بينها:

1.3 كمون Makarov :

يمكن استخدام هذه الإمكانات في كيمياء الكم والفيزياء النووية لوصف الجزيئات على شكل رنين، مثل البنزين والتفاعلات بين أزواج الانوية المشوهة. في الإحداثيات الكروية ، تكتب كمونات Makarov بالشكل التالي:

$$V(r,\theta) = -\frac{a}{\mathrm{r}} + \frac{b}{r^2\sin^2\theta} + \frac{c\cos\theta}{r^2\sin^2\theta} \qquad \text{(I-25)}$$

2.3 كمون Hartman :

نعرف كمون Hartman في الإحداثيات الكروية كما يلي :

$$V(r,\theta) = V_0\left(\frac{2r_0}{r} - \frac{r_0^2}{r^2\sin^2\theta}\right) \qquad \text{(I-26)}$$

- V_0 الحد الأدنى للكمون
- r_0 البعد الشعاعي

3.3 جهد الهزاز شبه التوافقي على شكل حلقة:

الكمونات الجزيئية على شكل حلقة هي كمونات غير مركزية ، تتكون من كمونات الهزاز التوافقي الكروي و كمونات إضافية أخرى. يمكن استخدام هذه الكمونات لوصف نموذج جزيئي على شكل رنين مثل البنزين الجزيئي والتفاعل بين الانوية المشوهة. وهي تستخدم في كيمياء الكم والفيزياء النووية. في السنوات الأخيرة التأثير النسبي للجسيمات الدقيقة في مجالات الكمونات للهزاز التوافقي غير الكروي أثار اهتماما كبيرا في الفيزياء وتم الحصول على نتائج مهمة .

تتكون كموناته من التراكب بين كمونات الهزاز التوافقي و كمونات دالة القوة السلبية، ثم أربع كمونات، بالإضافة إلى اثنين من الكمونات غير المركزية.

ونكتب هذا الكمون بالشكل التالي [21]:

$$V(r,\theta) = \frac{k}{2}r^2 + \frac{A}{r^2} + \frac{b}{r^2\sin^2\theta} + \frac{c\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta} \qquad \text{(I-27)}$$

حيث c ، b، A، Kهي معاملات حقيقية بدون أبعاد.

4.3 كمون Hautot :

يعرف كما يلي:

$$V(r,\theta) = V(r) + \frac{f(\theta)}{r^2} \qquad \text{(I-28)}$$

حيث $f(\theta)$ هي دالة للمتغير θ وقد قام بحل هذه الكمونات بطريقة تحليلية في الحالة الكلاسيكية أي معادلة نيوتن والحالة الكمية اللانسبية أي معادلة شرودينغر وهي اربعة كمونات مختلفة في الفضاء ثنائي البعد وثلاثة في الفضاء ثلاثي الابعاد

يمكن أن يكون لها على الأقل ثالثة تعبيرات مختلفة اعتمادا على θ في ثلاث أبعاد، وسبعة تعبيرات إذا كانت ثنائية الأبعاد.

5.3 كمون Kratzer على شكل حلقة مزدوجة :

تلعب كمونات Kratzer دورا مهما في تاريخ الكيمياء الجزيئية والكمية وقد تم استخدامها لوصف البنية والتفاعلات الجزيئية. بسبب أهميتها في مجال الفيزياء الجزيئية، كانت كمونات Kratzer موضوع العديد من الدراسات منذ تقديمها من قبل Kratzer في عام 1920 .

تلعب طاقات الاهتزازات المركزية k وطاقات الاهتزازات غير المركزية v للحالات الجزيئية ثنائية الذرة دورا مهما في دراسة حالات وهياكل الاهتزازات للأنظمة ثنائية الذرة [22].

في الإحداثيات الكروية، كمون Kratzer على شكل حلقة مزدوجة، الذي يصف الحركة الدورانية غير المركزية للجزيئات، يتم تعريفه على النحو التالي[22].

$$V(r,\theta) = -2D_e\left(\frac{r_e}{r} - \frac{1}{2}\frac{r_e^2}{r^2}\right) + \frac{b}{r^2\sin^2\theta} + \frac{a}{r^2\cos^2\theta} \qquad \text{(I-29)}$$

- D_e هي طاقة التفكك
- r_e هو البعد الفاصل بين النوى في حالة التوازن
- a و b هي معاملات بدون أبعاد

6.3 كمون ثنائي القطب الكهربائي :

هذا الكمون يظهر اكثيرا في الذرات متعددة الالكترونات وكذلك في الجزيئات ويعتبر تصحيح من الدرجة الأولى لكمون كولومب حيث إذا اعتبرنا نظام يتكون من شحنة نقطية q تحت تأثير شحنات ممتدة $\mathbf{Q} = \sum_j \boldsymbol{q_j}$ ($\boldsymbol{q_j}$ مجموع الشحنات النقطية) يتميز هذا الأخير بشحنة إجمالية غير صفرية وتوزيع غير متناظر كرويًا، يمكن لهذا النظام أن يأخذ كمثال أيون قطبي وشحنة نقطية، الكمونات الناتجة عن توزيع الشحنة $\boldsymbol{q_j}$ مكتوب على الشكل التالي:

$$V = \sum_j \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_j}{r_j} \qquad \text{(I-30)}$$

هنا q_j هي شحنة العنصر j^{th} مكون من $\mathbf{Q}$ و $\vec{r_j} = \overrightarrow{A_j M} = \overrightarrow{OM} - \overrightarrow{OA_j} = \vec{r} - \vec{a_i}$ هو موضع الشحنة النقطية q، ولقد عرفنا M على انه موضع الشحنة النقطية q (الذي يشار إليه بواسطة الشعاع $\vec{r}$) و A_j هو موضع $\boldsymbol{q_j}$ (الذي عرفناه بالشعاع $\vec{a_j}$) بالنسبة للمبدأ O. وعلى هذا نكتب :

$$V = \sum_j \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{\boldsymbol{q_j}}{|\vec{r} - \vec{a_j}|} = \sum_j \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q_j \left[\left(\vec{r} - \vec{a_j}\right)^2\right]^{-1/2}$$

$$= \sum_j \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q_j \left(\vec{r}^2 - 2\vec{r}.\vec{a_j} + \vec{a_j}^2\right)^{-1/2}$$

$$= \sum_j \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_j}{r}\left(1 - 2\frac{\vec{r}.\vec{a_j}}{\vec{r}^2} + \frac{\vec{a_j}^2}{\vec{r}^2}\right)^{-1/2} \qquad \text{(I-31)}$$

نفرض أن أبعاد الشحنة الممتدة Q صغيرة مقارنة بأبعاد النظام بأكمله الذي يتشكل من Q والشحنة النقطية q، بحيث نكتب $|\vec{r}| \ll |\vec{a_j}|$، وبالتالي يكون لدينا :

$$\left(1-2\frac{\vec{r}.\vec{a_j}}{\vec{r}^2}+\frac{\vec{a_j}^2}{\vec{r}^2}\right)^{-1/2} \simeq 1+\frac{\vec{r}.\vec{a_j}}{\vec{r}^2}+\mathcal{O}\frac{\vec{a_j}^2}{\vec{r}^2} \qquad \text{(I-32)}$$

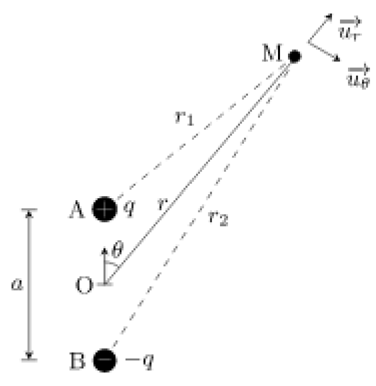
بالاحتفاظ فقط بالجذور من رتبة $\frac{\vec{a_j}}{\mathrm{r}}$:

$$V(r)=\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\sum_j\frac{q_j}{r}+\sum_{\mathrm{j}}\frac{a_j q_j\cos\theta_j}{\mathrm{r}^2}\right) \qquad \text{(I-33)}$$

