الجمهورية الجزائرية الديموقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد بوضياف –المسيلة

كلية:العلـــــــوم.	**ميدان: عـــلـــوم المادة**
قسم : الفيــــــزياء.	**فـــرع: الفـــيزيـاء.**
رقم: PH/THE/03/2024	**تخصص: الفيزياء النظرية**

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمـــي

إعداد الطالبة : كريمة قاضي

تحت عنوان

الخواص الترموديناميكية لكمون هيلمان المتعلق بالزمن بإستخدام طريقة جديدة للتحليل الدالي لنيكيفوروف-أوفاروف

تمت المناقشة يوم 11 / 06 /2024 أمام اللجنة المكونة من:

اسم ولقب الأستاذ	معيرش عبد المجيد	جامعة المسيلة	رئيســا
اسم ولقب الأستاذ	مجبر سليم	جامعة المسيلة	مشرفا و مقررا
اسم ولقب الأستاذ	بوفراش كريم	جامعة المسيلة	مناقشا

السنة الجامعية : 2024/2023

بسم الله الرحمن الرحيم

شكر و عرفان

تم بحمد الله وتوفيقه إنجاز هذا العمل المتواضع، وبالمناسبة لا يسعني إلا أن أتوجه

بجزيل الشكر وفائق الاحترام إلى أستاذي المشرف

مجبر سليم

عرفانا مني له لما بذله من جهد ودعم وما قدمه من نصائح وتوجيهات خلال مراحل

إنجاز هذا العمل

كما أود شكر أعضاء لجنة المناقشة الذين بذلوا جهد مراجعة هذا العمل

المتواضع،الأستاذ معيرش عبد المجيد الذي ترأس اللجنة و الأستاذ بوفراش

كريم الذي تشرف بالمناقشة

ليجد جميع الأساتذة الذين كان لهم الفضل في توسيع معارفنا

أرقى تعابير الشكر والتقدير،وأخص بالذكر الأستاذة الفاضلة

قالي سهام

إهداء

أحمد الله عز وجل على عونه لإتمام هذا العمل .

إلى رمز العطاء والديَّ الكريمين.

إلى رفيق دربي، رمز الإخلاص و الوفاء و المحبة زوجي (خالد).

إلى قرة عيني وفرحتي في الحياة ، أولادي (وفاء، إسلام ،لينا)

إلى سندي وقوتي و ملاذي بعد الله، إخوتي و أخواتي .

إلى كل عائلتي.

إلى جميع أساتذتي .

إلى كل صديقاتي.

أهدي هذا العمل

قاضي كريمة

فهرس المحتويات

فهرس المحتويات

مقدمة عـــامة

مقدمة عامة

الهاميلتونيان المتعلق بالزمن له أهمية كبيرة في وصف الأنظمة الديناميكية الكمومية غير المستقرة الموجودة في كل مكان في عالم الفيزياء. من بين العديد من الأنظمة الهاملتونية التي تعتمد على الزمن، الكمون الجديد لهيلمان ($Hellmann$) حيث معاملاته المتعلقة بالزمن تتغير بشكل أسي. هذا الكمون لم يتم لحد الآن دراسته في الأدبيات. كمون هيلمان هو تراكب لكمون كولومب($Coulomb$) وكمون يوكاوا($Yukawa$). تم استخدام كمون هيلمان($Hellmann$) من قبل العديد من الباحثين لتمثيل التفاعل لنواة– الإلكترون أو التفاعل الأيون– الإلكترون. تم استخدامه أيضا لدراسة جزيئات الهيدريد القلوي ومشاكل التأين في القشرة الداخلية [1،2].

إن معرفة حل معادلة شرودنجر (SE) يعطينا كل المعلومات الممكنة، فيما يتعلق بالخصائص الفيزيائية لأي نظام محل دراسة. ويشمل هذا الطاقة والزخم وإحداثيات الجسيم في النظام، والتردد والطول الموجي الذي يصف النظام الميكانيكي الكمي، وسعة الاحتمال وطور الدالة الموجية، وغيرها. إن حل معادلة شرودنجر له العديد من التطبيقات في مجالات مختلفة من الفيزياء بما في ذلك الفيزياء الذرية، الفيزياء النووية، فيزياء الطاقة المكثفة والعالية، فيزياء الجسيمات، والفيزياء الكيميائية، وغيرها. للحصول على طيف الطاقات والدوال الموجية نستخدم طريقة جديدة لحل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية من النوع الهندسي الفائق تسمى طريقة التحليل الدالي لنيكيفوروف–أوفاروف(NUFA) [3] وطريقة فصل المتغيرات بتطبيق تقريب جرين ألدريتش لحد الطرد المركزي. تتكون طريقة(NUFA) من مفاهيم طريقة نيكيفوروف–أوفاروف(NU) [4]، طريقة نيكيفوروف–أوفاروف الوسيطية، وطريقة التحليل الدالي. هذه الطريقة هي طريقة بسيطة وأنيقة لحل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية من النوع الهندسي الفائق. على عكس طريقة (NU) التي تضمنت البحث عن مربع كثيرات الحدود والشروط الأخرى التي تجعل الأمر معقدًا، يمكن إستخدام (NUFA) بسهولة للحصول على الطاقة والدالة الموجية بمجرد تحويل المعادلات الموجية بشكل صحيح. وتحديد حالات عدم التعيين.لذا فإن بساطتها تلغي التلاعبات الرياضية الصارمة، كما هو الحال في التقنيات الأخرى.

في الآونة الأخيرة، امتدت دراسة الحالة المرتبطة إلى الخواص الديناميكية الحرارية حيث يتم إستخدام الطاقة التي تم الحصول عليها في الحالة المرتبطة لحساب دالة التقسيم الإهتزازية والتي بدورها تستخدم لحساب الخواص الديناميكية الحرارية مثل متوسط الطاقة الاهتزازية والطاقة الحرة الإهتزازية والأنتروبي الإهتزازي والسعة الحرارية الإهتزازية. ويرجع ذلك إلى تطبيقات الخواص الحرارية في العلوم [5].

نحاول في هذه المذكرة إيجاد حل (SE) غير المستقرة لكمون هيلمان بإستخدام طريقة جديدة تسمى طريقة (NUAF) وطريقة فصل المتغيرات بتطبيق تقريب جرين ألدريتش لحد الطرد المركزي. يتم إستخدام الطاقة التي تم الحصول عليها في الحالة المقيدة لحساب دالة التقسيم والتي بدورها تستخدم لحساب الخواص الديناميكية الحرارية مثل متوسط الطاقة والطاقة الحرة والأنتروبي والسعة الحرارية.

*** وقد إشتمل هذا العمل على ثلاث فصول مبنية على النحو التالي**

في «**الفصل الأول**» قمنا بضبط بعض المفاهيم الخاصة ب(SE) المستقرة ،ثم التطرق إلى (SE) غير المستقرة،مع كتابة المعادلة في فضاء كروي ثلاثي الأبعاد ذو المتغيرات (r, θ, φ) ،بالإضافة إلى طرق حل هذه المعادلة (طرق تقريبية وطرق دقيقة).

في «**الفصل الثاني**» تطرقنا للتذكير ببعض المفاهيم الأساسية في الديناميكا الحرارية(Thermodynamics).

في «**الفصل الثالث**»، وهو الموضوع الرئيسي لعملي ،حيث قمنا فيه بحل (SE)المتعلقة بالزمن لكمون هيلمان بإستخدام طريقة (NUFA) وطريقة فصل المتغيرات ، حيث تحصلنا على عبارة دالة الموجة، و طيف الطاقات ، و من ثمة إيجاد دالة التجزئة وصولا إلى الدوال الترموديناميكية.

الفصل الأول

معادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن

1- مقدمة

معادلة شرودنجر(SE) هي المعادلة الأساسية الأكثر أهمية في ميكانيكا الكم ،حيث تعتبر بمثابة قانون التحريك الثاني لنيوتن $(Newten)$، الذي يعتبر أساس الفيزياء الكلاسيكية.

ظهرت معادلة شرودنجر عام 1926، على يد الفيزيائي النمساوي **أروين شرودنجر**[6]$(Erwin\ Schrodinger)$،وذلك بالاستعانة بأفكار كل من : **هيزنبرغ** $(H$eisenberg)، **بلانك**$(Blanck)$ ، **و دي برولي**$(De\ Broglie)$ ، لتصف تطور النظام الكمي مع الزمن. وهي مقسمة إلى (SE)مستقلة عن الزمن (المستقرة) ومتعلقة بالزمن (غير مستقرة).

- تكتب معادلة شرودنجر من الشكل[7]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{H}\Psi(\vec{r},t) \qquad (1.1)$$

H : مِؤثر الهاميلتونيان (ويمثل الطاقة الكلية) و الذي يعطى بالعبارة التالية :

$$\mathrm{H} = \mathrm{T} + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}}) = \frac{\mathrm{P}^2}{2\mathrm{m}} + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}}) \qquad (1.2)$$

$\Psi(\vec{r},t)$: تمثل دالة الموجة .

$\vec{\mathrm{P}}$:الزخم وهو بدوره مؤثر كمي ، يكتب من الشكل :

$$\vec{\mathrm{P}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\vec{\nabla} \qquad (1.3)$$

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\vec{\mathrm{i}} + \frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\vec{\mathrm{j}} + \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}\vec{\mathrm{k}} \qquad (1.4)$$

- يمكن كتابة مؤثر الهاميلتونيانH كالتالي :

$$\mathrm{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}}) \qquad (1.5)$$

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{z}^2} \qquad (1.6)$$

- حيث Δ يمثل مؤثر اللابلاسيان.

بالتعويض في المعادلة (1.1) نجد

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}}) \right] \Psi(\vec{r},t) = \mathrm{E}\Psi(\vec{r},t) \qquad (1.7)$$

- يمكن كتابة معادلة شرودنجر كما يلي:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})]\, \Psi(\vec{r},t) = i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \tag{1.8}$$

2- معادلة شرودنجر المستقرة

- يقصد بالحالة المستقرة أن مؤثر الهاميلتونيان H لا يتعلق صراحة بالزمن .

- في هذه الحالة يمكن فصل الجزء الزمني عن الجزء الفضائي في دالة الموجة ، لذلك يمكن كتابتها على الشكل[7] :

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\varphi(\vec{r}) \tag{1.9}$$

* حيث نحصل على معادلة شرودنجر المستقرة التالية:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})]\, \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \tag{1.10}$$

1.2 - معادلة شرودنجر المستقرة لكمون مركزي في ثلاثة أبعاد:

- نعتبر جسيم ذو كتلة (m) ، خاضع لكمون مركزي $V(r)$.

- يكتب الهاملتونيان H بالشكل :

$$H= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \tag{1.11}$$

- بما أن الكمون مركزي ،وتسهيلا للدراسة نستعمل الإحداثيات الكروية ، وطريقة فصل المتغيرات التي تساعدنا لاحقا في حل معادلة شرودنجر غير المتعلقة بالزمن.

في الإحداثيات الكروية ،يكتب اللابلاسيان Δ بالعبارة :

$$\Delta= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) -\frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \tag{1.12}$$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{1.13}$$

- حيث: L يمثل مؤثر الزخم الزاوي ،

$$\begin{cases} 0 < r < \infty \\ 0 \le \theta \le \pi \\ 0 \le \varphi \le 2\pi \end{cases}$$

- بالتعويض في العلاقة (1.11) نجد :

$$H= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right)+\frac{L^2}{2mr^2}+V(r) \quad (1.14)$$

يمكن كتابة معادلة القيم الذاتية كمايلي :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right)+\frac{L^2}{2mr^2}+V(r)\right]\Phi(r,\theta,\varphi)$$

$$=E\Phi(r,\theta,\varphi) \quad (1.15)$$

أ – فصل المتغيرات :

- يمكننا إيجاد حلول لمعادلة القيم الذاتية السابقة ، وهذا بفصل المتغيرات القطرية و الزاوية عن بعضها البعض.

- وبما أن الملحوظات الثلاثة: L_z ، L^2 و H تتبادل فيما بينها ،فهي تعرف فضاء حالات مكون من دوال ذاتية مشتركة[6]،ومنه :

$$H\,\Phi(r,\theta,\varphi)=E\Phi(r,\theta,\varphi) \quad (1.16)$$

$$\vec{L}^2\Phi(r,\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2\Phi(r,\theta,\varphi) \quad (1.17)$$

$$L_z\,\Phi(r,\theta,\varphi)=m\,\hbar\,\Phi(r,\theta,\varphi) \quad (1.18)$$

حل جملة هذه المعادلات يكون من الشكل :

$$\Phi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \quad (1.19)$$

$Y_l^m(\theta,\varphi)$: الدوال الزاوية وتدعى بالتوافقيات الكروية.

$R(r)$: الدالة القطرية وهي تحقق المعادلة التالية :

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]\right\}R(r)=0 \quad (1.20)$$

- غالبا ما نستعمل الطرق التقريبية لحل معادلة شرودنجر (نظرية الإضطرابات- الطريقة التغايرية...) للآن الحل الدقيق محصور في بعض الكمونات فقط (كولومب- الهزازالتوافقي..)

3- معادلة شرودنجر غير المستقرة

1.3- مقدمة

- يقصد بالحالة غير المستقرة أن مؤثر الهاملتونيانH يتعلق صراحة بالزمن (أي أن كل من الكتلة والكمون يتعلقان بالزمن) ، بحيث تكتب معادلة شرودنجر في هذه الحالة من الشكل :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{H(t)}\Psi(\vec{r},t) \qquad (1.21)$$

- حيث:

$$\mathrm{H}(t) = \frac{\mathrm{P}^2}{2\mathrm{m(t)}} + \mathrm{V}\,(\vec{r},t) \qquad (1.22)$$

2.3- طرق حل معادلة شرودنجر غير المستقرة

- توجد عدة طرق مختلفة لحل معادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن ،منها التقريبية و الدقيقة .

1.2.3- الطرق الدقيقة

أ- التحويل الأحادي

- نعلم أنه لوصف تطور شعاع الحالة $|\Psi(t)\rangle$في فضاء هيلبرت$(Hilbert)$ وجب علينا إختيار جملة محاور أو المرجع .إختيار هذا المرجع ليس خيارا وحيدا ،أي أنه كلما غيرنا المرجع تتغير دراستنا للنظام الفيزيائي.

- و للإنتقال من مرجع إلى آخر، نستخدم المؤثرات الأحادية U ، والتي يمكن أن تكون مستقلة أو متعلقة بالزمن ، والتي تحقق الشرط التالي[8]:

$$\mathrm{U}\mathrm{U}^{+}=\mathrm{U}^{+}\mathrm{U} = \mathrm{I} \qquad (1.23)$$

- حيث: U^{+} هو المؤثر المرافق للمؤثر U .