الطرف الأول في هذه العبارة هو تفاعل كولومب بين الشحنة الكلية Q والشحنة النقطية المدروسة اما الطرف الثاني فهو التأثير الهندسي لعدم التناظر الكروي لتوزيع الشحنة Qالذي يمثل كمون ثنائي القطب الذي طوله هو المسافة بين مجموع الشحن السالبة ومجموع الشحن الموجبة ،ثنائي القطب غير النقي هو الذي مجموع شحنه غير معدوم وفي الأخير يأخذ العبارة التالية

$$V(r)=\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Q}{r}+\frac{D\cos\theta}{\mathrm{r}^2}\right) \qquad \text{(I-34)}$$

اين D هو طول ثنائي القطب و θ هي الزاوية بين ثنائي القطب والشعاع الرابط بين الشحنة المدروسة ومركز ثنائي القطب كما هو موضح في الشكل الموالي :



خاتمة:

من بين الكمونات اللامركزية السابقة كمونات يمكن حلها في فضاء ثلاثي الابعاد واخر في فضاء ثنائي الابعاد فقط كما وضح هوتو *Hautot* في اعماله، و أخرى ليس لها حل تحليلي انما حلول رقمية وبما انه ما يهمنا اكثر في حل معادلة شرودينغر هو الحلول التحليلية وبما انه ليس هناك حلول تحليلية لمعادلة شرودينغر لكمون ثنائي القطب مع كمون الهزاز التوافقي او كمون *coulomb* في الفضاء ثلاثي الابعاد ولهذا نكتفي في هذا العمل بحل معاذلة شرودينغر لجسم مشحون تحت تأثير كمون ثنائي القطب زائد كمون الهزاز التوافقي في الفضاء ثنائي البعد.

الفصل الثاني : حل معادلة شرودينغر الشعاعية في الفضاء العادي مع هزاز توافقي ثنائي البعد

تمهيد :

في الفيزياء وميكانيكا الكم، يصف الهزاز التوافقي الكمومي في ميكانيكا الكم مثلما يوصف الهزاز التوافقي في الميكانيكا الكلاسيكية حركة جسيم في جهد توافقي. ففي ميكانيكا الكم يعامل الجسيم على انه دالة موجية بعكس الميكانيكا لكلاسيكية التي تتعامل مع الجسيم كجسيم دون تغيير أيا من حالاته .فيشكل الهزاز التوافقي نموذجا مهما للأنظمة في الفيزياء الكمومية وهي تصف خواص حركة الجسيمات الصغيرة مثل الاكترون في جهد النواة الذرية .بواسطتها نستطيع وصف عدة من الخواص الفيزيائية لتلك الأنظمة الصغيرة بطريقة مقربة ناجحة، لم تستطع الميكانيكا الكلاسيكية (قوانين نيوتن مثلا) في معالجتها والآتيان بحلول صحيحة تتفق مع الواقع.

يعد الهزاز التوافقي ذو أهمية أساسية في الفيزياء حيث يصف تطور أي نظام فيزيائي بالقرب من موقع التوازن مما يجعله أداة تستخدم في العديد من المجالات كالكهرباء و الالكترونيات والبصريات والمواد المكثفة [23] .بينما في ميكانيكا الكم، نستطيع أن نعرف من خلال الهزاز التوافقي كيفية حل معادلة شرود نغر، وفي هذا الفصل نقوم بدراسة معادلة شرودينغر لنظام هزاز توافقي ثنائي البعد في مجال ميكانيكا الكم غير النسبية .

1.حل معادلة شرودينغر مع هزاز توافقي ثنائي البعد:

في هذا الجزء، نحاول التعامل مع نظام هزاز توافقي غير نسبي ثنائي البعد عن طريق حل معادلة شرود نغر الشعاعية التي تصف حركة جسيم m، تحت تأثير جهد مركزي.

عبارة الكمون المركزي كالتالي:

$$V(x,y) = \frac{1}{2}\,\mathrm{m}\omega^2(x^2+y^2)$$

معادلة شرود نغر للهزاز التوافقي تعطى بالشكل التالي :

$$\left\{\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\psi(\mathrm{x},y)\right\} = \mathrm{E}\psi(\mathrm{x},y) \qquad (\mathrm{II}.1)$$

$$\Rightarrow \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x}+\frac{\partial^2}{\partial y}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\right\}\Psi(\mathrm{x},y) = \mathrm{E}\Psi(\mathrm{x},y) \quad (\mathrm{II}.2)$$

حيث : $\Delta(x,y)=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}$

في هذه الحالة سنواجه مشكلة تعرقل حل هذه المعادلة وهي انه لا يمكننا فصل المتغيرات (x,y) عن بعضهم لان الطاقة الكامنة تعمد على r لهذا نقوم بتحويل الإحداثيات الكارتيزية (x,y) إلى الإحداثيات القطبية.

العلاقة بين الإحداثيات الديكارتية و القطبية كالتالي:

$x = \mathrm{r}\cos\varphi$

$y = \mathrm{r}\sin\varphi$

$x^2 + y^2 = \mathrm{r}^2$

بحيث يعطى مؤثر لابلاسيان في الإحداثيات القطبية :

$$\Delta=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \qquad (\mathrm{II}.3)$$

لحل هذه المعادلة نقوم بفصل الدالة الموجية إلى دالتين فرعيتين كما يلي :

$$\Psi(\mathrm{r},\varphi)=R(\mathrm{r})\Phi(\varphi) \qquad (\mathrm{II}.4)$$

حيث $R(\mathrm{r})$ و $\Phi(\varphi)$ تشكل الجزء القطري والجزء الزاوي من دالة الموجة

نعوض (II.3) و الدالة الموجية $\Psi(\mathrm{r},\varphi)$ (II.4) في معادلة شرودينغر (II.1) نجد :

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right\}\Psi(\mathrm{r})\Phi(\varphi)=ER(\mathrm{r})\Phi(\varphi) \quad (\mathrm{II}.5)$$

بضرب هذه المعادلة في $\frac{r^2}{\mathrm{R}(r)\Phi(\varphi)}$ سيكون لدينا:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{r^2}{\mathrm{R}}\frac{\partial^2\mathrm{R}(r)}{\partial r}+\frac{r}{R}\frac{\partial\mathrm{R}(r)}{\partial r}+\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2r^4-Er^2=0\right\} \quad (\mathrm{II}.6)$$

من اجل الفصل بين المتغيرات نضرب المعادلة(II.6) في $-\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}$ فنحصل على:

$$\left(\frac{r^2}{R}\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}+\frac{r}{R}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)-\frac{m^2\omega^2 r^4}{\hbar^2}+\frac{2mEr^2}{\hbar^2}=-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=m_l^2 \quad (II.7)$$

حيث يتم إعطاء الحل الزاوي $\Phi(\varphi)$ من خلال:

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-m_l^2 \quad (II.8)$$

يكون الحل من الشكل:

$$\Phi(\varphi)=Ae^{im\varphi} \quad (II.9)$$

ونظرا لأن احتمال وجود إلكترون يضل دون تغيير عند الزاوية φ بمقدار 2π وفقا لتعريف الاحتمال كما يلي:

$$|\Psi(r,\varphi)|^2=|\Psi(r,\varphi)+2\pi)|^2 \quad (II.10)$$

$$|R(r).\Phi(\varphi)|^2=|R(r).\Phi(\varphi+2\pi)|^2 \quad (II.11)$$

$$Ae^{im_l\varphi}=Ae^{im_l(\varphi+2\pi)} \quad (II.12)$$

من اجل حل المعادلة القطرية نضرب المعادلة(II.7) في $\frac{R}{r^2}$ فنجد :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{m_l^2}{r^2}+\frac{r^2}{a^4}-\alpha\right]R(r)=0 \quad (II.13)$$

$$a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad \alpha=\frac{2mE_n m_l}{\hbar^2} \quad (II.14)$$

للتخلص من المشتق الأول في المعادلة (II.9) قمنا بالتحويل التالي :

$$R(r)=\frac{1}{\sqrt{r}}f(r) \quad (II.15)$$

حيث:

$$\frac{\partial R(r)}{\partial r}=\frac{1}{\sqrt{r}}\left(\frac{\partial f(r)}{\partial r}-\frac{f(r)}{2r}\right) \quad (II.16)$$

$$\frac{\partial^2 \mathrm{R}(r)}{\partial \mathrm{r}^2} = \frac{1}{\sqrt{r}}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \left(\frac{3}{4r^2}\right) f(\mathrm{r})\right) \qquad (\mathrm{II}.17)$$

نعوض المعادلات (II.16) و(II.17) في (II.13) نحصل على :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{m_l^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - \frac{r^2}{a^2} + \alpha\right] f(r) = 0 \qquad (\mathrm{II}.18)$$

في هذه المرحلة نقوم بتغيير المتغير التالي $\zeta = \left(\frac{r}{a}\right)^2$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial \mathrm{r}} = \frac{2\mathrm{r}}{a^2} \qquad (\mathrm{II}.19)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathrm{r}} = \frac{2\mathrm{r}}{a^2}\frac{\partial f}{\partial \zeta} \qquad (\mathrm{II}.20)$$

$$\left(4\zeta\frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} + 2\frac{\partial f}{\partial \zeta}\right)\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = \frac{1}{a^2} \qquad (\mathrm{II}.21)$$

المعادلة (II.18) تصبح :

$$\left(\zeta\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{2}\frac{\left(m_l^2 - \frac{1}{4}\right)}{4\zeta} - \frac{\zeta}{4} - \frac{\alpha a^2}{4}\right) f(\zeta) \qquad (\mathrm{II}.22)$$

والآن للوصول إلى معادلة تفاضلية معروفة نستخدم التحويل التالي :

$$f(\zeta) = \mathrm{e}^{-\frac{\zeta}{2}}\zeta^{\mathrm{k}} w(\zeta) \qquad (\mathrm{II}.23)$$

حيث:

$$\frac{\partial f(\zeta)}{\partial \zeta} = \mathrm{e}^{-\frac{\zeta}{2}}\zeta^{\mathrm{k}}\left(\frac{\mathrm{k}}{\zeta} - \frac{1}{2} + \frac{\partial}{\partial \zeta}\right) w(\zeta) \qquad (\mathrm{II}.24)$$

$$\frac{\partial^2 f(\zeta)}{\partial \zeta^2} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}}\zeta^{\mathrm{k}}\left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \left(\frac{2\mathrm{k}}{\zeta} - 1\right)\frac{\partial}{\partial \zeta} + \left(\frac{\mathrm{k}^2 - \mathrm{k}}{\zeta^2} - \frac{\mathrm{k}}{\zeta} + \frac{1}{4}\right)\right)\mathrm{w}(\zeta) \qquad (\mathrm{II}.25)$$

نعوض (II.24) و(II.25) في المعادلة (II.22) نحصل على المعادلة التفاضلية التالية :

$$\left[\zeta\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}+\left(2\mathrm{k}+\frac{1}{2}-\zeta\right)\frac{\partial}{\partial\zeta}+\left(\mathrm{k}\left(\mathrm{k}-\frac{1}{2}\right)-\frac{\left(m_l^2-\frac{1}{4}\right)}{4}\right)\frac{1}{\zeta}+\frac{\alpha a^2}{4}-\mathrm{k}-\frac{1}{4}\right]\mathrm{w}(\zeta) \quad (\mathrm{II}.26)$$

$$n=\frac{\alpha a^2}{4}-\mathrm{k}-\frac{1}{4} \quad \text{و} \quad \mathrm{k}\left(\mathrm{k}-\frac{1}{2}\right)-\frac{\left(m_l^2-\frac{1}{4}\right)}{4}=0 \quad (\mathrm{II}.27)$$

في هذه الخطوة، يمكننا تحديد الثابت k من الشرط الثاني (II.27) كما هو موضح :

$$4\mathrm{k}^2-2k-\left(m_l^2-\frac{1}{4}\right)=0 \quad (\mathrm{II}.28)$$

حيث تتم حلول هذه المعادلة بواسطة :

$$k_1=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+m_l\right) \quad , \quad k_2=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-m_l\right) \quad (\mathrm{II}.29)$$

عن طريق الاختيار المناسب لقيمة الثابت k في (II.29)، من اللافت للنظر يجب أن تكون $f(\zeta)$ فردية عند $\zeta=0$ هذا يعني ان القيمة المقبولة لقيمة k هي :

$$n=\frac{\alpha a^2}{4}-\mathrm{k}-\frac{1}{4} \quad , \quad k_1=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+m_l\right) \quad (\mathrm{II}.30)$$

لتحقيق التعبير عن طيف الطاقة لهذا النظام، نعوض المعادلة (II.14) في (II.30) فتكون لدينا النتيجة التالية [23]:

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n},m_l}=\hbar\omega(2n+m_l+1) \quad (\mathrm{II}.31)$$

حل المعادلة (II.26) من نوع

$$w(\zeta)=CF(-n,m_l+1,\zeta) \quad (\mathrm{II}.32)$$

لذلك يمكن كتابة المعادلة(II.23) على النحو التالي :

$$f(r)=Ce^{-\frac{r^2}{2a^2}}\left(\frac{r}{a}\right)^{2k}F\left(-n,m_l+1,\frac{r^2}{a^2}\right) \quad (\mathrm{II}.33)$$

فيصبح الحل القطري للنظام من الشكل :

$$R(r)=\frac{\mathrm{C}}{a^{2k}}e^{-\frac{r^2}{2a^2}}r^{\left(2k-\frac{1}{2}\right)}F\left(-n,m_l+1,\frac{r^2}{a^2}\right) \qquad \text{(II.34)}$$

وأخيرا يتم كتابة الدالة الموجية على النحو التالي :

$$\Psi(r,\varphi)=\frac{\mathrm{C}}{a^{2k}}e^{im_l\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{r^2}{2a^2}}\,r^{\left(2k-\frac{1}{2}\right)}F\left(-n,m_l+1,\frac{r^2}{a^2}\right) \qquad \text{(II.35)}$$

الفصل الثالث :حل معادلة شرودينغر في الفضاء العادي مع هزاز توافقي

زائدكمون ثنائي القطب في الإحداثيات القطبية

تمهيد :

حل معادلة شرود ينغر مهم لدراسة الذرات والجزيئات، ومع ذلك فان الأنظمة التي توجد لها حلول تحليلية بواسطة معادلة شرود ينغر محدودة للغاية وأغلبيتها كمونات غير مركزية ومنذ ذلك الحين اهتم الباحثين في دراسة الكمونات غير المركزية للبحث عن نماذج تقريبية لهذه الأنظمة الفيزيائية وعلى الرغم من هذه التقريبات لم يتم حل سوى القليل من الكمونات بشكل تحليلي [24].

الكمون غير المركزي الأبسط هو ثنائي القطب $V(r,\theta)=\frac{D_\theta}{r^2}\cos\theta$ درس على نطاق واسع في كل من الفيزياء الذرية والجزيئية والكيمياء وعلم الأحياء وقد جذب اهتمام الباحثين نظرا لوجود أدلة تجريبية تنص على انه لا يمكن أن نتحصل على حالات مرتبطة بهذا الكمون إلا إذا كان المعامل D_θ أكبر من القيمة الحرجة، اتبعت الدراسات التجريبية هذه النتائج وأكدتها على الرغم من عدم وجود حلول تحليلية لهذا النظام [24].