- عموما من أجل هاميلتونيان متعلق بالزمن ، نستعمل مؤثرات أحادية متعلقة بالزمن تنقل شعاع الحالة على النحو التالي [8] :

$$\left|\grave{\Psi}(\mathrm{t})\right\rangle = \mathrm{U}^{-1}\,(t)|\Psi(t)\rangle \qquad (1.24)$$

- في المرجع الجديد ، يكتب الهاميلتونيان الجديد:

$$\breve{\grave{H}}(t) = U^{-1}(t)H(t)\,U(t) - i\,\hbar\,U^{-1}(t)\frac{\partial}{\partial t}U(t) \qquad (1.25)$$

التحويلات الأحادية هي وسيلة للبحث عن تمثيلات جديدة ،بحيث نكون قادرين على إجراء فصل للمتغيرات بين الجزء الزمني والجزء المكاني لشعاع الحالة $\left|\grave{\Psi}(t)\right\rangle$ ، بمعنى آخر البحث عن المؤثرات الأحادية التي بإمكانها أن تضع الهاميلتونيان الأصلي H على شكل قابل للتحليل :

$$\grave{H}(t) = \sum_n h_n(t)T_n \quad ; \grave{H}(t) = g(t)k \qquad (1.26)$$

- حيث: T_n و k مستقلان عن الزمن . في هذه الحالة يمكننا تحليل معادلة شرودنجر التي تتضمن $H(t)$.

- للحصول على عامل التطور الزمني في المرجع الجديد. بأخذ هذا في الإعتبار،ركزت العديد من الدراسات في أدبيات الفيزياء الرياضية على البحث أو تحديد الأنظمة خاصة الذرية التي تقبل حلا دقيقا في نوع من المرجع،وهكذا حدد افتيمو و سبيكتور (Efthimou and Spector)فئات الأنظمة التي تسمح بالفصل الدقيق بين المتغيرات مكان/زمان، كما أعطوا تحويلات أحادية للحصول على المرجع الجديد المعتمد على الزمن [9].

ب- مؤثر التطور الزمني

- إن مؤثر التطور الزمني هو تحويل خطي يسمح بالمرور من الحالة الإبتدائية $|\Psi(t_0)\rangle$ إلى الحالة في أي لحظة زمنية t التي يمثلها الشعاع $|\Psi(t)\rangle$، ونكتب [3]:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle \qquad (1.27)$$

ويسمى كذلك بالناشر (propagator)، هذا المؤثر يكون وحدوي، أي:

$$U^+(t,t_0)U(t,t_0) = U(t,t_0)U^+(t,t_0) = I \qquad (1.28)$$

حيث: I هو مؤثر الوحدة .

- نعوض المعادلة (1.27) في معادلة شرودنجر ، نحصل على :

$$i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H(t)\,U(t,t_0) \qquad (1.29)$$

- وفي حالة إذا كان الهاملتونيان غير متعلق بالزمن ،يكون المؤثر $U(t,t_0)$ من الشكل :

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \qquad (1.30)$$

- نلاحظ أن المعادلة (1.29) تمثل نفس درجة صعوبة معادلة شرودنجر ،لكن عند إستعمالنا لطرق التقريب ،نستطيع إنشاء مؤثر التطور الكلي$\mathrm{U}(\mathrm{t},\mathrm{t}_0)$ بواسطة جداء مؤثرات التطور مع الزمن الواحدية متناهية الصغرالناتجة عن تقسيم المجال الزمني $[\mathrm{t},\mathrm{t}_0]$ إلى مجالات لامتناهية الصغرالمتساوية الطول:

$$\mathrm{U}(\mathrm{t},\mathrm{t}_0)=\mathrm{U}(\mathrm{t},\mathrm{t}_\mathrm{k})\mathrm{U}(t_k,t_{k-1})\ldots\ldots\ \mathrm{U}(t_2,1)\mathrm{U}(t_1,t_0) \qquad (1.31)$$

ومنه:

$$\mathrm{U}(\mathrm{t},\mathrm{t}_0)=\prod_{i=1}^{N}\mathrm{U}_\mathrm{i}(\mathrm{t},\mathrm{t}_\mathrm{i}-\Delta\mathrm{t}) \qquad (1.32)$$

ومنه نستنتج أن حركة المجموعة الكمومية يمكن حصرها في سلسلة من التحويلات الأحادية.

- إن الحالة الخاصة للتحويل (1.27) لها تطبيقات متعددة في نظرية إنتشارالجسيمات حيث تكون الحالة الأولية ثابتة لكن ليس من أجل $t_0=0$ بل من أجل $t_0=-\infty$ ، و الحالة النهائية $|\psi(\mathrm{t})\rangle$ من أجل $\mathrm{t}=+\infty$ في هذه الحالة نستطيع أن نكتب :

$$|\psi(+\infty)\rangle=\mathrm{U}(+\infty,-\infty)|\psi(-\infty)\rangle \qquad (1.33)$$

بما أن $_0=-\infty$ فإن مؤثر التطور U يكتب بالصيغة التالية :

$$\mathrm{U}(+\infty,-\infty)=\lim_{t\to+\infty,t_0\to-\infty}\mathrm{U}(\mathrm{t},\mathrm{t}_0) \qquad (1.34)$$

ومنه نعرف المؤثر U على أنه مصفوفة إنتشار.

-طريقة مؤثر التطور قوية وفعالة للحصول على تقديرات دقيقة للحالات الكمية المعقدة التي يصعب حلها مباشرة ، لذلك يجب أن يكون هناك فهم جيد للنظام و المؤثرات المضافة .

ج- نظرية اللا متغيرات

- تمثل نظرية اللا متغيرات أحد الركائز الأساسية في دراسة الأنظمة المعتمدة على الزمن [*10*] .وتعرف هذه النظرية أيضا باسم نظرية (**Lewis-Riesenfeld**) .

*** مبدأ الطريقة**

- نعتبر نظام فيزيائي معرف بالهاميلونيان$\mathrm{H}(t)$ [*10*] الذي يتعلق بشكل صريح بالزمن ونفترض وجود مؤثر هرميتي آخر يتعلق بشكل صريح بالزمن $I(t)$.

يكون المؤثر $I(t)$ لامتغيرا عندما يحقق الشرطين:

$$\frac{dI}{dt}=\frac{\partial I}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[I(t),H(t)]=0 \tag{1.35}$$

$$I^{+}(t)=I(t) \tag{1.36}$$

يتم تمثيل تطور هذا النظام عبر الزمن من خلال (SE)(1.1).

إن ضرب المعادلة (1.35) في الكيت$|\Psi(t)\rangle$ على اليمين وتعويضها في (SE) (1.1)، يسمح بإستنتاج علاقة مهمة :

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}(I|\Psi(t)\rangle)=\mathrm{H}(I|\Psi(t)\rangle) \tag{1.37}$$

وهذا يعني أن عمل المؤثر الثابت على شعاع الحالة هو كذلك حل (SE)، وهذه النتيجة صالحة مهما كان شكل اللا متغير.

*** القيم الذاتية والأشعة الذاتية للا متغير**

كأي مؤثر في ميكانيكا الكم ، I يملك قيم ذاتية وأشعة ذاتية .

نفترض أن الثابت $I(t)$ لديه مجموعة كاملة من الدوال الذاتية ، ولتكن λ_n قيمه الذاتية و $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ دوالها الذاتية ،حيث k يمثل كل الأعداد الكمية اللازمة لتحديد الحالات الذاتية.معادلة القيم الذاتية تكتب كالتالي[11]:

$$I(\mathrm{t})|\varphi_{n,k}(t)\rangle=\lambda_n|\varphi_{n,k}(t)\rangle \tag{1.38}$$

$$\langle\varphi_{n,k}(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle=\delta_{n,\acute{n}}\delta_{k,\acute{k}} \tag{1.39}$$

بموجب المعادلة(1-36) ،القيم الذاتية λ_n حقيقية ومستقلة عن الزمن ،حيث يمكن إستنتاجها ببساطة من إشتقاق المعادلة(1.38)بالنسبة للزمن .

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle+I(\mathrm{t})\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle=\frac{\partial\lambda_n}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle+\lambda_n\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle \tag{1.40}$$

نطبق المعادلة(1.35)على$|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ ،التي تعطي :

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial I(t)}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle+I(\mathrm{t})H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle-\lambda_n H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle=0 \tag{1.41}$$

الجداء السلمي للمعادلة (1.41) للحالة$[\varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t)\rangle$:

$$\mathrm{i}\,\hbar\left\langle\varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t)\middle|\frac{\partial I(t)}{\partial t}\middle|\varphi_{n,k}(t)\right\rangle+(\lambda_{\acute{n}}-\lambda_n)\langle\varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t)|H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle=0 \tag{1.42}$$

يتضح أن :

$$\left\langle \varphi_{n,k}(t) \middle| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \middle| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = 0 \qquad (1.43)$$

نأخذ الجداء السلمي للمعادلة (1.40) مع $\langle \varphi_{n,k}(t) |$، نجد :

$$\frac{\partial \lambda_n}{\partial t} = \left\langle \varphi_{n,k}(t) \middle| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \middle| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = 0 \qquad (1.44)$$

وبما أن القيم الذاتية مستقلة عن الزمن ،فإنه من الواضح أن حلول (SE)يجب أن تكون متعلقة بالزمن.

لإيجاد العلاقة بين حلول (SE) والحالات الذاتية لِـ $I(t)$، قام **Lewis** و**Riesenfeld** بكتابة معادلة الحركة للحالة$|\varphi_{n,k}(t)\rangle$،إنطلاقا من المعادلة (1.37) مع إستعمال المعادلة (1.41)،تحصل على:

$$(\lambda_n - I(\mathrm{t}))\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle = \frac{\partial I(t)}{\partial t}|\varphi_{n,k}(t)\rangle \qquad (1.45)$$

بأخذ الجداء السلمي مع $\langle \varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t) |$ وتوظيف العلاقة (1.43) لحذف $\left\langle \varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t) \middle| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \middle| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle$ توصل إلى :

$$i\hbar(\lambda_n - \lambda_{\acute{n}}) \left\langle \varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t) \middle| \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = (\lambda_n - \lambda_{\acute{n}}) \langle \varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t) | H(t) | \varphi_{n,k}(t) \rangle \qquad (1.46)$$

من أجل $\lambda_{\acute{n}} \neq \lambda_n$ ، تحصل على :

$$i\hbar \left\langle \varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t) \middle| \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = \langle \varphi_{\acute{n},\acute{k}}(t) | H(t) | \varphi_{n,k}(t) \rangle \qquad (1.47)$$

المعادلة (1.46) لا تعني أن :

$$i\hbar \left\langle \varphi_{n,\acute{k}}(t) \middle| \frac{\partial}{\partial t} \middle| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = \langle \varphi_{n,\acute{k}}(t) | H(t) | \varphi_{n,k}(t) \rangle \qquad (1.48)$$

إذا كانت المعادلة (1.46) صالحة من أجل $\lambda_n = \lambda_{\acute{n}}$ و $\lambda_n \neq \lambda_{\acute{n}}$ ،نستنتج على الفور أن $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ هو حل خاص ل(SE).

لحد الآن لم نتكلم عن طور $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ ، يمكننا تحديد مجموعة جديدة من الأشعة الذاتية لِـ $I(t)$ ترتبط بالمجموعة السابقة عن طريق تحويل Jauge المتعلق بالزمن.

$$|\varphi_{n,k}(t)\rangle_\alpha = exp[i\alpha_{n,k}(t)]|\varphi_{n,k}(t)\rangle \qquad (1.49)$$

- حيث $\alpha_{n,k}$ دوال حقيقية للزمن تم إختيارها عشوائيا .$|\varphi_{n,k}(t)\rangle_{\alpha}$هيحالات ذاتية متعامدة لِـ $I(t)$ متعلقة بِـ λ_n ،بالإضافة إلى $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$.من أجل الإختيار المناسب للمراحل $\alpha_{n,k}(t)$ ،سيتم التحقق من المعادلة (1.46) من أجل $\lambda_n = \lambda_{\acute{n}}$ وبالتالي الوصول إلى الهدف بشرط :

$$\hbar\delta_{k,\acute{k}} \frac{d\alpha_{n,k}}{dt} = \langle\varphi_{n,\acute{k}}(t)\left|\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right]\right|\varphi_{n,k}(t)\rangle \qquad (1.50)$$

- ولتحقيق هذه المعادلة ،يجب إختيار الحالات $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ بحيث ينعدم الطرف الأيمن من أجل $k \neq \acute{k}$. يكون التحديد القطري ممكن دائما لأن المؤثر $i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t)$ هرميتي . وبمجرد إختيار الحالات سيتم اختيار الأطوار $\alpha_{n,k}$ بحيث تحقق المعادلة البسيطة:

$$\hbar \frac{d\alpha_{n,k}}{dt} = \langle\varphi_{n,\acute{k}}(t)\left|\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right]\right|\varphi_{n,k}(t)\rangle \qquad (1.51)$$

بما أن كل هذه الحالات الذاتية الجديدة لِـ $I(t)$ تحقق (SE)،فإن الحل العام يعطى بالشكل :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k} e^{i\alpha_{n,k}(t)}|\varphi_{n,k}(t)\rangle \qquad (1.52)$$

حيث $_{n,k}$ هي معاملات مستقلة عن الزمن توافق $|\Psi(t_0)\rangle$

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k} e^{i\alpha_{n,k}(t_0)}|\varphi_{n,k}(t_0)\rangle \qquad (1.53)$$

2.2.3- الطرق التقريبية

- بإستثناء بعض الحالات النادرة ، ليس من الممكن حل (SE) المعتمدة على الزمن حلا دقيقا ، وبالتالي نلجأ للطرق التقريبية، من بين هذه الطرق نذكر :

أ- نظرية الإضطرابات المتعلقة بالزمن

- تعد هذه الطريقة هي الأقوى وقابلة التطبيق على العديد من الأنظمة الفيزيائية .تقوم فكرة هذه الطريقة على إيجاد التغيرات في مستويات الطاقة المتقطعة و التغيرات في الدوال الذاتية وكذا دوال الموجة المرفقة للنظام الفيزيائي قيد الدراسة ، وهذا عندما يتغير الهاميلتونيانH للنظام بقيمة صغيرة ،إذن[8]:

$$\mathrm{H}(t) = \mathrm{H}_0(t) + \lambda W(t) \qquad (1.54)$$

H_0هو الهاميلتونيان غيرا لمضطرب .W هي دالة معلومة وλ متغير ،حيث: $\lambda \ll 1$

يتضح أن :

$$\mathrm{U}(\mathrm{t},\mathrm{t}_0) = U^{(0)}(t,t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t,t_0) \tag{1.55}$$

$U^{(0)}(t,t_0)$هو حل المعادلة غير المضطربة .

تعطى: $U^{(0)}(t,t_0)\ ;\ \forall n > 1$

$$U^{(n)}(t,t_0)$$

$$= (i\hbar)^{-n}\lambda^n \int\limits_{t>t_n>t_{n-1}>\cdots>t_0} dt_n\, dt_{n-1} \ldots dt_1 U^{(0)}(t,t_0) W(t_n) U^{(0)}(t_n,t_{n-1}) W(t_{n-1})$$

$$\ldots . U^{(0)}(t_2,t_1) W(t_1) U^{(0)}(t_1,t_0) \tag{1.56}$$

ب- الطريقة التغايرية :

- تعتمد هذه الطريقة على نظرية Ritz ،و التي تنص على أن القيمة المتوسطة للهاميلتونيان في الحالة $\langle\Psi|$ هي[8]:

$$\langle H(t)\rangle = \frac{\langle\Psi(t)|H(t)|\Psi(t)\rangle}{\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle} \geq E_0 \tag{1.57}$$

E_0هي أصغر قيمة ذاتية لـِ H.

- من أجل التحديد التقريبي لِـ E_0،نقوم بإختيار دالة محاولة متعلقة بعدد معين من الوسائطα ،نقوم بعد ذلك بحساب $\langle H\rangle_\alpha$،ونأخذ أصغر قيمة وهي القيمة التي من أجلها يكون مشتق $\langle H\rangle_\alpha$بالنسبة لِـ α معدوم .

- ومنه القيمة الصغرى $\langle \mathrm{H}\rangle_{\alpha_0}$ المحصل عليها تكون تقريبا للمستوي الأساسي E_0 للجملة .

ج- التقريب الفجائي

- وهو التقريب الذي يكون في الحالة القصوى حيث يتغير الهاملتونيان فجأة مع مرور الزمن،حيث ينص[8] : "....في الحد الذي ،أي في حالة المرور السريع بشكل لانهائي ، تظل الحالة الديناميكية للنظام دون تغيير...." وهذا يعني أن عامل التطور يحقق العلاقة :

$$\lim \mathrm{U}_{t\to 0}(t+t_0,t_0)=1 \tag{1.58}$$

د –التقريب الأديباتيكي

- في الحالة القصوى الأخرى أين يتغير هاميلتونيان النظام ببطء مع مرور الزمن ،أي $t\to+\infty$، نحن بصدد التحدث عن أقوى الطرق في ميكانيكا الكم ، ومن نتائج هذه التطبيقات في حل (SE) المتعلقة بالزمن : طور(Berry) أو الطور الهندسي ،الذي من خلاله يمكننا تفسير دور التقريب الأديباتيكي في حل (SE) المتعلقة بالزمن [8].

الفصل الثاني

مفاهيم أساسية في الديناميكا الحرارية

1- مقدمة

الديناميكا الحرارية (Thermodynamics) هو أحد فروع الكيمياء الفيزيائية ،وهو علم يدرس العلاقة بين الحرارة وأشكال الطاقة الأخرى وبشكل خاص تحول الطاقة الحرارية إلى أنواع الطاقة المختلفة والعكس .

2- الجمل الترموديناميكية

- **تعريف الجملة**

نسمي جملة ذلك الجزء من الكون المراد دراسته، ونسمي الجزء الباقي بالوسط الخارجي. وقسمت إلى:

أ- **الجملة المعزولة:** هي جملة لا تقوم بأي تبادلات مع المحيط الخارجي: حرارة ،عمل،مادة، معلومات .

ب- **الجملة المغلقة:** هي جملة تتبادل العمل والحرارة مع الوسط الخارجي، دون المادة.

ج- **الجملة المفتوحة:** هي جملة تتبادل العمل والحرارة مع الوسط الخارجي ،بما في ذلك المادة .

تكون الجملة :

أ- **متجانسة:** إذا كانت الجملة تحتوي على طور واحد.

ب- **غير متجانسة:** إذا كانت الجملة تحتوي على أكثر من طور.

3- تحولات الجمل الترموديناميكية

- التحول هو انتقال الجملة من حالة توازن إلى حالة توازن أخرى، مرورا بحالات عدم توازن.

- تقسم التحولات إلى:

أ- **التحولات العكوسة :** هي تحولات متناهية في البطء(شبه ساكنة) ،حيث أن الحالات البينية يمكن إعتبارها حالات توازن ،إذا تمت هذه التحولات في الاتجاه العكسي ،فان الجملة تمر بنفس الحالات البينية السابقة .مثال: تسخين جسم ثم تبريده .

ب- التحولات غير العكوسة: هي تحولات سريعة ،لا يمكن الرجوع فيها بالجملة إلى حالتها الإبتدائية .

4- حالة النظام

تعرف بأنها شرط محدد بمجموعة من الخواص، مثل: الضغط، الحجم، ودرجة الحرارة[12].

1.4- المقادير المكثفة(المركزة): هي مقادير لا تتعلق بكمية المادة، مثل: درجة الحرارة، الضغط، الكثافة...

2.4- المقادير الإمتدادية(الشاملة): هي مقادير تتعلق بكمية المادة، وهي قابلة للجمع ومعرفة على الجملة ككل. مثل:الكتلة ،الحجم، عدد المولات...

5- متغيرات الحالة

- هي مقادير تسمح بتحديد حالة الجملة . وأهمها[13]:

درجة الحرارة : هي التي تصف سخونة أو برودة مادة ما ،نرمز لها بالرمز T.

- **الضغط :** يمثل القوة الناظمة على المساحة العنصرية ، نرمز له بالرمز P**.**
- **الحجم:** هو الحيز الذي يشغله الجسم من الفضاء، نرمز له بالرمز V.
- **عدد المولات:** وهو نسبة الكتلة المعطاة في التفاعل الكيميائي إلى كتلة مول واحد من تلك المادة،نرمز له بالرمز n_i.
- **الكتلة :** وهي كمية المادة في جسم ما ،نرمز لها بـm .

6- دالة الحالة

- هي معادلة تربط بين مقادير(متغيرات) الحالة لجملة في حالة إتزان . فهي كمية ترموديناميكية لا تعتمد على المسار ولكنها تعتمد فقط على الحالة الإبتدائية و الحالة النهائية .

مثل :القانون العام للغازات المثالية :

$$PV = nRT$$

- إذا إعتبرنا أن المتغيرات الضغط والحجم ودرجة الحرارة هم من خصائص حالة النظام، فإن معادلة الحالة تأخذ الشكل[12]:

$$F(P,V,T) = 0$$

7- الدوال الترموديناميكية

أ- الطاقة الداخلية

- هي مجموع الطاقة الحركية والطاقة الكامنة للجسيمات المشكلة للنظام (الجملة).

تعطى دالة الطاقة الداخلية بالعلاقة : $U = U(S,V)$،حيث S دالة حالة تدعى الأنتروبي

يعطى التفاضل dU بالعلاقة :

$$dU = TdS - pdV \tag{2.1}$$

حيث:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V \quad ; p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S \quad ; \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V$$

ب- الأنتالبيH: يعرف الأنتالبي لمادة متجانسة بالعبارة :

$$H = U + PV \tag{2.2}$$

تفاضلها يكتب:

$$dH = dU + d(PV) \tag{2.3}$$

$$dH = TdS + VdP \tag{2.4}$$

الدالة الترموديناميكية ترتبط بالمتغيرات S وP،حيث:

$$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P , V = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S , \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P$$

ج-الأنتالبي الحرة G: أو دالة جيبس ،تعرف بالعلاقة :

$$G = H - TS \tag{2.5}$$

تفاضلها يكتب :

$$dG = TdS + VdP - d(TS) \tag{2.6}$$

$$dG = -SdT + VdP \tag{2.7}$$

حيث: $-S = (\frac{\partial G}{\partial T})_P \quad ; \quad V = (\frac{\partial G}{\partial P})_T$ و $(\frac{\partial S}{\partial P})_T = -(\frac{\partial V}{\partial T})_P$

د-الطاقة الحرة F: أو دالة هلمهولتز، تعرف بالعلاقة:

$$F = U - TS \tag{2.8}$$

تفاضلها يكتب: $dF = TdS - PdV - d(TS)$، أي:

$$dF = -SdT - PdV \tag{2.9}$$

حيث: $-\mathrm{S} = (\frac{\partial F}{\partial T})_V \quad ; -\mathrm{P} = (\frac{\partial F}{\partial V})_T$ و $(\frac{\partial S}{\partial V})_T = (\frac{\partial P}{\partial T})_V$

1.7- حالة النظام المغلق متعدد المركبات و التحول العكوس

في هذه الحالة من الضروري مراعاة قانون إنحفاظ الكتلة في الحجم المغلق . التفاضلات لدوال الحالة الترموديناميكية الأربعة (U, H, F, G) من أجل التحولات العكوسة تكتب كالآتي:

$$dU = TdS - PdV + \sum_{i=1}^{n} \mu_i dn_i \tag{2.10}$$

$$dH = TdS + VdP + \sum_{i=1}^{n} \mu_i dn_i \tag{2.11}$$

$$dF = -SdT - PdV + \sum_{i=1}^{n} \mu_i dn_i \tag{2.12}$$

$$dG = -SdT + VdP + \sum_{i=1}^{n} \mu_i dn_i \tag{2.13}$$

μ_iيمثل الكمون الكيميائي حيث $\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P}$: و n_i عدد مولات النوع i.

8- مبادئ الترموديناميك

1.8- المبدأ الصفري

ينص المبدأ الصفري: أنه إذا كان هناك جسمان في حالة إتزان حراري مع جسم ثالث، فإنهما يكونان في حالة إتزان حراري مع بعضهما البعض.

$$T(A) = T(B) \text{ و } T(B) = T(C) \text{ فان : } \mathrm{T(A)} = \mathrm{T(C)} \qquad (2.14)$$

2.8- المبدأ الأول

ينص المبدأ الأول في الترموديناميك على مصونية (إنحفاظ) الطاقة الداخلية للجملة المعتبرة، أي أن الطاقة لا تفنى ولا تستحدث ،وأن الطاقة المتبادلة بين الجملة و الوسط الخارجي تكون على شكل عمل(W) أو حرارة (Q).

يعبر عن المبدأ الأول بالمعادلة :

$$\Delta U = U_f - U_i = Q + W \qquad (2.15)$$

حيث U_i طاقة الجملة في الحالة الإبتدائية ،U_fطاقة الجملة في الحالة النهائية ،Q كمية الطاقة المتبادلة على شكل حرارة و W كمية الطاقة المتبادلة على شكل عمل .

3.8- المبدأ الثاني

- ✓ **صيغة كالفن :** خلال تحول مغلق أحادي المصدر ،من المستحيل أن ينتج النظام المغلق عملا.
- ✓ **صيغة كلوزيوس :** يستحيل صنع آلة حرارية تنقل الحرارة من المنبع البارد وتعطيها للمنبع الساخن تلقائيا دون أن تكتسب عملا.

من أجل كل الجمل (الأنظمة) توجد دالة حالة أكثر شمولية تدعى الأنتروبي،فهي مقياس عدم الإنتظام (الفوضى أو العشوائية) بين الجسيمات .فكلما كان الإنتظام قليلا زادت قيمة الأنتروبي والعكس صحيح .

وينص القانون الثاني وفقا للأنتروبي على :"كل تغير تلقائي لابد وأن ترافقه زيادة في الأنتروبي و تبقى ثابتة في حالة التوازن "

يمثل القانون الثاني في الترموديناميك بالعلاقة الرياضية :

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \tag{2.16}$$

ΔQكمية الحرارة للنظام T، درجة الحرارة ،ΔS التغير في الأنتروبي.

4.8- المبدأ الثالث

ينص على " الأنتروبي لأي مادة نقية متبلورة عند درجة الصفر المطلق $(0K)$ يساوي الصفر"،أي :

$$S(0K) = 0 \tag{2.17}$$

9- الدوال الترموديناميكية من وجهة نظر الفيزياء الإحصائية

قوانين نيوتن في الميكانيك الكلاسيكي لاقت إستحسانا وقبولا عندما توقعت السلوك العياني (الماكروسكوبي) للأنظمة الترموديناميكية .ولكن عند تطبيقها على الأجسام المجهرية ،وجد أنها تعطي إجابات غير منطقية لإستحالة حل هذه المعادلات ،لهذا نلجأ إلى القوانين الإحصائية التي تمكننا من التعامل مع أعداد لانهائية من الجسيمات [14].

- ✓ **دالة التجزئة**

تعتبر الحجر الأساس في حساب المقادير والدوال الترموديناميكية للنظام ،نرمز لها بالرمز Z .تعطى بالعلاقة التالية :

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \tag{2.18}$$

حيث :E_iالطاقة في المستوي i و $\beta = \frac{1}{k_\beta T}$معامل بولتزمان (Boltzmann constant) .

- ✓ **الطاقة الداخلية**

نعتبر كلا من الحجم V وعدد الجسيمات (N) ثابت .الطاقة الداخلية هي متوسط قيمة الطاقة في المجموعة القانونية ،مع إحتمال P_i للحصول على الطاقة E_i.يعبر عن الطاقة المتوسطة بالعلاقة :

$$\bar{E} = \langle E \rangle = \sum_i E_i P_i(E_i) = \sum_i E_i \left(\frac{e^{-\beta E_i}}{Z}\right) = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{Z} \tag{2.19}$$

لدينا:

$$-\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)_{N,V} = -\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)_{N,V} = -\frac{\frac{\partial}{\partial \beta}\sum_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} = \frac{\sum_i e^{-\beta E_i}}{Z} \qquad (2.20)$$

ومنه نجد:

$$\langle E\rangle = -\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)_{N,V} \qquad (2.21)$$

$$\beta = \frac{1}{\mathrm{k}_\beta \mathrm{T}} \Longrightarrow \frac{\partial}{\partial \beta} = -\mathrm{k}_\beta \mathrm{T}^2 \frac{\partial}{\partial T} \qquad (2.22)$$

العلاقة (2.21) تصبح :

$$\langle E\rangle = \mathrm{k}_\beta \mathrm{T}^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_{N,V} \qquad (2.23)$$

✓ **الضغط**

نعتبر الآن كل من T وN ثابت ونفترض أن حجم النظام يتغير بصفة شبه ثابتة من Vإلى القيمة$V + dV$،في هذه الحالة ينتج تغير في مستويات الطاقة E_i،يعطى الضغط بالعبارة :

$$P = -\left(\frac{\partial E_i}{\partial V}\right)_{\beta,N} \qquad (2.24)$$

الضغط المقاس هو القيمة المتوسطة لجميع قيم الضغط $_i$ المأخوذة على المجموعة القانونية ،إذن نكتب :

$$\bar{P} = \langle P\rangle = \sum_i P_i(E_i)P \qquad (2.25)$$

وبما أن:$P_i(E_i) = \frac{e^{-\beta E_i}}{\mathrm{Z}}$ و $P = -\left(\frac{\partial E_i}{\partial V}\right)_{\beta,N}$،فان المعادلة (2.25) تصبح:

$$\langle P\rangle = \frac{1}{Z}\sum_i \left(-\frac{\partial E_i}{\partial V}\right)_{\beta,N} e^{-\beta E_i} \qquad (2.26)$$

نلاحظ أن: $\left(\frac{\partial e^{-\beta E_i}}{\partial V}\right)_{\beta,N} = -\beta\left(\frac{\partial E_i}{\partial V}\right)_{\beta,N} e^{-\beta E_i}$