ولتأكيد هذه النتائج نقوم في هذا العمل على البحث على تأثير كمون ثنائي القطب الكهربائي على مستويات الطاقة لجسم مشحون داخل كمون هزاز توافقي لهذا نقوم بحل معادلة شرود ينغر مع هزاز توافقي بالإضافة إلى كمون ثنائي القطب في الفضاء العادي في الإحداثيات القطبية.

1.حل معادلة شرودينغر مع هزاز توافقي زائد كمون ثنائي القطب في الإحداثيات القطبية:

يعطى كمون ثنائي القطب الكهربائي زائد كمون الهزاز التوافقي في الفضاء ثنائي البعد بالشكل التالي :

$$V(r,\theta)=\frac{1}{2}m_e\omega^2r^2+\frac{D_\theta}{r^2}\cos\theta$$

تكتب معادلة شرود ينغر لجسم مشحون تحت تأثير الكمون $V(r,\theta)$ على الشكل التالي :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{1}{2}m_e\omega^2r^2+\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{D_\theta}{r^2}cos\,\theta\right]\Psi(r,\theta)=E\Psi(r,\theta) \qquad \text{(III-1)}$$

لحل هذه المعدلة نتبع طريقة فصل المتغيرات ولهذا نكتبها في الاحداثيات القطبية

نقسم(III-1) على $\frac{\hbar^2}{2m}$ فنتحصل على معادلة شرود ينغر من الشكل :

$$\left[\Delta - \frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{2 q m_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 r^2}\cos\theta\right]\Psi(r,\theta) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} E\Psi(r,\theta) \qquad \text{(III-2)}$$

في الاحداثيات القطبية مؤثر لابلاسيان يكتب بالشكل :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

نعوض بعبارة لابلاسيان فتصبح المعادلة (III-2) من الشكل التالي :

(III-3)

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{2 q m_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 r^2}\cos\theta\right]\Psi(r,\theta) = \frac{2m_e}{\hbar^2} E\Psi(r,\theta)$$

بفصل المتغيرات نقوم بتبسيط المعادلة(III-3) لنتحصل على معادلة من الشكل :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2} r^2\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2 q m_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 r^2}\cos\theta\right)\right]\Psi(r,\theta) = \frac{2m_e}{\hbar^2} E\Psi(r,\theta) \text{(III-4)}$$

لحل هذه المعادلة نكتب دالة الحالة على الشكل $\Psi(r,\theta) = r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)$ لفصل المتغيرات وتقسيم المعادلة الى قسمين فنتحصل على المعادلة التالية :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2 w^2}{\hbar^2} r^2\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2 q m_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}\cos\theta\right)\right] r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)$$
$$= -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(r,\theta) r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta) \qquad \text{(III-5)}$$

نقوم بحساب مشقات دالة الموجة $\Psi(r,\theta) = r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)$:

نحسب المشتقة الثانية بالنسبة لـ θ :

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\left(r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)\right) = r^{-1/2}R(r)\frac{\partial^2\Phi(\theta)}{\partial \theta^2} \qquad \text{(III-6)}$$

نحسب المشتقة الأولى بالنسبة لـ r :

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)\right) = -\frac{1}{2} r^{-\frac{3}{2}} R(r)\Phi(\theta) + r^{-1/2}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta) \qquad \text{(III-7)}$$

نحسب المشتقة الثانية بالنسبة لـ r :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)\right)=\frac{\partial}{\partial r}\left(-\frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}R(r)\Phi(\theta)+r^{-1/2}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta)\right) \qquad \text{(III-8)}$$

$$=\frac{3}{4}r^{\frac{-5}{2}}R(r)\Phi(\theta)-\frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}\frac{\partial R(r)}{\partial r}-\frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta)+r^{-1/2}\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}\Phi(\theta)$$

نقوم بتبسيط المعادلة السابقة (III-8) فتتحصل على :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)\right)=\frac{3}{4}r^{\frac{-5}{2}}R(r)\Phi(\theta)-r^{-\frac{3}{2}}\frac{\partial R(r)}{\partial r}+\quad r^{-1/2}\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}\Phi(\theta) \qquad \text{(III-9)}$$

نعوض المشتقات (III-6) و(III-9) في المعادلة (III-5) :

$$\left[\frac{3}{4}r^{\frac{-5}{2}}R(r)\Phi(\theta)-r^{-\frac{3}{2}}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta)+r^{-1/2}\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}\Phi(\theta)+\frac{1}{r}-\frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}R(r)\Phi(\theta)+r^{-1/2}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta)-\left(\frac{m_e^2w^2}{\hbar^2}r^2\right)r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)\right]+\frac{1}{r^2}\left[r^{-1/2}R(r)\frac{\partial^2\Phi(\theta)}{\partial\theta^2}-\left(\frac{2qm_eD_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)\right]=-\frac{2m_e}{\hbar^2}E\Psi(r,\theta)r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta) \qquad \text{(III-10)}$$

نقسم المعادلة (III-10) على $r^{-1/2}$:

(III-11)

$$\left[\frac{3}{4}r^{-2}R(r)\Phi(\theta)-r^{-1}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta)+\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}R(r)\Phi(\theta)-\frac{1}{2}r^{-2}R(r)\Phi(\theta)+r^{-1}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\Phi(\theta)-\left(\frac{m_e^2w^2}{\hbar^2}r^2\right)R(r)\Phi(\theta)\right]+\frac{1}{r^2}\left[R(r)\frac{\partial^2\Phi(\theta)}{\partial\theta^2}-\left(\frac{2qm_eD_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)R(r)\Phi(\theta)\right]=-\frac{2m_e}{\hbar^2}E\Psi(r,\theta)R(r)\Phi(\theta)$$

$$\left[\frac{1}{4}r^{-2}R(r)\Phi(\theta)+\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}R(r)\Phi(\theta)-\left(\frac{m_e^2w^2}{\hbar^2}r^2\right)R(r)\Phi(\theta)+\frac{2m_e}{\hbar^2}ER(r)\Phi(\theta)\right]+\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2\Phi(\theta)}{\partial\theta^2}R(r)-\left(\frac{2qm_eD_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)R(r)\Phi(\theta)\right] \qquad \text{(III -12)}$$

نضرب المعادلة (III-12) في r^2 ونقسم على $R(r)\Phi(\theta)$:

$$\left[\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{1}{4}R(r) - \left(\frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2}r^2\right)R(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2}ER(r)\right]\frac{r^2}{R(r)} +$$

$$\left[\frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} - \left(\frac{2qm_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)\Phi(\theta)\right]\frac{1}{\Phi(\theta)} = 0 \qquad \text{(III-13)}$$

نعيد كتابة المعادلة على النحو التالي :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{1}{4} - \left(\frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2}r^2\right) + \frac{2m_e}{\hbar^2}E\right)R(r)\right]\frac{r^2}{R(r)} =$$

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \left(\frac{2qm_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)\right)\Phi(\theta)\right]\frac{1}{\Phi(\theta)} = cst \qquad \text{(III-14)}$$

بما ان طرفي المعادلة كل واحد منهما يتعلق بمتغير واحد ومنه يمكن مساواتهما بثابت نسميه ثابت الفصل ونرمز له بالرمز E_θ وبالتالي نقسم المعادلة (III-14) إلى قسمين ونساوي طرفي المعادلتين بـ E_θ المعادلة الأولى تمثل الجزء الزاوي والمعادلة الثانية تمثل الجزء الشعاعي :

- **الجزء الزاوي :**

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \left(\frac{2qm_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)\right)\Phi(\theta) = E_\theta\Phi(\theta) \qquad \text{(III-15)}$$

- **الجزء القطري :**

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{1}{4} - \left(\frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2}r^2\right) + \frac{2m_e}{\hbar^2}E\right)R(r) = \frac{E_\theta}{r^2}R(r) \qquad \text{(III-16)}$$