العلاقة (2.26)تصبح :

$$\langle P\rangle = \frac{1}{\beta Z}\sum_i \left(\frac{\partial e^{-\beta E_i}}{\partial V}\right)_{\beta,N} = \frac{1}{\beta Z}\left(\frac{\partial}{\partial V}\sum_i e^{-\beta E_i}\right)_{\beta,N} = \frac{1}{\beta Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial V}\right)_{\beta,N} \qquad (2.27)$$

أي:

$$\langle P\rangle = \frac{1}{\beta Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial V}\right)_{\beta,N} = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{\beta,N} = \mathrm{k}_\beta \mathrm{T}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{\beta,N} \qquad (2.28)$$

✓ **الأنتروبي**

نعتبر عدد الجسيمات ثابت،في هذه الحالة دالة التجزئة Z متعلقة بالمتغيرين T(أو β)و V:

$$Z = Z(\beta, V) = Z(T, V) \qquad (2.29)$$

لدينا :

$$d\ln Z = -\langle E\rangle d\,\beta + \beta\langle P\rangle dV \qquad (2.30)$$

أو:

$$d(\langle E\rangle\,\beta) = \langle E\rangle d\,\beta + \beta d\langle E\rangle \qquad (2.31)$$

بجمع العلاقتين(2.30) و(2.31) نجد:

$$d(\ln Z + \langle E\rangle\,\beta = \beta(d\langle E\rangle + \langle P\rangle dV) \qquad (2.32)$$

أو:

$$d\langle E\rangle = TdS - \langle P\rangle dV \qquad (2.33)$$

حيث:

$$d(\ln Z + \langle E\rangle\,\beta) = \beta TdS = \frac{dS}{\mathrm{k}_\beta} \qquad (2.34)$$

بعد المكاملة نجد:

$$S = \mathrm{k}_\beta(\ln Z + \langle E\rangle\,\beta) = \mathrm{k}_\beta\left(\ln Z - \beta\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right) \qquad (2.35)$$

نختار ثابت التكامل معدوم لأنه عندما $\beta \to \infty$ ، $S \to \mathrm{k_B}\ln g_0$، حيث g_0 درجة إنحطاط الحالة الأساسية (المبدأ الثالث في الترموديناميك)

✓ **الطاقة الحرة**

العلاقة(2.35) يمكن كتابتها بالشكل :

$$\langle E\rangle TS = -\mathrm{k}_\beta T\ln Z \qquad (2.36)$$

الطرف الأول للمعادلة (2.36) يمثل الطاقة الحرة،إذن :

$$F = -\mathrm{k}_{\beta} T \ln Z \tag{2.37}$$

وأيضا نحصل على :

$$Z = e^{-\frac{F}{\mathrm{k}_{\beta} T}} \tag{2.38}$$

كما يمكننا حساب السعة الحرارية (C_v) كمايلي :

$$C_v = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T} = k_{\beta}\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\beta} \tag{2.39}$$

و منه :

$$C_v = k_B \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} lnZ \tag{2.40}$$

الفصل الثالث

الخواص الترموديناميكية لكمون هيلمان المتعلق بالزمن

باستخدام طريقة جديدة للتحليل الدالي لِنيكيفوروف -أوفاروف

1- المقدمة

كمون هيلمان هو تراكب لكمون كولوم وكمون يوكاوا. هذه الكمون لم يتم لحد الآن دراسته في الأدبيات. تم إستخدام كمون هيلمان من قبل العديد من الباحثين لتمثيل التفاعل نواة- الكترون أو التفاعل أيون- إلكترون. تم إستخدامه أيضا لدراسة جزيئات الهيدريد القلوي ومسائل التأين في القشرة الداخلية [2،1].

الهدف من هذا العمل هو إيجاد حل (SE) غير المستقرة لكمون هيلمان بإستخدام طريقة جديدة تسمى طريقة (NUAF) و طريقة فصل المتغيرات بتطبيق تقريب جرين ألدريتش لحد الطرد المركزي.

2- صياغة المسألة

هاميلتونيان نظامنا يعطى بواسطة[2،1]

$$H(t) = \frac{P^2}{2m(t)} - \frac{\mathrm{A(t)}}{\mathrm{r}} + \frac{B(t)}{r} e^{-\delta r} \qquad (3.1)$$

حيث: δ هي معامل الحجب ، $m(t)$، $\mathrm{A(t)}$، $B(t)$ هي معاملات متعلقة بالزمن،والتي تم إختيار العبارات الصريحة لها على النحو التالي :

$$m(t) = m_0 e^{-\mu t} \qquad (3.2)$$

$$\mathrm{A}(t) = A_0 e^{\mu t} \qquad (3.3)$$

$$\mathrm{B}(t) = B_0 e^{\mu t} \qquad (3.4)$$

حيث: m_0، μ، A_0، B_0 هي ثوابت .

هدفنا هو حل معادلة شرودنجر التالية المتعلقة بالزمن في فضاء ثلاثي أبعاد .

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, \theta, \varphi, t) = \left[\frac{p^2}{2m_0 e^{-\mu t}} - \frac{A_0 e^{\mu t}}{\mathrm{r}} + \frac{B_0 e^{\mu t}}{r} e^{-\delta r}\right] \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi, t) \qquad (3.5)$$

يتم تمثيل مؤثر الزخم في الإحداثيات الكروية. $p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}$ ، حيث :

$p_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$ ،ويتم إعطاء الزخم الزاوي بواسطة:

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] \tag{3.6}$$

يمكن إعادة كتابة هاميلتونيان نظامنا على النحو التالي:

$$H = \frac{1}{2m(t)}(p^2 - \frac{\beta_0}{\mathrm{r}} + \frac{\gamma_0}{r}e^{-\delta r}) \tag{3.7}$$

حيث:

$$\beta_0 = 2m_0A_0 = const, \gamma_0 = 2m_0B_0 = const \tag{3.8}$$

تصبح المعادلة (3.4) :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,\theta,\varphi,t) = \frac{1}{2m(t)}(p^2 - \frac{\beta_0}{\mathrm{r}} + \frac{\gamma_0}{r}e^{-\delta r})\psi(r,\theta,\varphi,t) \tag{3.9}$$

نأخذ تبديل المتغير التالي:

$$s = \int_0^t \frac{1}{2m(t')}dt' \tag{3.10}$$

ثم :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{2m(t)}\frac{\partial}{\partial s} \tag{3.11}$$

و

$$\Psi(r,\theta,\varphi,t) = \Psi(r,\theta,\varphi,s \tag{3.12}$$

لقد وصلنا هنا إلى معادلة شرودنجر بالإعتماد على المتغير الجديد s :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial s}\psi(r,\theta,\varphi,s) = (p^2 - \frac{\beta_0}{\mathrm{r}} + \frac{\gamma_0}{r}e^{-\delta r})\psi(r,\theta,\varphi,s) \tag{3.13}$$

مع ملاحظة أنه يمكننا فصل المتغيرات (r, s) فنضع :

$$\Psi(r,\theta,\varphi,s) = \emptyset(r,\theta,\varphi)f(s) \tag{3.14}$$

إن تطبيق طريقة فصل المتغيرات على المعادلة (3.13) يؤدي إلى:

$$\frac{i\hbar}{f(s)}\frac{\partial f(s)}{\partial s}=\frac{1}{\emptyset_n(r,\theta,\varphi,t)}H_0(r,\theta,\varphi)\emptyset_n(r,\theta,\varphi)=E_{nl} \qquad (3.15)$$

حيث $_{nl}$ هو ثابت الفصل.

وبذلك نحصل على المعادلتين التفاضليتين التاليتين:

$$H_0(r,\theta,\varphi)\emptyset_n(r,\theta,\varphi)=E_{nl}\emptyset_n(r,\theta,\varphi) \qquad (3.16)$$

$$\frac{i\hbar}{f(s)}\frac{\partial f(s)}{\partial s}=E_{nl} \qquad (3.17)$$

حيث:

$$H_0(r,\theta,\varphi)=(p_r^2+\frac{L^2}{r^2}-\frac{\beta_0}{\mathrm{r}}+\frac{\gamma_0}{r}e^{-\delta r}) \qquad (3.18)$$

حل المعادلة (3.17) يعطى بالعبارة :

$$f(s)=C_n e^{\frac{i}{2m_0\mu\hbar}(1-e^{\mu t})E_{nl}} \qquad (3.19)$$

حيث $_n$ هو ثابت التقنين.

المعادلة (3.15) تصبح :

$$\left[-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{r}^2}+\frac{2}{\mathrm{r}}\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}-\frac{\mathrm{L}^2}{\hbar^2\mathrm{r}^2}\right)-\frac{\beta_0}{\mathrm{r}}+\frac{\gamma_0}{r}e^{-\delta r}\right]\psi(\mathrm{r},\theta,\varphi)=\mathrm{E_{nl}}\psi(\mathrm{r},\theta,\varphi), \qquad (3.20)$$

التناظر الكروي للمعادلة (3.20) يسمح لنا بكتابة الدالة الموجية

$$\psi_{nl}(r,\theta,\varphi)=\frac{U_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)}{r} \qquad (3.21)$$

حيث $_{lm}(\theta,\varphi)$ هي التوافقيات الكروية المعرفة كالتالي:

$$\mathrm{Y_{lm}}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}P_l^m(cos\theta) \qquad (3.22)$$

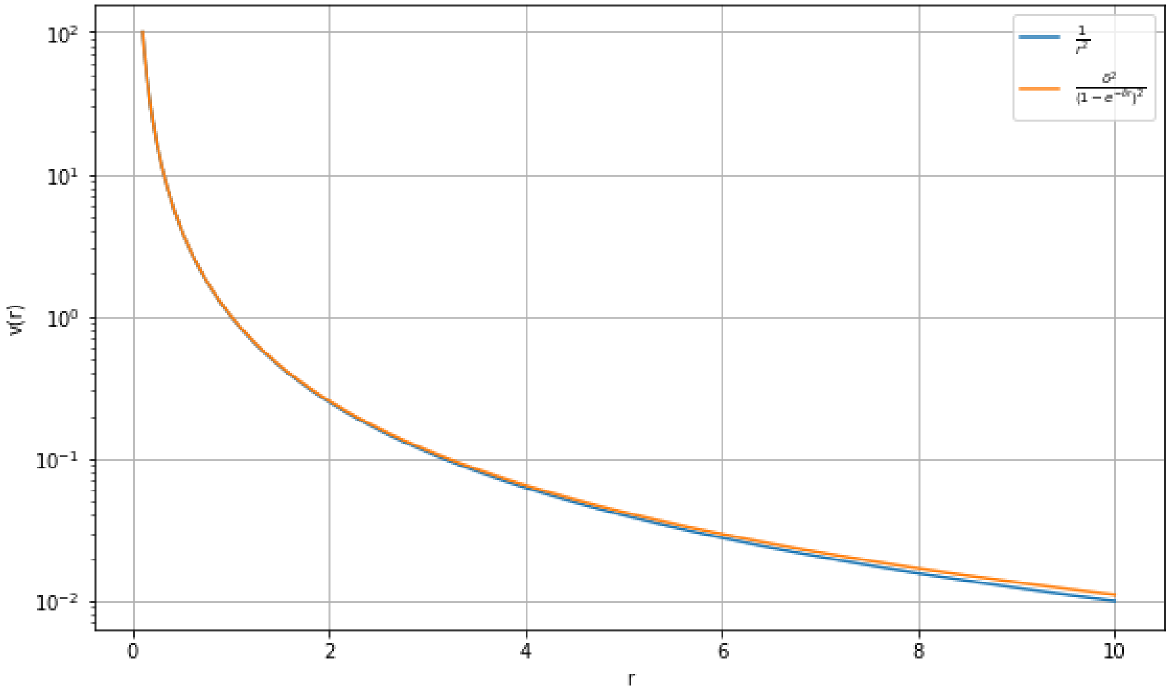
حيث l هو العدد الكمي للزخم الزاوي و m هو العدد الكمي المغناطيسي و $P_l^m(x)$ متعدد الحدود ليجاندر(Legendre Polynomials).

المعادلة القطرية لكمون هيلمان تكتب :

$$\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{1}{\hbar^2}\left(E_{nl} + \frac{\beta_0}{\mathrm{r}} - \frac{\gamma_0}{r}e^{-\delta r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}\right)U_{nl}(r) = 0 \qquad (3.23)$$

لا يمكن حل هذه المعادلة بالضبط من أجل $l \neq 0$ بسبب حد الطرد المركزي .لذلك نستخدم تقريب قرين-ألدريش للنموذج [15]

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\delta^2}{\left(1-e^{-\delta\,\mathrm{r}}\right)^2};\ \ \frac{1}{r} \approx \frac{\delta}{\left(1-e^{-\delta\,\mathrm{r}}\right)}, \qquad (3.24)$$



مع تحويل الإحداثيات $z = \quad {}^{-\delta\,\mathrm{r}}$،المعادلة (3.22) تختزل إلى المعادلة التفاضلية :

$$\frac{d^2U_{n\ell}(z)}{dz^2} + \frac{(1-z)}{z(1-z)}\frac{dU_{n\ell}(z)}{dz} + \frac{1}{z^2(1-z)^2}\left[-(\varepsilon_{n\ell}-Q)z^2 + (2\varepsilon_{n\ell}-P-Q)z - (\varepsilon_{n\ell}-P+\gamma)\right]U_{n\ell}(z) = 0, \qquad (3.25)$$

حيث :

$$-\varepsilon_{n\ell} = \frac{E_{n\ell}}{\hbar^2\delta^2};\ \ P = \frac{\beta_0}{\hbar^2\delta};Q = \frac{\gamma_0}{\hbar^2\delta};\ \gamma = \ell(\ell+1). \qquad (3.26)$$

لحل المعادلة (3.25) نستخدم طريقة التحليل الدالي لنيكيفوروف –أوفاروف[3].

1.2- نظرية طريقة نيكيفوروف-أوفاروف- للتحليل الوظيفي(NUFA)

باستخدام مفاهيم طريقة (NU) وطريقة (NU) الوسيطية ,وطريقة التحليل الدالي(FA)،إقترحنا طريقة بسيطة و أنيقة لحل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية من النوع الهندسي الفائق تسمى طريقة (NUFA)[3] .هذه الطريقة سهلة وبسيطة تماما مثل طريقة (NU)الوسيطية. على عكس طريقة (NU) التي تضمنت البحث عن مربع كثيرات الحدود و الشروط الأخرى التي تجعل الأمر معقدا ،يمكن إستخدام (NUFA) بسهولة للحصول على الطاقة و الدالة الموجية بمجرد تحويل معادلات الموجة بشكل صحيح وتحديد حالات عدم التعيين ،كما هو معروف يتم إستخدام NU لحل معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية من النموذج:

$$\frac{d^2\psi(s)}{ds^2}(s)+\frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\frac{d\psi(s)}{ds}+\frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s)=0 \tag{3.27}$$

حيث: $\sigma(s)$ و $\tilde{\sigma}(s)$ كثيرات حدود على الأكثر من الدرجة الثانية و$\tilde{\tau}(s)$ كثير حدود من الدرجة الأولى،أدخلTezcanو مؤخراSever الشكل الوسيطي لطريقة NUعلى الشكل [16]

$$\left[\frac{d^2}{ds^2}+\frac{\alpha_1-\alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)}\frac{d}{ds}+\frac{-\xi_1 s^2+\xi_2 s-\xi_3}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\right]\psi(s)=0 \tag{3.28}$$

حيث :α_{i} و$\xi_{\mathrm{i}}(\mathrm{i}=1.2.3)$ كلها معاملات ،ويمكن ملاحظة أن المعادلة التفاضلية (27) لها حالتي عدم التعيين عند:$s\rightarrow 0$ و$s\rightarrow\frac{1}{\alpha_3}$ وبالتالي نأخذ الدالة الموجية بالشكل :

$$\psi(s)=\mathrm{s}^{\lambda}(1-\alpha_3\mathrm{s})^{\upsilon}\mathrm{f}(\mathrm{s}) \tag{3.29}$$

بتعويض المعادلة (3.29) في المعادلة (3.28) يؤدي إلى المعادلة التالية :

$$\begin{gathered}s(1-\alpha_3 s)\frac{d^2\mathrm{f}(\mathrm{s})}{ds^2}+[\alpha_1+2\lambda-(2\lambda\alpha_3+2\upsilon\alpha_3+\alpha_2)\mathrm{s}]\frac{df(s)}{ds}\\+\left\{-\alpha_3\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right)\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)-\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right)+\right.\\\left.\left[\frac{\lambda(\lambda-1)+\alpha_1\lambda-\xi_3}{\mathrm{s}}+\frac{\upsilon(\upsilon-1)\alpha_3+\alpha_2\upsilon-\alpha_1\alpha_3\upsilon-\frac{\xi_1}{\alpha_3}+\xi_2-\xi_3\alpha_3}{(1-\alpha_3 s)}\right]\right\}\mathrm{f}(\mathrm{s})=0.\end{gathered} \tag{3.30}$$

يمكن اختزال المعادلة (3.30) إلى معادلة غوص هندسية فائقة إذا وفقط إذا إختفت الدوال التالية:

$$\lambda(\lambda-1)+\alpha_1\lambda-\xi_3=0 \qquad (3.31)$$

$$\upsilon(\upsilon-1)\alpha_3+\alpha_2\upsilon-\alpha_1\alpha_3\upsilon-\frac{\xi_1}{\alpha_3}+\xi_2-\xi_3\alpha_3=0 \qquad (3.32)$$

وهكذا المعادلة (3.30) تصبح:

$$s(1-\alpha_3 s)\frac{d^2\mathrm{f}(\mathrm{s})}{ds^2}+[\alpha_1+2\lambda-(2\lambda\alpha_3+2\upsilon\alpha_3+\alpha_2)\mathrm{s}]\frac{df(s)}{ds}+\left\{-\alpha_3\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right)\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)-\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right)\right\}\mathrm{f}(\mathrm{s})=0. \qquad (3.33)$$

حل المعادلتين (3.31) و(3.32) يعطيان بالكامل :

$$\lambda=\frac{1}{2}\left((1-\alpha_1)\mp\sqrt{(1-\alpha_1)^2+4\xi_3}\right) \qquad (3.34)$$

$$\upsilon=\frac{1}{2\alpha_3}\left((\alpha_3+\alpha_1\alpha_3-\alpha_2)\mp\sqrt{(\alpha_3+\alpha_1\alpha_3-\alpha_2)^2+4\left(\frac{\xi_1}{\alpha_3}+\xi_3\alpha_3-\xi_2\right)}\right) \qquad (3.35)$$

المعادلة (3.33) هي معادلة هندسية فائقة من النموذج :

$$x(1-x)\frac{d^2\mathrm{f}(\mathrm{x})}{dx^2}+[\mathrm{c}+(\mathrm{a}+\mathrm{b}+1)\mathrm{x}]\frac{df(x)}{dx}-[\mathrm{ab}]\mathrm{f}(\mathrm{x})=0 \qquad (3.36)$$

حيث : c،b،a تعطى على النحو التالي :

$$a=\sqrt{\alpha_3}\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right) \qquad (3.37)$$

$$b=\sqrt{\alpha_3}\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)-\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right) \qquad (3.38)$$

$$c=\alpha_1+2\lambda \qquad (3.39)$$

- عند ضبط a أو b على عدد صحيح سالب (n-) تتحول الدالة الهندسية الفائقة $\mathrm{f}(s)$ إلى كثير الحدود من الدرجة (n) ومن ثم ،فإن الدالة الهندسية الفائقة $\mathrm{f}(s)$ تقترب من النهاية في الحالة الكمومية التالية ،أي: a=-n حيث : $n=0,1,2,3,\ldots,n_{max}$.

$$\sqrt{\alpha_3}\left(\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}\right)=-n \qquad (3.40)$$

$$\lambda+\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\frac{n}{\sqrt{\alpha_3}}=-\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2+\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}}. \qquad (3.41)$$

- تربيع طرفي المعادلة (3.41) وبإعادة الترتيب نحصل على معادلة الطاقة لِطريقة (NUFA) بالشكل :

$$\lambda^2+2\lambda\left(\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\frac{n}{\sqrt{\alpha_3}}\right)+\left(\upsilon+\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)+\frac{n}{\sqrt{\alpha_3}}\right)^2-\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3}-1\right)^2-\frac{\xi_1}{\alpha_3^2}=0 \qquad (3.42)$$

بتعويض المعادلات (3.31) و(3.32) في المعادلة (3.29) نحصل على معادلة الموجة المقابلة لطريقة (NUFA) :

$$\psi(s)=C_n s^{\frac{(1-\alpha_1)+\sqrt{(1-\alpha_1)^2+4\xi_3}}{2}}(1-\alpha_3 s)^{\frac{(\alpha_3+\alpha_1\alpha_3-\alpha_2)+\sqrt{(\alpha_3+\alpha_1\alpha_3-\alpha_2)^2+4\left(\frac{\xi_1}{\alpha_3}+\xi_3\alpha_3-\xi_2\right)}}{2\alpha_3}}\ {}_2F_1(a,b,c;s) \qquad (3.43)$$

حيث n هو ثابت التقنين${}_2F_1(a,b,c;s)$ هي دالة غوص الهندسية الفائقة والتي تعرف كما يلي :

$${}_2F_1(a,b,c;s)=\sum_{n=0}^{\propto}\frac{(a)_n(b)_n}{(c)_n n!}z^n,(a)_n=a(a+1)(a+2)\ldots.(a+n-1),(a)_0=1\ .$$

الآن ندرس الحالة$\alpha_3\to 0$. عندما $\alpha_3\to 0$،المعادلة (3.28) تصبح[17]:

$$\psi(s)=\mathrm{e}^{-\lambda s}s^{\upsilon}f(s), \qquad (3.44)$$

تعويض المعادلة (3.44) في المعادلة (3.28) يؤدي إلى المعادلة التالية :

$$s\frac{d^2f(s)}{ds^2}+[\alpha_1+2\upsilon-(2\lambda+\alpha_2)s]\frac{df(s)}{ds}-(2\lambda\upsilon+\alpha_1\lambda+\alpha_2\upsilon-\xi_2)f(s)+\left[\frac{\upsilon(\upsilon-1)+\alpha_1\upsilon-\xi_3}{s}\right]f(s)+[\lambda^2+\alpha_2\lambda-\xi_1]sf(s)=0. \qquad (3.45)$$

يمكن اختزال المعادلة (3.45) إلى معادلة هندسية فائقة متموجة إذا وضعنا ،

$y = (2\lambda + \alpha_2)s$ ونحصل على:

$$y\frac{d^2\mathrm{f(y)}}{dy^2} + [\alpha_1 + 2\upsilon - \mathrm{y}]\frac{df(y)}{dy} - \frac{(2\lambda\upsilon+\alpha_1\lambda+\alpha_2\upsilon-\xi_2)}{2\lambda+\alpha_2}\mathrm{f(y)} + \left[\frac{\upsilon(\upsilon-1)+\alpha_1\upsilon-\xi_3}{\mathrm{y}}\right]\mathrm{f(y)} + \left[\frac{\lambda^2+\alpha_2\lambda-\xi_1}{(2\lambda+\alpha_2)^2}\right]\mathrm{yf(y)} = 0. \quad (3.46)$$

تصبح المعادلة (3.46) دالة هندسية فائقة متموجة، إذا و فقط إذا إختفى الحدان الأخيران في $\frac{1}{\mathrm{y}}$ و y. إنه:

$$\upsilon(\upsilon-1) + \alpha_1\upsilon - \xi_3 = 0 \quad (3.47)$$

$$\left[\frac{\lambda^2+\alpha_2\lambda-\xi_1}{(2\lambda+\alpha_2)^2}\right] = 0 \quad (3.48)$$

لذلك المعادلة (3.45) يمكن كتابتها على النحو التالي:

$$y\frac{d^2\mathrm{f(y)}}{dy^2} + [\alpha_1 + 2\upsilon - \mathrm{y}]\frac{df(y)}{dy} - \frac{(2\lambda\upsilon+\alpha_1\lambda+\alpha_2\upsilon-\xi_2)}{2\lambda+\alpha_2}\mathrm{f(y)} = 0. \quad (3.49)$$

يمكن الحصول على قيم λ و υ عن طريق حل المعادلتين(3.47) و (3.48) صراحة كمايلي:

$$\lambda = \frac{-\alpha_2 \mp \sqrt{\alpha_2^2+4\xi_1}}{2}, \quad (3.50)$$

$$\upsilon = \frac{-(\alpha_1-1) \mp \sqrt{(\alpha_1-1)^2+4\xi_3}}{2}. \quad (3.51)$$

المعادلة (3.48) هي نوع المعادلة الهندسية الفلئقة المتموجة من الشكل:

$$x\frac{d^2\mathrm{f(x)}}{dx^2} + [\mathrm{c} - \mathrm{x}]\frac{df(x)}{dx} - \mathrm{af(x)} = 0 \quad (3.52)$$

يتم تعريف القيم الذاتية للطاقة من المعادلة (3.49) كالتالي $:= \frac{(2\lambda\upsilon+\alpha_1\lambda+\alpha_2\upsilon-\xi_2)}{2\lambda+\alpha_2}$

$n-$والتي يمكن التعبير عنها بشكل صريح كالتالي:

$$(2\lambda\upsilon + \alpha_1\lambda + \alpha_2\upsilon - \xi_2) + \mathrm{n}(2\lambda + \alpha_2) = 0 \quad (3.53)$$

يتم إعطاء الدالة الموجية الموافقة بـ:

$$f(y) = {}_1F_1(a;c;y) = 1 + \frac{a}{c}\frac{y}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{y^2}{2!} + \cdots \qquad (3.54)$$

حيث ${}_1(a;c;)\ {}_1$ هي دالة هندسية فائقة متموجة.

وهكذا ،الدالة الموجية الإجمالية تكتب كما يلي:

$$\psi(s) = \mathrm{N}e^{-\lambda s}s^{\upsilon}\ {}_1F_1(-n,(\alpha_1 + 2\upsilon);(\alpha_2 + 2\lambda)s) \qquad (3.55)$$

مع المعادلات (3.50)،(3.51)،(3.53)،يمكن تحديد أطياف الطاقة والدالة الموجية الموافقة لأي كمون مركزي .هذا التحليل هو النسخة الجديدة لطريقة (NUFA) لحل معادلات شرودنجر وكلين- جوردن وديراك ذات الكمونات المركزية.

2.2- الطاقة و دالة الموجة

من خلال مقارنة المعادلة (3.25) مع معادلات طريقة (NUFA) (3.28) نحصل على مايلي :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1,\ \xi_1 = \varepsilon_{n\ell} - Q, \xi_2 = 2\varepsilon_{n\ell} - P - Q\ , \xi_3 = \varepsilon_{n\ell} - \mathrm{P} + \gamma,$$

$$\lambda = \sqrt{\varepsilon_{n\ell} - \mathrm{P} + \gamma}\ , \upsilon = (\ell + 1) \qquad (3.56)$$

ويمكن أيضا الحصول على معادلة الطاقة التالية :

$$-\mathrm{P} + \gamma + 2\sqrt{\varepsilon_{n\ell} - \mathrm{P} + \gamma}(n + \upsilon) + (n + \upsilon)^2 + Q = 0. \qquad (3.57)$$

بتعويض المعادلتين (3.26) و (3.56) في المعادلة (3.57) ،نحصل على :

$$E_{n\ell} = \ell(\ell + 1)\delta^2\hbar^2 - \beta_0\delta - \hbar^2\left[\frac{\frac{1}{\hbar^2}(\beta_0 - \gamma_0) - \ell(\ell+1)\delta - (n+\ell+1)^2\delta}{2(n+\ell+1)}\right]^2 \qquad (3.58)$$

يمكن الحصول على الدالة الموجية الموافقة لها

$$U_{n\ell}(z) = \mathbb{N}_{n\ell}\, z^{\left(\sqrt{-\frac{E_{n\ell}}{\hbar^2\delta^2} - \frac{\beta_0}{\hbar^2\delta} + \ell(\ell+1)}\right)}(1 - z)^{(\ell+1)}\ {}_2F_1(a,b,c;z). \qquad (3.59)$$

هنا ،يتم تعريف المعلمات كالتالي:

$$a = \lambda + \upsilon + \sqrt{\varepsilon_{n\ell} - Q}\ , \qquad (3.60)$$

$$b = \lambda + \upsilon - \sqrt{\varepsilon_{n\ell} - Q}, \qquad (3.61)$$

$$c = 1 + 2\lambda \ , \qquad (3.62)$$

ثم الدالة الموجية الكلية هي:

$$\psi_{nl}(r,\theta,\varphi,t) = \mathbb{N}_{n\ell}\ \frac{e^{\frac{i}{2m_0\mu\hbar}(1-e^{\mu t})E_{nl}}}{r}\, e^{-\left(\sqrt{-\frac{E_{n\ell}}{\hbar^2\delta^2}-\frac{\beta_0}{\hbar^2\delta}+\ell(\ell+1)}\right)\delta r}\left(1-e^{-\delta r}\right)^{(\ell+1)}\ {}_2F_1\left(a,b,c;e^{-\delta r}\right)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (3.63)$$

و $\mathbb{N}_{n\ell}$ هو ثابت التقنين.