1.1 حل معادلة الجزء الزاوي :

نضع :

$$\left(\frac{\partial^2 \Phi(\theta)}{\partial \theta^2} - \left(E_\theta + \frac{2qm_e D_\theta}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cos\theta\right)\Phi(\theta)\right) = 0 \qquad \text{(III-17)}$$

تكتب المعادلة على شكل معادلة ***Mathieu*** باستعمال استبدال المتغيرات التالية :

$$\theta = 2z\,, a = -4\mathrm{E}_{\theta}\,, p = \frac{q m_e D_{\theta}}{\pi \varepsilon_0 \hbar^2} \tag{III-18}$$

فتصبح المعادلة من الشكل التالي :

$$\frac{1}{4}\frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial \theta^2} + \left[\frac{1}{4}a - \frac{1}{2}p\cos 2z\right]\Phi(z) = 0 \tag{III-19}$$

نضرب المعادلة (III-19) في 4 فتتحصل على المعادلة من الشكل التالي :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + (a - 2p\cos 2z)\right]\Phi(z) = 0 \tag{III-20}$$

نلاحظ أن دور الزاوية θ يساوي 2π ومنه حلول معادلة ***Mathieu*** دورية لأن z لها π كدور. وبالتالي حلول هذه المعادلة هي دوال جيب التمام الناقص $ce_{2\mathrm{m}}(\mathrm{z})$ وجيب الناقص $se_{2\mathrm{m}+2}(\mathrm{z})$ وفق نظرية ***foquet*** (أو نظرية *Bloch* **بلوخ**)،من اجل كل قيمة عديمة الأبعاد p، الحلول دورية فقط من اجل قيم المحددة لـ a والتي تعرف بالقيم المميزة .نرمز للقيم المتعلقة بجيب التمام الناقص بالرمز $a(2m,p)$ أو $a(2m)$ وتلك المتعلقة بجيب الناقص بواسطة الرمز $b(2m,p)$ أو $b(2m)$ [24] .

بشكل عام لا يوجد تعبير تحليلي لهذه القيم المميزة لـ ***Mathieu***، فهي تعطى عموما عدديا أو بيانيا .ومع ذلك من هذه القيم يمكننا استخراج حلول المعادلة الزاوية التي يمكن استخدامها بعد ذلك للحصول على الحل الشعاعي، وهذا بكتابة التعبيرات التحليلية التقريبية للقيم الصغيرة والكبيرة لـ p. فيمكن التعبير عن a وb عند $\mathrm{m} > 3$ حيث $l = 4m^2 - 1$ [25] .

$$a_{2\mathrm{m}} = b_{2\mathrm{m}} = 4m^2 + \frac{1}{2l}p^2 + \frac{20m^2+7}{32l^3(l-3)}p^4 + \frac{36m^4+232m^2+29}{64l^5(l-3)(l-8)}p^6 + \mathcal{O}(p^6) \tag{III-21}$$

معاملات سلسلة الطاقة $a_{2\mathrm{m}}(p)$ و $b_{2\mathrm{m}}(p)$ تبقى نفسها حتى نصل للشرط $p^{2\mathrm{m}-2}$ [25] .

إضافة إلى ذلك، لدينا كثير حدود مماثل عند $m < 3$، ولكن مع معاملات مختلفة عن $a\acute{}s$ و$b\acute{}s$ [25] .

نلاحظ هنا، انه لا يوجد حل جيبي من أجل m=0، وبالتالي لا يوجد $b(m=0)$ [25] .

عندما تكون قيم p كبيرة، فتحصل على كثير حدود من الشكل التالي :

حيث : (k=2n+1)

$$a_{\mathrm{n}} = \mathrm{b}_{\mathrm{n+1}} = -2p + 2kp^{1/2} - \frac{1}{8}[k^2+1] - \frac{1}{2^7 p^{1/2}}[k^3+3k] - \frac{1}{2^{12}p}[5k^4+34k^2+9] + \mathcal{O}\left(p^{-3/2}\right) \tag{III-22}$$

في الأخير، من الآن فصاعدا لتبسيط الكتابة نستخدم الترميز $c_{2\mathrm{m}}(\mathrm{p})$ لكل من القيمتين المميزتين $a_{2\mathrm{m}}(p)$ و $b_{2\mathrm{m}}(p)$ [25] .

باستخدام التعريفات والعلاقات السابقة $p = \frac{4m_e D_\theta}{\hbar^2}$ و $a = -4\mathrm{E}_\theta$ لنتحصل على قيمة ثابت الفصل E_θ بدلالة معامل ثنائي القطب D_θ [24] .

$$E_\theta^{2m} = -\frac{1}{4}\mathrm{c}_{2\mathrm{m}}\left(\frac{q m_e D_\theta}{\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right) \tag{III-23}$$

نرى انه عند الحد $p \to 0$ (أو $D_\theta \to 0$) يكون لمعادلة ***Mathieu*** كحلول $(\cos m/2)$.

حيث : $a = -4\mathrm{E}_\theta$

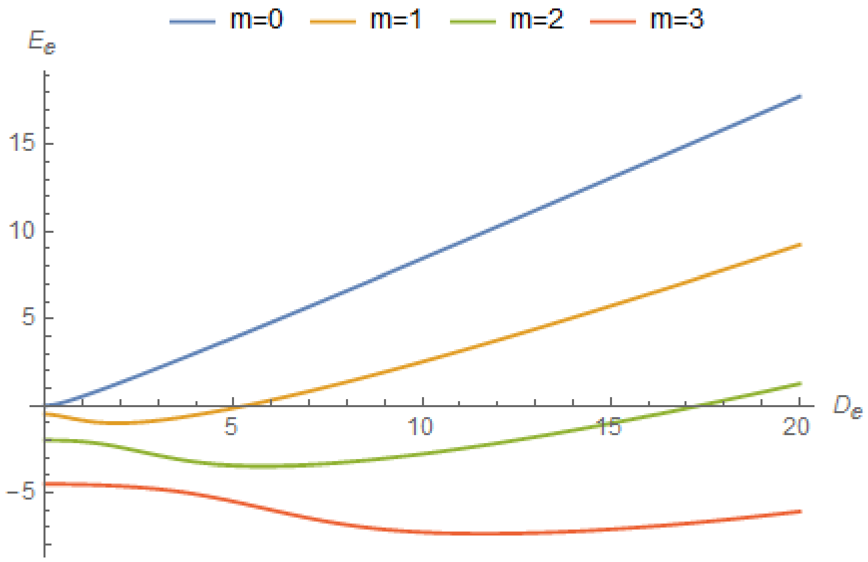
وبالتالي يمكن كتابة القيم المميزة في جميع الحالات بالصيغة التالية :

$$a_{2\mathrm{m}} = 4m^2\mathrm{P}_\mathrm{m}(p) \tag{III-24}$$

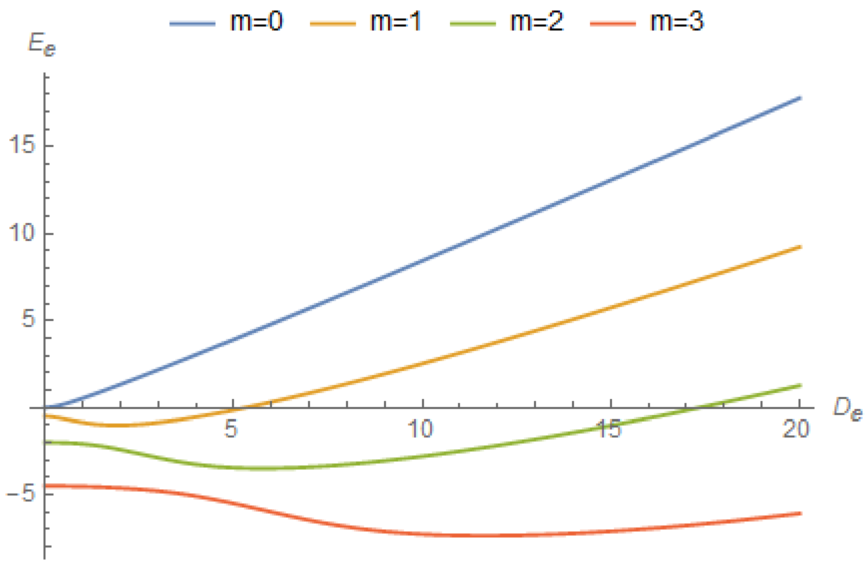
كما يمكن أن نكتب الحل الزاوي بالنسبة للقيم الصغيرة لـ D_θ (أو p) بالشكل التالي [25] :

$$E_\theta^{2m} = -m^2 + \mathrm{P}_\mathrm{m}(D_\theta) \tag{III-25}$$

حيث أن $\mathrm{P}_\mathrm{m}(p)$ و $\mathrm{P}_\mathrm{m}(D_\theta)$ هي عبارة عن كثير حدود مكتوبة من نفس القوى الزوجية لـ p و D_θ .