3- دالة التجزئة و الخصائص الترموديناميكية

يمكن الحصول على الخواص الترموديناميكية لكمون هيلمان المحتمل من دالة التجزئة الإهتزازية للمجموعة القانونية (canonical ensemble) بإستخدام العبارة المختصرة للمعادلة (3.58) على الشكل التالي:

$$E_{n\ell} = -Q_1 - \left[\frac{Q_2}{2(n+\sigma)} - \frac{\delta}{2}(n+\sigma)\right]^2 \qquad (3.64)$$

حيث:

$$Q_1 = -\ell(\ell+1)\delta^2\hbar^2 + \beta_0\delta, Q_2 = (\beta_0 - \gamma_0) - \hbar^2\ell(\ell+1)\delta, \sigma = \ell + 1 \qquad (3.65)$$

1.3- دالة التجزئة

تعطى دالة التجزئة الإهتزازية لنموذجنا كمايلي[18]:

$$Z = \sum_{n=0}^{\eta} e^{-\beta E_{n\ell}}, \beta = (K_B T)^{-1} \qquad (3.66)$$

حيث، K_B هو ثابت بولتزمان ، T هي درجة الحرارة المطلقة ، η هو رقم الكم الإهتزازي العلوي،مع تعويض المعادلة(3.64)في المعادلة (3.66)،نحصل على دالة التجزئة الإهتزازية لنموذج هيلمان المحتمل التالية:

$$Z = \sum_{n=0}^{\eta} e^{\beta Q_1 + \beta\left[\frac{Q_2}{2(n+\sigma)} - \frac{\delta}{2}(n+\sigma)\right]^2} \qquad (3.67)$$

حيث يتم الحصول على η كما يلي : $\frac{dE_{n\ell}}{dn} = 0, \Rightarrow \eta = \sqrt{\frac{Q_2}{\delta}} - \sigma$

للحصول على جمع محدود مع القيمة λ القصوى،يمكن كتابة مجموع Poisson كالتالي[19]:

$$\sum_{n=0}^{\eta} f(x)=\frac{1}{2}[f(0)-f(\eta+1)]+\sum_{M=-\infty}^{+\infty}\int_{0}^{\eta+1} f(x)e^{-i2\pi Mx}dx \qquad (3.68)$$

في ظل التقريب الأدنى،مع إهمال التصحيحات الكمية التي تتضمن الحدود ذات:$M=0$ ،نكتب صيغة المجموع (3.68)على النحو التالي:

$$\sum_{n=0}^{\lambda} f(x)=\frac{1}{2}[f(0)-f(\eta+1)]+\int_{0}^{\eta+1} f(x)dx \qquad (3.69)$$

تطبيق ما ورد أعلاه على المعادلة (3.67) نجد العبارة التالية:

$$Z(\beta)=\frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}\right]+e^{\beta Q_1}\int_{0}^{\eta+1} e^{\beta\left[\frac{Q_2}{2(x+\sigma)}-\frac{\delta}{2}(x+\sigma)\right]^2}dx \qquad (3.70)$$

حيث: $h_1=\frac{^2}{2}-\frac{\delta}{2}\sigma,\ h_2=\frac{Q_2}{2(\eta+\sigma+1)}-\frac{\delta}{2}(\eta+\sigma+1)$.

وهنا نعرف متغير جديد $y=\frac{2}{2(x+\sigma)}-\frac{\delta}{2}(x+\sigma)$.بالنسبة للمتغير x نجد:

$$\delta(x+\sigma)^2+2y(x+\sigma)-Q_2=0 \qquad (3.71)$$

$$x+\sigma=\frac{-y\mp\sqrt{y^2+\delta Q_2}}{\delta} \quad \text{أو} \quad x=\frac{-y\mp\sqrt{y^2+\delta Q_2}}{\delta}-\sigma$$

حيث : $x\geq 0$ ، $x=\frac{-y+\sqrt{y^2+\delta Q_2}}{\delta}-\sigma$

وبالتالي فإن التكامل في المعادلة (3.70) يصبح:

$\int_0^{\eta+1} e^{\beta\left[\frac{Q_2}{2(x+\sigma)}-\frac{\delta}{2}(x+\sigma)\right]^2} dx = \frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\left(-1+\frac{y}{\sqrt{y^2+\delta Q_2}}\right)dy = -\frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\,dy +$
$\frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\frac{y}{\sqrt{y^2+\delta Q_2}}dy = I_1 + I_2$ (3.72)

حيث : $I_1 = -\frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\,dy,\ \ I_2 = \frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\frac{y}{\sqrt{y^2+\delta Q_2}}dy$

تفاصيل هذه الحسابات تكون كما يلي :

$$I_1 = -\frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\,dy,$$

$$\begin{cases}\tau = \sqrt{\beta}y\\ dy = \frac{d\tau}{\sqrt{\beta}}\end{cases}, I_1 = -\int_{\sqrt{\beta}h_1}^{\sqrt{\beta}h_2} e^{\tau^2}\,d\tau = -\frac{1}{\delta}\left\{\int_{\sqrt{\beta}h_1}^{0} e^{\tau^2}\,d\tau + \int_0^{\sqrt{\beta}h_2} e^{\tau^2}\,d\tau\right\} =$$
$$\frac{1}{\delta}\int_0^{\sqrt{\beta}h_1} e^{\tau^2}\,d\tau - \frac{1}{\delta}\int_0^{\sqrt{\beta}h_2} e^{\tau^2}\,d\tau = \frac{1}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left[erfi(\sqrt{\beta}h_1) - erfi(\sqrt{\beta}h_2)\right]$$
(3.73)

$$I_2 = \frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\frac{y}{\sqrt{y^2+\delta Q_2}}dy = \frac{1}{\delta}\int_{h_1}^{h_2} e^{\beta y^2}\,d\left(\sqrt{y^2+\delta Q_2}\right), \begin{cases}\tau = \sqrt{\beta P_1(y^2+\delta Q_2)}\\ d\sqrt{y^2+\delta Q_2} = \frac{d\tau}{\sqrt{\beta}}\end{cases},$$

$$I_2 = \frac{1}{\delta\sqrt{\beta}}\int_{\sqrt{\beta({g_1}^2+\delta Q_2)}}^{\sqrt{\beta({g_2}^2+\delta Q_2)}} e^{\tau^2}\,d\tau = \frac{1}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left[erfi\left(\sqrt{\beta\left({h_2}^2+\delta Q_2\right)}\right) - erfi\left(\sqrt{\beta\left({h_1}^2+\delta Q_2\right)}\right)\right] \quad (3.74)$$

لذا:

$$\int_0^{\eta+1} e^{\beta\left[\frac{Q_2}{2(x+\sigma)}-\frac{\delta}{2}(x+\sigma)\right]^2} dx =$$

$$\frac{1}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left[erfi\left(\sqrt{\beta}h_1\right)-erfi\left(\sqrt{\beta}h_2\right)\right]+$$

$$\frac{1}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left[erfi\left(\sqrt{\beta\left({h_2}^2+\delta Q_2\right)}\right)-erfi\left(\sqrt{\beta\left({h_1}^2+\delta Q_2\right)}\right)\right] \quad (3.75)$$

ثم نحصل على دالة التجزئة كما يلي:

$$\begin{aligned}Z(\beta)=&\frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}\right]\\&+\frac{e^{\beta Q_1}}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left\{\left[erfi\left(\sqrt{\beta}h_1\right)-erfi\left(\sqrt{\beta}h_2\right)\right]\right.\\&\left.+\left[erfi\left(\sqrt{\beta\left({h_2}^2+\delta Q_2\right)}\right)-erfi\left(\sqrt{\beta\left({h_1}^2+\delta Q_2\right)}\right)\right]\right\}\end{aligned} \quad (3.76)$$

ويتم تعريف دالة الخطأ التخيلي $erfi(x)$ على النحو التالي [20]:

$$erfi(x)=\frac{erf(ix)}{i}=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{t^2}dt \quad (3.77)$$

حيث أن مشتق دالة الخطأ التخيلي هو:

$$\frac{d}{dx}erfi(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}e^{x^2} \quad (3.78)$$

باستخدام دالة التجزئة الإهتزازية ،المعادلة (3.76) يمكن تحديد الخواص الديناميكية الأخرى لنموذج هيلمان كما هو موضح أدناه :

أ- متوسط الطاقة الإهتزازية،U

يتم تعريف متوسط طاقة الإهتزازات U كالتالي:

$$U=-\frac{\partial\ln(Z(\beta))}{\partial\beta}=-\frac{1}{Z(\beta,\lambda)}\frac{\partial(Z(\beta))}{\partial\beta} \quad (3.79)$$

حيث:

$$Z(\beta)=\frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}\right]+\frac{e^{\beta Q_1}}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left\{\left[erfi(\sqrt{\beta}h_1)-erfi(\sqrt{\beta}h_2)\right]+\left[erfi\left(\sqrt{\beta({h_2}^2+\delta Q_2)}\right)-erfi\left(\sqrt{\beta({h_1}^2+\delta Q_2)}\right)\right]\right\}$$

لدينا:

$$\frac{\partial(Z(\beta))}{\partial\beta}=\frac{Q_1}{2}e^{\beta Q_1}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}\right]+\frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[{h_1}^2e^{\beta {h_1}^2}-{h_2}^2e^{\beta {h_2}^2}\right]+\frac{1}{2\delta}e^{\beta Q_1}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left(Q_1-\frac{1}{2\beta}\right)\left\{\left[erfi(\sqrt{\beta}h_1)-erfi(\sqrt{\beta}h_2)\right]+\left[erfi\left(\sqrt{\beta({h_2}^2+\delta Q_2)}\right)-erfi\left(\sqrt{\beta({h_1}^2+\delta Q_2)}\right)\right]\right\}+\frac{e^{\beta Q_1}}{\delta\sqrt{\beta}}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}+e^{\beta({h_2}^2+Q_2)}-e^{\beta({h_1}^2+Q_2)}\right] \quad (2.80)$$

لذا:

$$U=-\frac{1}{\Delta_1}(\Delta_2+\Delta_3+\Delta_4) \quad (3.81)$$

حيث:

$$\Delta_1=\frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}\right]+\frac{e^{\beta Q_1}}{2\delta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left\{\left[erfi(\sqrt{\beta}h_1)-erfi(\sqrt{\beta}h_2)\right]+\left[erfi\left(\sqrt{\beta({h_2}^2+\delta Q_2)}\right)-erfi\left(\sqrt{\beta({h_1}^2+\delta Q_2)}\right)\right]\right\} \quad (3.82)$$

$$\Delta_2=\frac{Q_1}{2}e^{\beta Q_1}\left[e^{\beta {h_1}^2}-e^{\beta {h_2}^2}\right]+\frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[{h_1}^2e^{\beta {h_1}^2}-{h_2}^2e^{\beta {h_2}^2}\right] \quad (3.83)$$

$$\Delta_3=\frac{1}{2\delta}e^{\beta Q_1}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\left(Q_1-\frac{1}{2\beta}\right)\left\{\left[erfi(\sqrt{\beta}h_1)-erfi(\sqrt{\beta}h_2)\right]+\left[erfi\left(\sqrt{\beta({h_2}^2+\delta Q_2)}\right)-erfi\left(\sqrt{\beta({h_1}^2+\delta Q_2)}\right)\right]\right\} \quad (3.84)$$

$$\Delta_4 = \frac{e^{\beta Q_1}}{\delta\sqrt{\beta}}\left[e^{\beta h_1{}^2} - e^{\beta h_2{}^2} + e^{\beta\left(h_2{}^2+Q_2\right)} - e^{\beta\left(h_1{}^2+Q_2\right)}\right] \tag{3.85}$$

ب- الطاقة الحرة الإهتزازية

تعرف الطاقة الحرة الإهتزازية بالشكل :

$$F = -\frac{1}{\beta}\ln(Z(\beta)) \tag{3.86}$$

ثم :

$$F = -\frac{1}{\beta}\ln(\Delta_1) \tag{3.87}$$

ج- الأنتروبي الإهتزازي

بالنسبة للأنتروبيا الإهتزازية نجد:

$$S = K_\beta \ln\big(Z(\beta)\big) - K_\beta \beta \frac{\partial \ln(Z(\beta))}{\partial\beta} \tag{3.88}$$

ثم:

$$S = K_\beta \ln(\Delta_1) + \frac{K_\beta \beta}{\Delta_1}(\Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4) \tag{3.89}$$

د- السعة الحرارية النوعية الإهتزازية

تعرف السعة الحرارية النوعية الإهتزازية بالشكل:

$$C = K_\beta \beta^2 \frac{\partial^2 \ln(Z(\beta))}{\partial\beta^2} \tag{3.90}$$

لذا :

$$C = K_\beta \beta^2 \frac{\partial}{\partial\beta}\left[\frac{1}{\Delta_1}(\Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4)\right] \tag{3.91}$$

نجد :

$$C = -K_\beta \beta^2 \frac{(\Delta_2+\Delta_3+\Delta_4)^2}{\Delta_1{}^2} + \frac{K_\beta \beta^2}{\Delta_1}(\nabla_1 + \nabla_2 + \nabla_3) \tag{3.92}$$

حيث:

$$\nabla_1 = \frac{\partial\Delta_2}{\partial\beta} = \frac{Q_1{}^2}{2}e^{\beta Q_1}\left[e^{\beta h_1{}^2} - e^{\beta h_2{}^2}\right] + Q_1{}^2 e^{\beta Q_1}\left[e^{\beta h_1{}^2} - e^{\beta h_2{}^2}\right] + \frac{e^{\beta Q_1}}{2}\left[h_1{}^4 e^{\beta h_1{}^2} - h_2{}^4 e^{\beta h_2{}^2}\right] \tag{3.93}$$

$$\nabla_2 = \frac{\partial \Delta_3}{\partial \beta} = \frac{1}{2\delta} e^{\beta Q_1} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left[\left(Q_1 - \frac{1}{2\beta} \right)^2 + \frac{1}{2\beta^2} \right] \left\{ \left[erfi(\sqrt{\beta} h_1) - erfi(\sqrt{\beta} h_2) \right] + \left[erfi\left(\sqrt{\beta ({h_2}^2 + \delta Q_2)} \right) - erfi\left(\sqrt{\beta ({h_1}^2 + \delta Q_2)} \right) \right] \right\} + \frac{\left(Q_1 - \frac{1}{2\beta} \right)}{\delta \sqrt{\beta}} e^{\beta Q_1} \left[e^{\beta {h_1}^2} - e^{\beta {h_2}^2} + e^{\beta ({h_2}^2 + Q_2)} - e^{\beta ({h_1}^2 + Q_2)} \right] \tag{3.94}$$

$$\nabla_3 = \frac{\partial \Delta_4}{\partial \beta} = \frac{Q_1}{\delta \sqrt{\beta}} e^{\beta Q_1} \left[e^{\beta {h_1}^2} - e^{\beta {h_2}^2} + e^{\beta ({h_2}^2 + Q_2)} - e^{\beta ({h_1}^2 + Q_2)} \right]$$

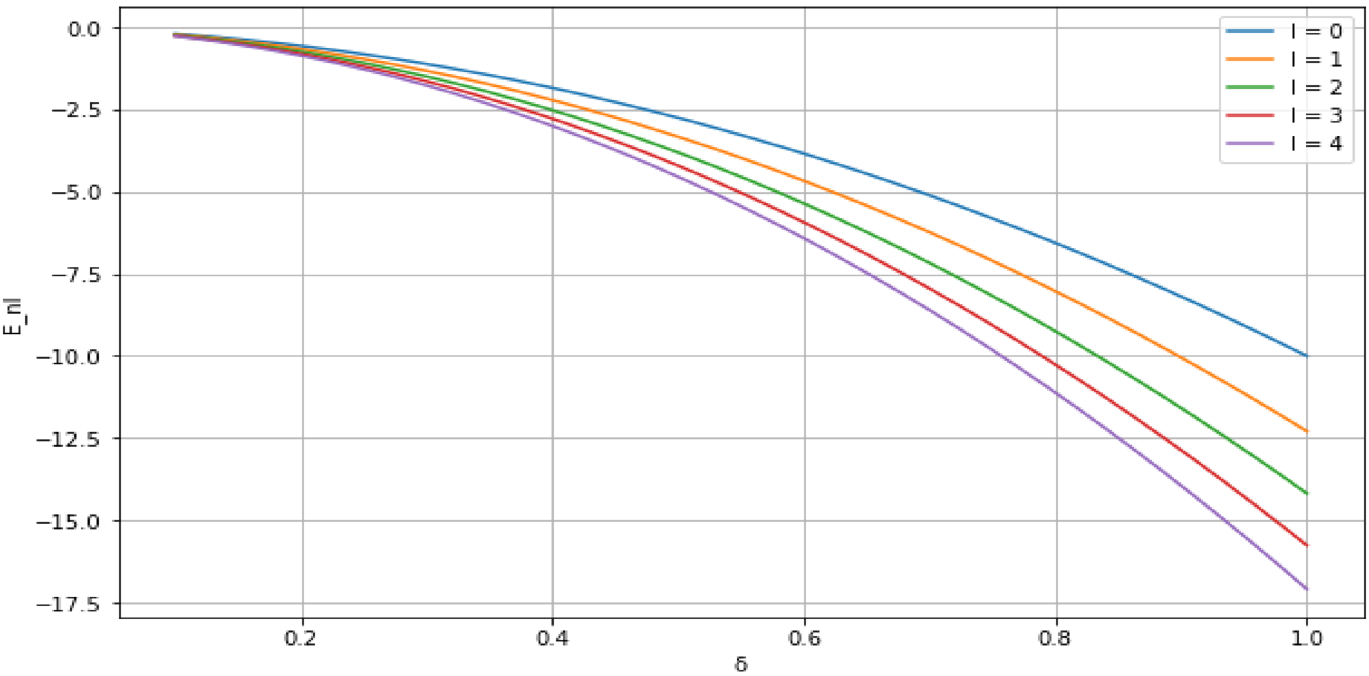
$$+ \frac{e^{\beta Q_1}}{\delta \sqrt{\beta}} \left[{h_1}^2 e^{\beta {h_1}^2} - {h_2}^2 e^{\beta {h_2}^2} + ({h_2}^2 + Q_2) e^{\beta ({h_2}^2 + Q_2)} - ({h_1}^2 + Q_2) e^{\beta ({h_1}^2 + Q_2)} \right] \tag{3.95}$$

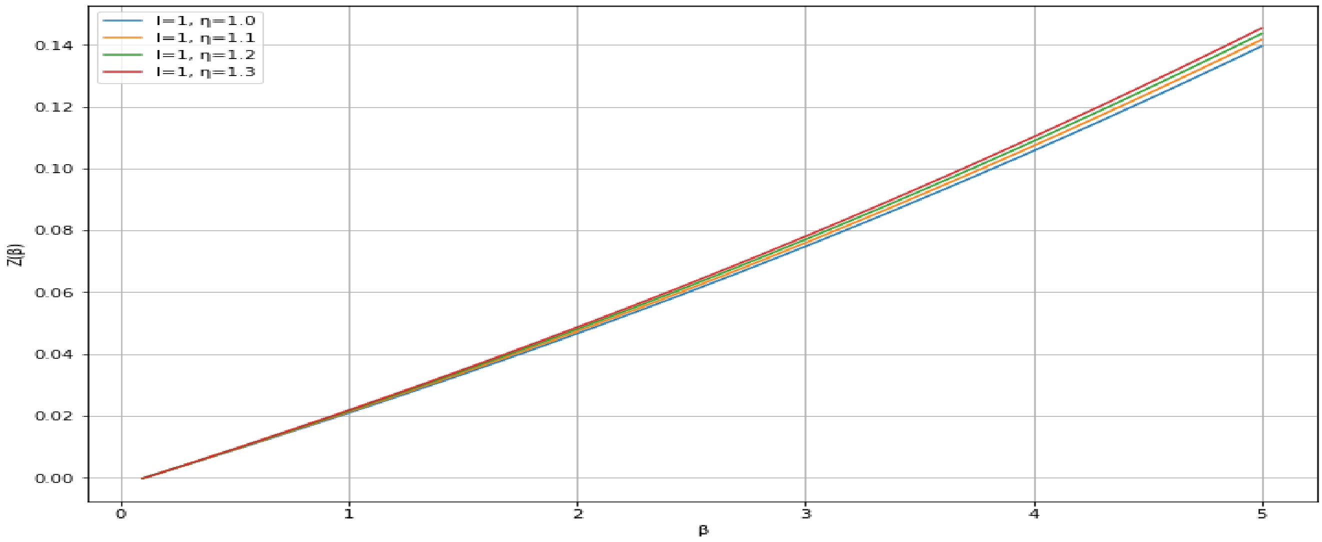
2.3- مخططات الخصائص الترموديناميكية

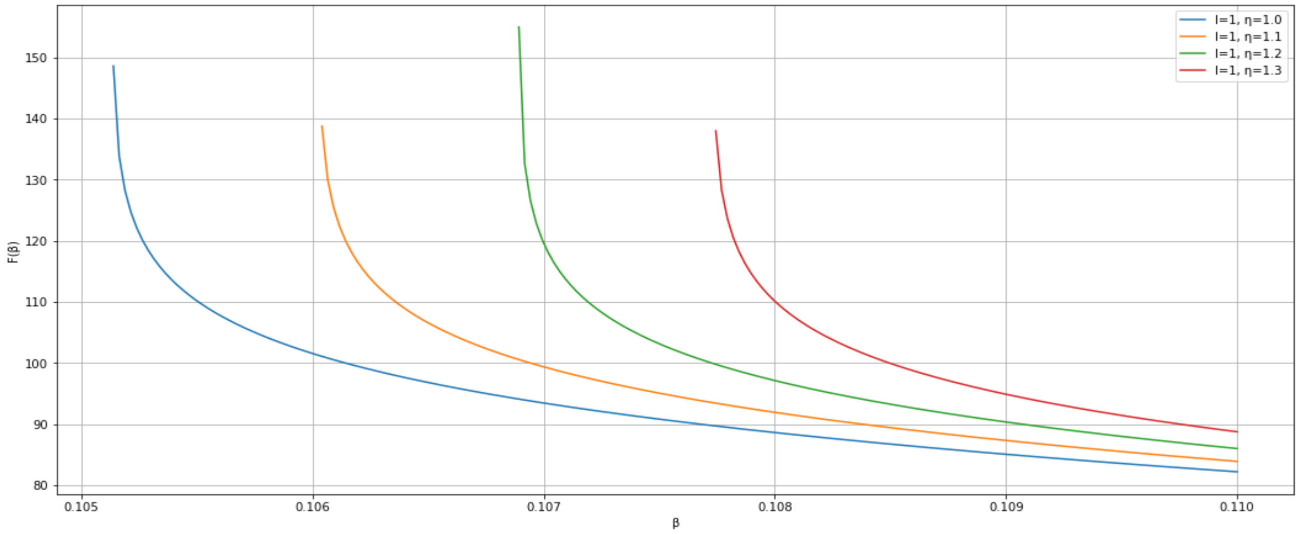
في هذا الجزء نقدم مخططات الطاقة و الخصائص الترموديناميكية وذلك بإجراء برمجة بلغة البايثن على علاقاتها :

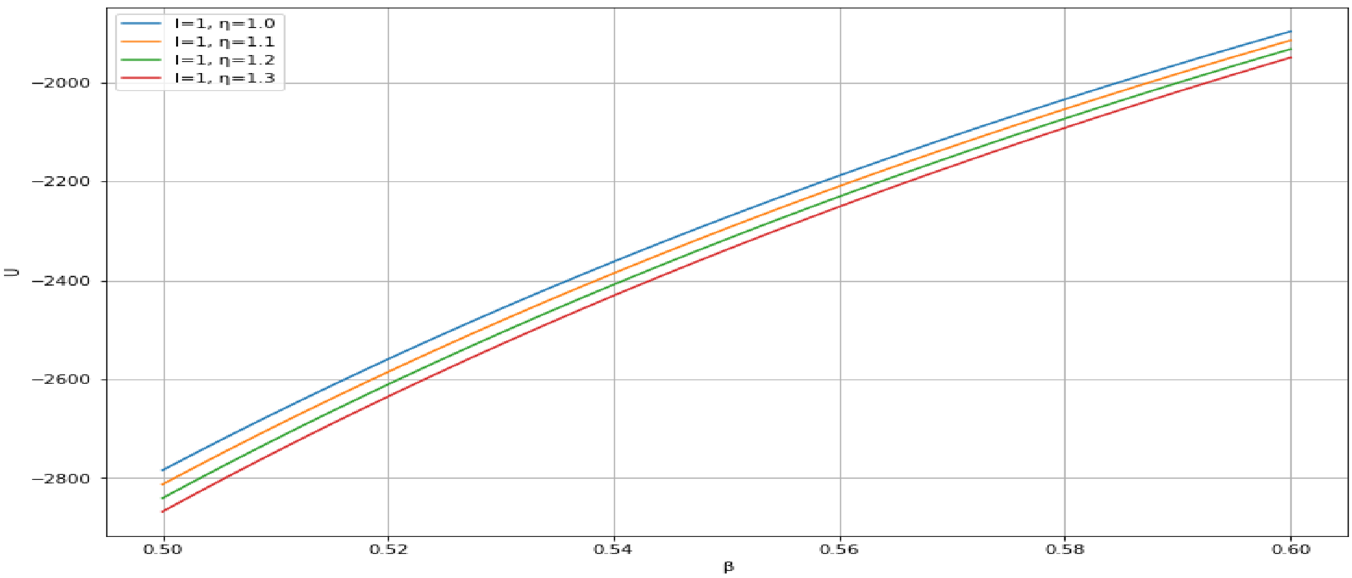
$$\eta \rightarrow 1.0, 1.1, 1.2, 1.3$$

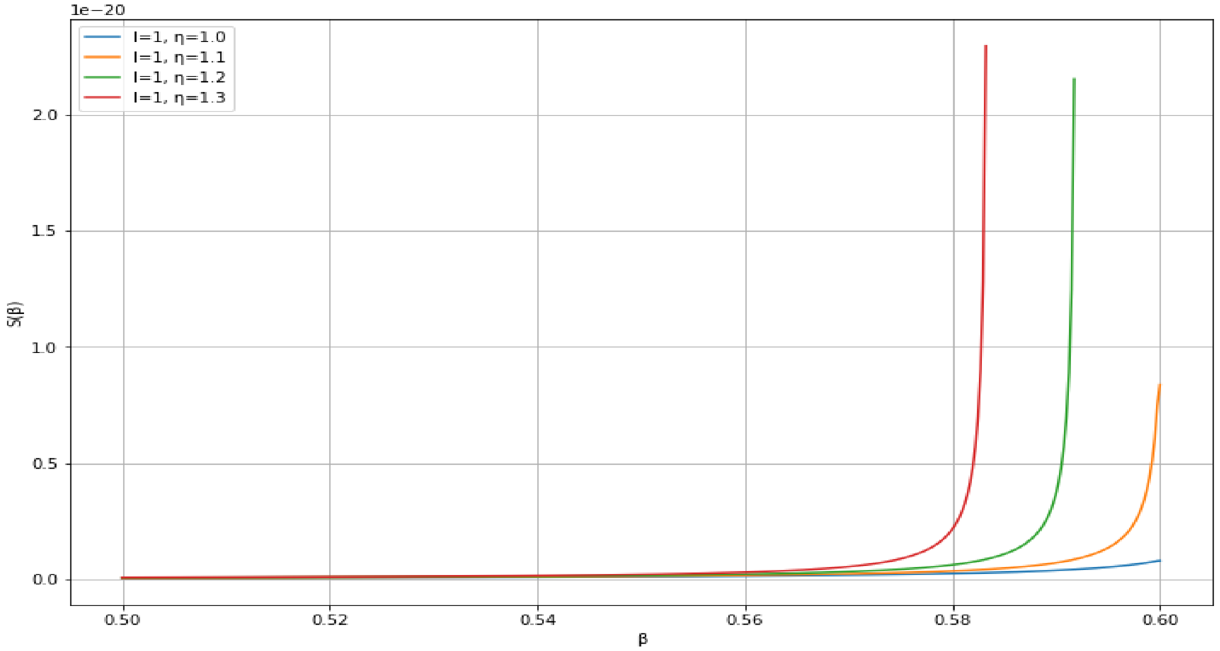
$$\hbar = 2m_0 = 1, \delta = 0.01, A_0 = 0.5, B_0 = 1.5.$$

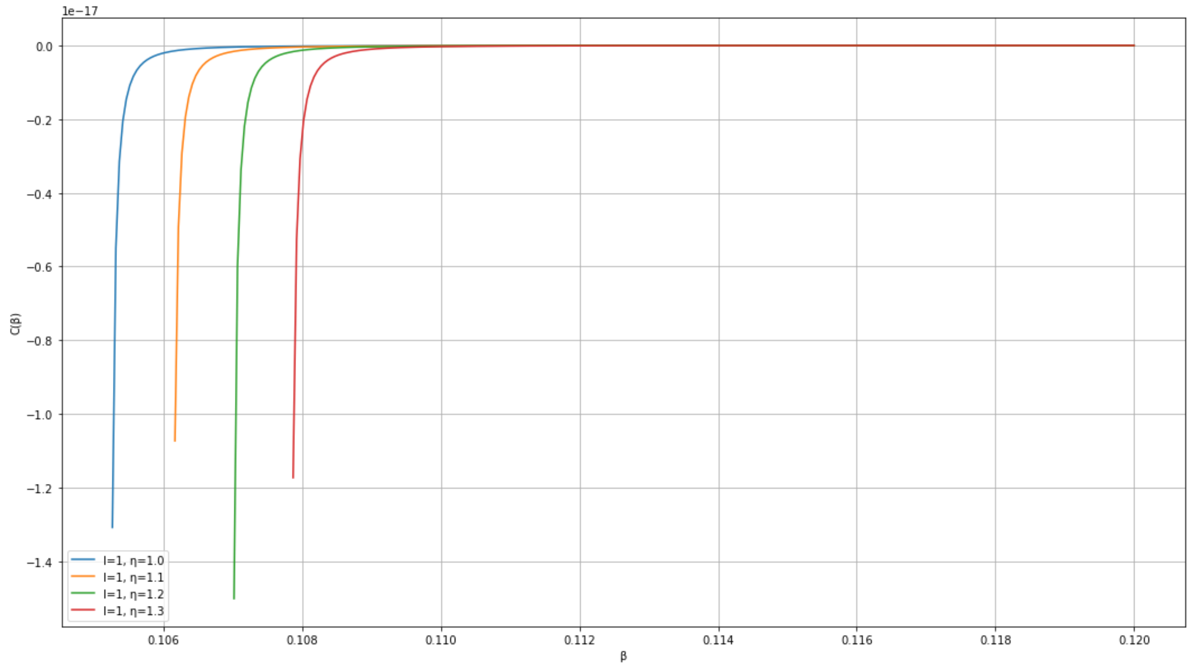



l=1, η=1.0
l=1, η=1.1
l=1, η=1.2
l=1, η=1.3
Z(β)
β


l=1, η=1.0
l=1, η=1.1
l=1, η=1.2
l=1, η=1.3
F(β)
β


l=1, η=1.0
l=1, η=1.1
l=1, η=1.2
l=1, η=1.3
U
β


1e−20
l=1, η=1.0
l=1, η=1.1
l=1, η=1.2
l=1, η=1.3
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
S(β)
0.50
0.52
0.54
0.56
0.58
0.60
β