الشكل 1: E_θ بدلالة θ في حالة $a_{2m}(p)$



الشكل 2: E_θ بدلالة θ في حالة $b_{2m}(p)$

2.1 حل معادلة الجزء القطري :

يصبح شكل المعادلة (III-16) كالتالي :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\left(E_\theta-\frac{1}{4}\right)\frac{1}{r^2}-\left(\frac{m_e^2 w^2}{\hbar^2}r^2\right)+\frac{2m_e}{\hbar^2}E\right)R(r)=0 \qquad \text{(III-26)}$$

نلاحظ أن، شكل المعادلة (III-26) يطابق شكل المعادلة القطرية في الفصل السابق (II.18) :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{m_l^2-\frac{1}{4}}{r^2}-\frac{r^2}{a^2}+\alpha\right]f(r)=0$$

وعليه، نتبع نفس طريقة حل المعادلة (II.18) لحل الجزء القطري للمعادلة (III-26) . فيكون الحل كالتالي :

$$\mathrm{R}(r)=\frac{\mathrm{N}_r}{a^{2k}}\mathrm{e}^{-\frac{r^2}{2a^2}}\ r^{(2k)}F\left(-n,m_l+1,\frac{r^2}{a^2}\right) \qquad \text{(III-27)}$$

حيث :

$$,m_l=\sqrt{-\mathrm{E}_\theta}\ ,\ a=\frac{\hbar}{mw}\ ,\ \alpha=\frac{2m_e}{\hbar^2}E$$

والطاقة المرافقة لهذا الحل هي :

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n_r},m}=\hbar\omega\left(2n_r+\sqrt{-\mathrm{E}_\theta}+1\right) \qquad \text{(III-28)}$$

باستعمال العلاقة (III-27) تصبح الطاقة بالشكل :

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n_r},m}=\hbar\omega\left(2n_r+\sqrt{\frac{1}{4}\mathrm{c}_{2\mathrm{m}}\left(\frac{qm_eD_\theta}{\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)}+1\right) \qquad \text{(III-29)}$$

الآن نحاول كتابة عبارة الطاقة بدلالة الرقم الكمي الأساسي m ولهذا نستعمل النهاية $D_\theta=0$ التي تؤول إلى حالة هزاز توافقي أي $\frac{1}{4}\mathrm{c}_{2\mathrm{m}}=|m|$، فتصبح طاقة الهزاز التوافقي بالشكل التالي :

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n_r},m}=\hbar\omega(2n_r+|m|+1) \qquad \text{(III-30)}$$

حيث :

$$n_r=0,1,2,\ldots\ , \qquad m=0,1,2,\ldots$$

وبمقارنتها بعبارة الطاقة $E=\hbar\omega(n+1)$ نجد :

$$\hbar\omega(2n_r+|m|+1)=\hbar\omega(n+1)$$

$$2n_r+|m|=n$$

$$2n_r = n - |m| \tag{III-31}$$

بتعويض (III-31) في (III-30) نتحصل على عبارة الطاقة بالشكل التالي :

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n_r},m} = \hbar\omega\left(n - |m| + \sqrt{-\mathrm{E}_\theta} + 1\right) \tag{III-32}$$

بالنسبة لدالة الحالة التي أعطيت بالعبارة $\Psi(r,\theta) = r^{-1/2}R(r)\Phi(\theta)$ نعوض كل من $R(r)$ و $\Phi(\theta)$ فنجد

$$\Psi(r,\theta) = \frac{\mathrm{N}}{a^{2k}}\Phi(\theta)\mathrm{e}^{-\frac{r^2}{2a^2}} r^{\left(2k-\frac{1}{2}\right)} F\left(-n, \sqrt{-\mathrm{E}_\theta} + 1, \frac{r^2}{a^2}\right) \tag{III-33}$$

حيث :

$$a = \frac{\hbar}{mw} \quad , \quad \alpha = \frac{2m_e}{\hbar^2}E$$

ولتحديد ثابت التقنين N، نعوض هذه العبارة في شرط التقنين $\int |\Psi(r,\theta)|^2\, rdrd\theta = 1$ حيث جالة ماتيو $\Phi(\theta)$ هي مقننة بالتعريف [26]. ونستعمل كثير حدود ***Laguerre*** من الدرجة n من العلاقة [27]:

$$L_{\mathrm{n}}^{(2\alpha-1/2)}\left(\frac{r^2}{a^2}\right) = \frac{(n+2\alpha-1/2)!}{n!(2\alpha-1/2)!}\, F_1\left(-n, 2\alpha + \frac{1}{2}, \frac{r^2}{a^2}\right) \tag{III-34}$$

ومع التعريف [28]:

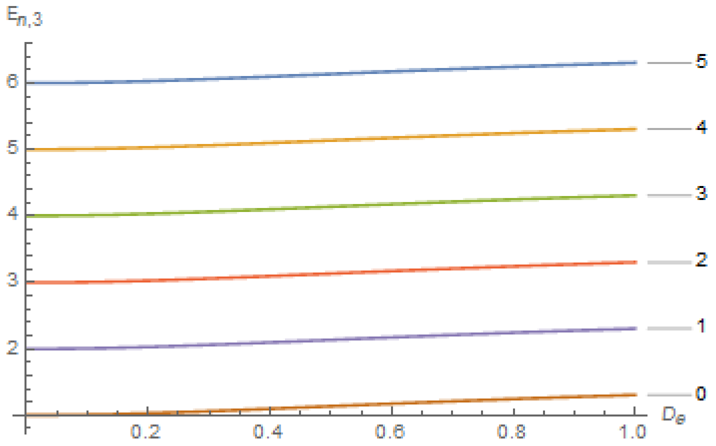
$$\int_0^\infty q^{k+1/2}e^{-q}L_n^k L_m^k(q)dq = \frac{\Gamma(n+k+1)^2\Gamma(m+k+1)\Gamma(k+3/2)\Gamma(m-1/2)}{n!m!\Gamma(k+1)\Gamma(-1/2)} \times$$

$$F_1(-n, k+3/2\,, 3/2\,; k+1, -m+3/2\,; 1) \tag{III-35}$$

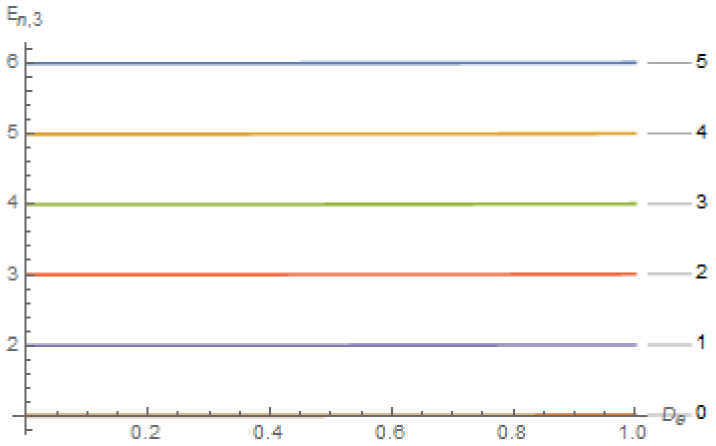
فتحصل على الصيغة التالية لثابت التقنين:

$$N = \frac{(n+2\alpha-1/2)!}{(2\alpha-1/2)!\alpha\Gamma(n+2\alpha+1/2)} \times$$

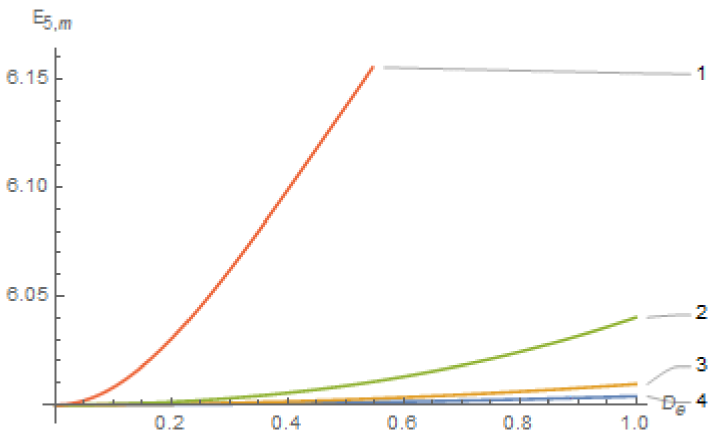
$$\left[\frac{2\Gamma(2\alpha+1/2)\Gamma(-1/2)}{\Gamma(n+2\alpha+1/2)\Gamma(2\alpha+1)\Gamma(n-1/2)\,{}_3F_2(-n,2\alpha+1,3/2,2\alpha+1/2,-n+3/2;1)}\right]^{1/2} \tag{III-36}$$



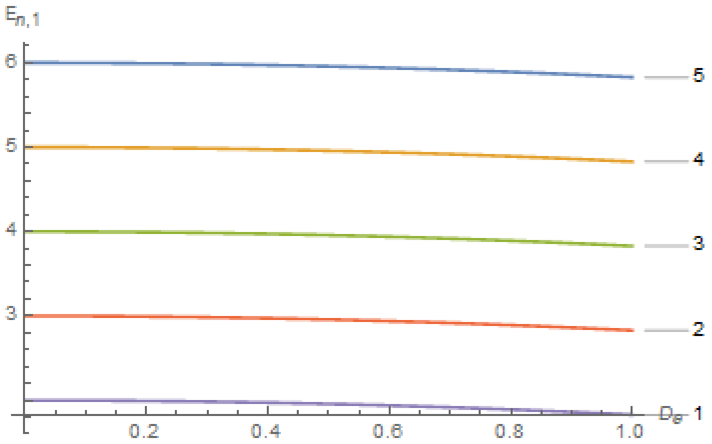
الشكل 3: $\mathrm{E}_{n,1}$ بدلالة D_θ في حالة $a_{2m}(p)$



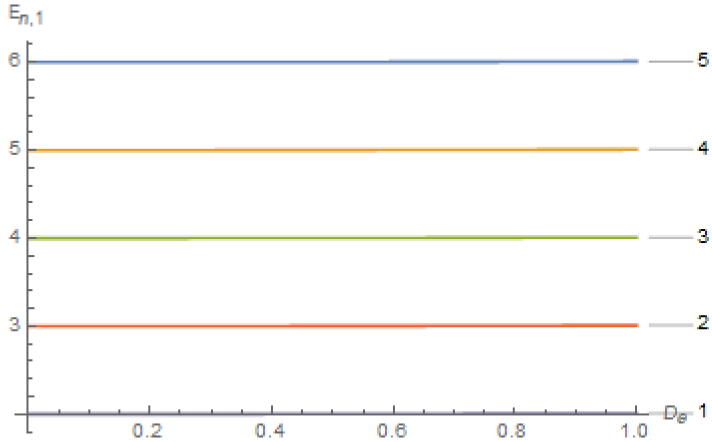
الشكل 4: $\mathrm{E}_{n,3}$ بدلالة D_θ في حالة $b_{2m}(p)$



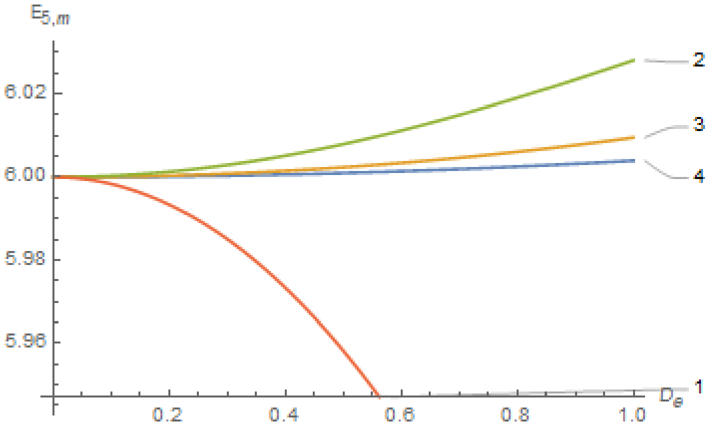
الشكل 5: $\mathrm{E}_{5,m}$ بدلالة D_θ في حالة $a_{2m}(p)$



الشكل 6: $\mathrm{E_{n,1}}$ بدلالة D_θ في حالة $a_{2\mathrm{m}}(\boldsymbol{p})$



الشكل 7: $\mathrm{E_{n,3}}$ بدلالة D_θ في حالة $b_{2\mathrm{m}}(p)$



الشكل 8: $\mathrm{E}_{5,m}$ بدلالة D_θ في حالة $b_{2\mathrm{m}}(p)$

المناقشة

نلاحظ، من عبارة الطاقة لنظام يتكون من جسم مشحون داخل كمون يتكون من كمون ثنائي القطب وكمون هزاز توافقي وبالمقارنة بطاقة هزاز توافقي فقط ان وجود ثنائي القطب ادى الى انحلال الطاقة أي كل مستوى طاقوي n يتحلل الى تحت مستويات طاقوية معرفة بالرقم m .

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n_r},m} = \hbar\omega\left(n - |m| + \sqrt{-\mathrm{E}_\theta} + 1\right)$$

لكون أن الطاقة يجب ان تكون لها قيم حقيقية يستلزم أن ثابت الفصل يجب أن يكون سالب أي $\mathrm{E}_\theta < 0$، وهذا يستلزم أن القيم المميزة يجب ان تكون موجبة وهذا يعطي شروط على طول ثنائي القطب D. ولكي تكون هناك حالات طاقة مرتبطة هذا يستلزم ان طول ثنائي القطب D يجب ان لا يتخطى قيم حدية D_{crit} معرفة بالشرط $\mathrm{E}_\theta = 0$ وهي موضحة في الجدول التالي (هذه القيم محسوبة باستعمال نظام الوحدات الذرية لريدبارغ $2m_e = \hbar = e^2/2 = 4\pi\varepsilon_0 = 1$) .

m	0	1	2	3	4	5	6	7
$\mathrm{D_{crit}}$	0,000	7,530	24,547	51,285	87,746	133,930	189,837	255,468

الجدول 1 : القيم الحرجة للعزم الزاوي D_θ

كذلك نلاحظ، من خلال المنحنيات السابقة أن وجود ثنائي القطب يؤثر على مستويات الطاقة للهزاز التوافقي حيث يقوم بالرفع من قيمتها في حالة الحلول $ce_{2\mathrm{m}}(D_\theta)$، ويخفض من قيمتها في حالة الحلول $se_{2\mathrm{m}+2}(D_\theta)$.

خاتمة عامة

خاتمة عامة:

في هذا العمل، قمنا بإجراء دراسة كمية غير نسبية لكمون ثنائي القطب زائد كمون الهزاز التوافقي في فضاء ثنائي البعد، حيث قمنا بحل معادلة شرودينغر حل تحليلي وهذا بكتابتها في الاحداثيات القطبية .لتسهيل فصل المتغيرات أين تحصلنا على معادلتين المعادلة الزاوية كان شكلها شكل معادلة Mathieu وبحلها تحصلنا على ثابت الفصل كقيمة ذاتية والذي يكتب بواسطة القيم المميزة لماثيو ودالة Mathieu كدالة ذاتية .فاستعملنا ثابت الفصل لحل المعادلة القطرية التي كانت على شكل معادلة فائقة الهندسية وحلها اعطانا طيف الطاقة حيث وجدنا أن ثنائي القطب قد أثر على مستويات الطاقة للهزاز التوافقي حيث أدى الى انحلالها الى تحت مستويات معرفة بالرقم الكمي m .وكذلك لا توجد قيم للطاقة من اجل كل القيم للعزم الزاوي لثنائي القطب وانما من اجل قيم معينة تكون اقل من قيم حدية D_{crit} .

وكذلك لاحظنا، أن ثنائي القطب يغير من قيم الطاقة للهزاز التوافقي أما بالزيادة في حالة الحلول $ce_{2\mathrm{m}}(D_\theta)$ الناقص او بالنقصان في حالة الحلول $se_{2\mathrm{m}+2}(D_\theta)$.

قائمة المراجع والمصادر

قائمة المراجع والمصادر

[1]- M.Heddar, Quantum Studies of Some Non-Central Potentials, thèse de doctorat, université Mohamed Khider-Biskra, (2021).

[2]- Makarov A.A. et al., A systematic search for nonrelativistic systems with dynamical symmetries, Nuovo Cimento A 52 1061 (1967) .

[3]- Hertmann Hartmann Die Bewegung eines K" orpers in einem ringf" ormigen Potentialfeld, Theor. Chim. Acta 24, 201 (1972) .

[4]- AndrÈ Hautot Exact motion in noncentral electric Öelds, J. Math. Phys. 14, 1320 (1973) .

[5]- M. Kibler, and T. Negadi, Int. J. Quant. Chem. 26, 405 (1984).

[6]- Z. M. Cang, and W. Z. Bang, Chin. Phys. 16, 1863 (2007).

[7]- J. L. Katz, A. Misra, P. Spencer, Y. Wang, S. Bumrerraj, T. Nomurrad, S. Eppell and M.Tabib-Azar, Mater. Sci. Eng. C 27, 450 (2007).

[8]- and M. P. Anderson, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2, 53 (1994).

[9]- Beta Nur Pratiwi, A Suparmi, C CariI and Sofyan Husein Pramana ñJ. Phys. (2017) 88: 25 .

[10]- M. Amirfakhriana and M. Hamzavi Molecular Physics Vol. 110, No. 18, September 2012, 2173-2179

[11]- Ituen. B. Okon1, Eno. E. Ituen1, Oyebola Popoola2 and Akaninyene. D. Antia1 International Journal of Recent advances in Physics(IJRAP) Vol.2, No.2, May 2013

[12]- Non-Central Potentials, Exact Solutions and Laplace Transform Approach .

[13]- Mahdi Eshghi, Hossein Mehraban and Sameer M Ikhdair Pramana ñ J. Phys. (2017) 88: 73

[14]- Altug Arda . Ramazan Sever J Math Chem (2012) 50:1484-1494 .

[15]- Min-Cang Zhang .J Math Chem DOI 10.1007/s10910-012-0055-1 2012 .

[16]- Jie Gao and Min-Cang ZhangJournal of the Korean Physical Society, Vol. 69, No. 7, October 2016, pp. 1144-1151 .

[17]- L Khalissa, Sur la structure des états quantiques via les approches des perturbations et des variations, thèse de doctorat, université Mohamed Khider-Biskra, (2018).

[18]- J David. Griffiths, Introduction à la mécanique quantique, et édition, Éducation PearsonSec 4.1. (2005).

[19]- A. Sinatra, Cours, " introduction à la mécanique quantique", 2008.

[20]- S. Hanane. Introduction de la méthode quadratique différentielle généralisée dans le traitement du potentiel coulombien ‘écranté’, mémoire de magister, université Mohamed Khider -Biskra, 2004.

[21]- A. Durmus, F. Yasuk, J. Chem. Phys. 126, 074108 (2007).

[22]- Chang-Yuan Chen. Cheng-Lin Liu. Dong-Sheng Sun, The normalized wave functions of the Hartmann potential and explicit expressions for their radial average values, Physics Letters A 305 (2002) 341–348.

[23]- B. Mohamed, Calcul des éléments de matrice dipolaires dans une géométrie non commutative, mémoire de magister, université D’El oued, (2013).

[24]- M. Moumni, M. Falek. arXiv:1506.07812v4 [quant-ph] 13 May 2016.

[25]- M. Heddar, M. Moumni, M. Falek. Non-Relativistic and Relativistic Equations for the Kratzer Potential plus a Dipole in 2D Systems, arXiv:1905.03765v2 [quant-ph] 12 May 2019.

[26]- N.R. Jazar; Mathieu Equation. In: Approximation Methods in Science and Engineering; Springer, New York, NY (2020) .

[27]- M. Abramowitz and I.A. Stegun; Handbook of Mathematical Functions; Dover Publ., New York, (1972) .

[28]- I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik; Table of Integrals, Series, and Products; Alan Jeffrey and Daniel Zwillinger (eds.) Elsevier, London (2007) .

الملخص

ملخص

في هذه المذكرة، قمنا بدراسة الخصائص الكمية لجملة فيزيائية موصوفة بكمون مركزي غير متعلق بالزمن، من خلال معالجة نظام هزاز توافقي في ايطار ميكانيك الكم غير النسبي .حيث قمنا بحل معادلة شرودينغر في الفضاء العادي في الإحداثيات القطبية، بعد ذلك اضفنا الكمون غير مركزي ثنائي القطب وقمنا بحل هذه المعادلة في الفضاء العادي ثنائي البعد .حيث تم تحديد طيف الطاقة والدالة الموجية في كل حالة .

الكلمات المفتاحية : *ميكانيك الكم غير النسبي، معادلة شرودينغر، الكمون غير مركزي، ثنائي القطب، هزاز توافقي.*

Résumé

Dans ce mémoire, on a essayé d'étudier les caractéristiques quantiques d'un corps physique décrit par un potentiel central non lié avec le temps, par le traitement du système d'un oscillateur harmonique dans le contexte de la mécanique quantique non relativiste, d'abord on a essayé de résoudre l'équation de Schrödinger dans un espace à deux dimensions .Ensuit, nous avons mené une étude quantique non relativiste du potentiel dipolaire plus le potentiel du l'oscillateur harmonique dans un espace à deux dimensions . où nous avons déterminé le spectre d'énergie et la fonction d'onde dans chacun des cas.

Mots clés : *Mécanique quantique non relativiste, l'équation de Schrödinger, le potentiel non-centraux, potential dipolaire , l'oscillateur harmonique*

Abstract

In this thesis, we tried to study the quantum characteristics of a physical body described by a central potential not bound with time, by treating the system of a harmonic oscillator in the context of non relative quantum mechanics. First, we tried to solve the Schrödinger equation in two-dimensional space **.***Then* we *have carried out a non-relativistic quantum study of the dipole potential plus the harmonic oscillator potential in two-dimensional space where we determined the energy spectrum and the wave function in each case*.

Key-words: *Non-relative quantum mechanics, Schrödinger equation, Non-Central Potentiall, dipole potential, harmonic oscillator***.**