1e−17
0.0
−0.2
−0.4
−0.6
−0.8
−1.0
−1.2
−1.4
C(β)
l=1, η=1.0
l=1, η=1.1
l=1, η=1.2
l=1, η=1.3
0.106
0.108
0.110
0.112
0.114
0.116
0.118
0.120
β

خاتمة عامة

خاتمة عامة

في هذه المذكرة قمنا بحل معادلة شرودينجر المتعلقة بالزمن للكمون الجديد لهيلمان باستعمال طريقة جديدة تدعى التحليل الدالي لـِ نيكيفوروف–أوفاروف وطريقة فصل المتغيرات بتطبيق تقريب جرين ألدريتش لحد الطرد المركزي. هذا الكمون لم يتم لحد الأن دراسته في الأدبيات. كمون هيلمان هو تراكب لكموني كولوم و يوكاوا. تم إستخدام كمون هيلمان من قبل العديد من الباحثين لتمثيل التفاعل نواة– الكترون أو التفاعل أيون– الكترون. تم إستخدامه أيضا لدراسة جزيئات الهيدريد القلوي ومسائل التأين في القشرة الداخلية .وقد تحصلنا على طيف الطاقة و كذا الدالة الموجية كدالة هندسية فائقة لغوص. و قد إمتدت دراسة الحالة المرتبطة إلى الخواص الديناميكية الحرارية حيث تم إستخدام الطاقة التي تم الحصول عليها في الحالة المرتبطة لحساب دالة التقسيم والتي بدورها أستخدمت لحساب الخواص الديناميكية الحرارية مثل متوسط الطاقة والطاقة الحرة والأنتروبي والسعة الحرارية للإهتزازات، و قمنا في الأخير بتفسير هذه الدوال الديناميكية الحرارية بيانيا.

جدول المصطلحات

عربي _ إنجليزي

Terminology

المصطلح بالإنجليزي	المصطلح بالعربي
Hamiltonian	الهاميلتونيان
Non stationary quantum dynamical systems	الأنظمة الديناميكية الكمومية غير المستقرة
Hellmann potential	كمون هيلمان
Coulomb potential	كمون كولومب
Yukawa potential	كمون يوكاوا
Litterature	الأدبيات
Nucleus- electron interaction	التفاعل النواة- الإلكترون
Ion - electron interaction	التفاعل الأيون- الإلكترون
Alkali hydride molecules	جزيئات الهيدريد القلوي
Ionization	التأين
Schrödinger equation	معادلة شرودنجر
Informations	المعلومات
Physical properties	الخصائص الفيزيائية
Energy	الطاقة
Momentum	الزخم
Particle coordinates	إحداثيات الجسيم
Frequency	التردد
Wave length	الطول الموجي
Quantum mechanical system	النظام الميكانيكي الكمي
Probability amplitude	سعة الاحتمال
Wave function phase	طور الدالة الموجية
Atomic physics	الفيزياء الذرية
Nuclear physics	الفيزياء النووية
High and condensed energy physics	فيزياء الطاقة المكثفة والعالية
Particle physics	فيزياء الجسيمات
Chemical physics	الفيزياء الكيميائية
Energy spectrum	طيف الطاقة
Wave functions	الدوال الموجية
Second order differential equation of the hypergeometric type	معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية من النوع الهندسي الفائق
Nikiforov-uvarov functional analysis method	طريقة التحليل الدالي لنيكيفوروف-أوفاروف

Variables separation method	طريقة فصل المتغيرات
Greene-aldrich approximation to the centrifugal term	تقريب جرين ألدريتش لحد الطرد المركزي
Nikiforov-uvarov method	طريقة نيكيفوروف-أوفاروف
Parametric nikiforov-uvarov method	طريقة نيكيفوروف-أوفاروف الوسيطية
Functional analysis method	طريقة التحليل الدالي
Polynomial	كثيرات الحدود
Strict mathematical manipulations	التلاعبات الرياضية الصارمة
Thermodynamic properties	الخواص الديناميكية الحرارية
Vibrational partition function	دالة التجزئة الإهتزازية
Mean vibration energy	متوسط الطاقة الإهتزازية
Vibrational free energy	الطاقة الحرة الإهتزازية
Vibrational entropy	الأنتروبي الإهتزازي
Vibrational heat capacity	السعة الحرارية الإهتزازية
Nonstationary shrödinger equation	معادلة شرودنجر غير المستقرة
Approximation methods	طرق تقريبية
Exact methods	طرق دقيقة
Quantum mechanics	ميكانيكا الكم
Classical physics	الفيزياء الكلاسيكية
Time independent schrödinger equation	معادلة شرودنجر مستقلة عن الزمن
Laplacian operator	مؤثر اللابلاسيان
Central potential	كمون مركزي
Spherical coordinates	الإحداثيات الكروية
Eigenvalues	القيم الذاتية
Eigenvectors	الأشعة الذاتية
States space	فضاء الحالات
Spherical harmonics	التوافقيات الكروية
Radial function	الدالة القطرية
Harmonic oscillator	الهزازالتوافقي
Unitary transformation	التحويل الأحادي
State vector	شعاع الحالة
Hilbert space	فضاء هيلبرت

Unitary operators	المؤثرات الأحادية
Adjoint operator	المؤثر المرافق
Time evolution operator	مؤثر التطور الزمني
Initial state	الحالة الابتدائية
Unit operator	مؤثر الوحدة
Infinitesimal unitary time evolution operators	مؤثرات التطور مع الزمن الواحدية متناهية الصغر
Particle diffusion	انتشارالجسيمات
Diffusion matrix	مصفوفة انتشار
Observables	الملحوظات
Reference	معلم
Invariants theory	نظرية اللا متغيرات
Perturbation theory time-dependent	نظرية الإضطرابات المتعلقة بالزمن
Non pertubative hamiltonian	الهاميلتونيان غير المضطرب
Variational method	الطريقة التغايرية
Minimum value	القيمة الصغرى
Fundamental level	المستوي الأساسي
Sudden approximation	التقريب الفجائي
Adiabatic approximation	التقريب الأديباتيكي
Geometrical phase	الطور الهندسي
Hermitian operator	مؤثر هرميتي
Thermodynamics	الديناميكا الحرارية
Isolated system	الجملة المعزولة
Closed system	الجملة المغلقة
Open system	الجملة المفتوحة
Homogeneous systems	جمل متجانسة
Heterogeneous systems	جمل غير متجانسة
Transformations of systems thermodynamic	تحولات الجمل الترموديناميكية
Reversible processes	التحولات العكوسة
Irreversible processes	التحولات غير العكوسة
System state	حالة النظام
Intensive quantities	المقادير المركزة

Extensive quantities	المقادير الممتدة
State variables	متغيرات الحالة
Temperature	درجة الحرارة
Pressure	الضغط
Volume	الحجم
Number of moles	عدد المولات
Mass	الكتلة
State function	دالة الحالة
Equilibrium state	حالة إتزان
Ideal gas law	القانون العام للغازات المثالية
Thermodynamic functions	الدوال الترموديناميكية
Kinetic energy	الطاقة الحركية
Potential energy	الطاقة الكامنة
Enthlpy	الأنتالبي
Free enthalpy	الأنتالبي الحرة
Free energy	الطاقة الحرة
Entropy	الأنتروبي
Laws of thermodynamics	مبادئ الترموديناميك
First law	المبدأ الأول
Statistical physics	الفيزياء الإحصائية
Canonical ensemble	المجموعة القانونية
Superposition	تراكب
Screening parameter	معامل الحجب
Angular momentum	الزخم الزاوي
Change variable	تبديل المتغير
Normalization constant	ثابت التقنين
Angular momentum quantum number	العدد الكمي للزخم الزاوي
Magnetic quantum number	العدد الكمي المغناطيسي
Confluent hypergeometric function	دالة هندسية فائقة متموجة
Thermodynamic properties .plots	مخططات الخصائص الترموديناميكية

قائمة المصادر والمراجع

- قائمة المصادر والمراجع

[**1]**Gombas, P., (1949). Kristalle. *Die Statistische Theorie des Atoms und ihre* Anwendungen, 279-337.

[**2]** Callaway, J. (1958). Electron energy bands in sodium. *Physical Review*, *112*(2), 322 ; Iafrate, G. J. (1966). Calculation of Ionization Potential of Al and Si+ Using a Pseudocore Potential. *The Journal of Chemical Physics*, *45*(3), 1072-1072 ; Callaway, J., &Laghos, P. S. (1969). Application of the pseudopotential method to atomic scattering. *Physical Review*, *187*(1), 192; McGinn, G. (1970). Atomic and molecular calculations with the pseudopotential method. VII one-valence-electron photoionization cross sections. *The Journal of Chemical Physics*, *53*(9), 3635-3640.

[3]Ikot, A. N., Okorie, U. S., Amadi, P. O., Edet, C. O., Rampho, G. J., & Sever, R. (2021). The Nikiforov–Uvarov-Functional Analysis (NUFA) Method: A new approach for solving exponential-type potentials. *Few-Body Systems*, *62*, 1-16.

[4]. Nikiforov, A. F., &Uvarov, V. B. (1988). *Special functions of mathematical physics* (Vol. 205). Basel: Birkhäuser.

[**5]** W. Sun, Y. Liu, M. Li, Q. Cheng and L. Zhao. Study on heat flow transfer characteristics and main influencing factors of waxy crude oil tank during storage heating process under dynamic thermal conditions. Energy, 269 (2023) 127001.

[6] E. Schrödinger, "The Non Relativistic Équation Of The De Broglie Waves," Ann. Physik 79(1926)361-376.

[7] C. Cohen-Tannoudji, Et *Al*. Mécanique Quantique Volume 1 Et 2, Hermann Edition, France (1973).

[8] S. Menouar, Thèse De Doctorat Es Sciences, (Université De Sétif, 2009).

[9] C.J. Efthimiou and D. Spector, Phys. Rev. A 49 (1994) 2301.

[10] Lewis HrJr And RiesenfeldWb, An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field J. Math.Phys. 10 1458 (1969).

[**11**]A.M.Markov,Invariant And The Evolution Of Nonstationnary Quantum Systems,(Newyork,1989).

[**12**] د. إبـراهيم محمـود أحمـد ناصـر ،مبـادئ أساسـية فـي الفيزيـاء الإحصـائية (الظهـران ،1245هـ - 1246)

[**13**]د.زبيدي عمـار،دروس وتمـارين فـي الـديناميكا الحراريـة ،كيميـاء2.(جامعـة الشـهيد حمـة لخضر-الوادي)،**(2023/11/27)**

[14]Christian Ngô, Hélène Ngô; «Introduction à la Physique statistique, Cours et exercices corrigés»; 3e édition; Dunod, Paris, 2008

[15] Greene, R. L., & Aldrich, C. (1976). Variational wave functions for a screened Coulomb potential. *Physical Review A*, *14*(6), 2363.

[16]Tezcan, C., & Sever, R. (2009). A general approach for the exact solution of the Schrödinger equation. International Journal of Theoretical Physics, 48, 337-350.

[17]Ikot, A. N., Okorie, U. S., Rampho, G. J., &Amadi, P. O. (2021). Approximate analytical solutions of the Klein–Gordon equation with generalized Morse potential. International Journal of Thermophysics, 42, 1-14.

[18]Yahya WA, Oyewumi KJ (2015) Thermodynamic properties andapproximate solutions of the l-state Poschl–Teller-type potential. J Assoc Arab Univ Basic ApplSci 21:53–58.

[19]G. J. Rampho , A. N. Ikot , C. O. Edet& U. S. Okorie, Energy spectra and thermal properties of diatomic molecules in the presence of magnetic and AB fields with improved Kratzer potential, Mol. Phys, (2021).

[**20**]Jia CS, Wang CW, Zhang LH, Peng XL, Zeng R, You XT (2017) Partition function of improved Tietz oscillators. ChemPhysLett 676:150

الملخص

تمت دراسة معادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن لكمون هيلمان. هذا الكمون لم يتم دراسته في الأدبيات. هذا الكمون هو تراكب كمون كولومب وكمون يوكاوا. للحصول على طيف الطاقة والدوال الموجية، استخدمنا طريقة جديدة تسمى طريقة التحليل الدالي ِ لنيكيفوروف–أوفاروف وطريقة فصل المتغيرات من خلال تقريب جرين–ألدريتش على حد الطرد المركزي. تم كتابة الدالة الموجية التي تم الحصول عليها كدالة غاوس ما فوق هندسية.تم استخدام معادلة الطاقة المحصل عليها لحساب دالة التقسيم التي يتم من خلالها حساب الخواص الديناميكية الحرارية مثل متوسط الطاقةوالطاقةالحرةوالأنتروبي والسعة الحرارية النوعية.

الكلمات المفتاحية: طريقة التحليل الدالي لنيكيفوروف – أوفاروف، معادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن، كمون هيلمان، الدالة الموجية، الأنتروبي.

Abstract

The time dependent Schrödinger equation for The Hellmann potential is studied. This potential is not studied in the literatures. The Hellmann potential is a superposition of the Coulomb potential and the Yukawa potential. To obtain the energies spectrum and the wave functions we use a new method called Nikiforov–Uvarov-Functional Analysis method and the method of variables separation by applying a Green-Aldrich approximation scheme to the centrifugal term. The wave function obtained is written as a Gauss hypergeometric function. The energy equation obtained was used to calculate the partition function from where the thermodynamic properties such as the mean energy, free energy, entropy and specific heat capacity, are calculated.

- **Keywords**: *The Nikiforov–Uvarov-FunctionalAnalysismethod, time dependent Schrödinger equation, Hellmann potential, wave function, the entropy*.

Résumé

L'équation de Schrödinger dépendant du temps pour le potentiel de Hellmann est étudiée. Ce potentiel n'est pas étudié dans les littératures. Le potentiel de Hellmann est un superposition du potentiel de Coulomb et du potentiel de Yukawa. Pour obtenir le spectre des énergies et les fonctions d'onde, nous utilisons une nouvelle méthode appelé méthode d'analyse fonctionnelle de Nikiforov – Uvarov et la méthode de séparation des variables en appliquant un schéma d'approximation de Green-Aldrich au terme centrifuge. La fonction d'onde obtenue 'écrit sous forme de fonction hypergéométrique de Gauss. L'équation énergétique obtenue a été utilisée pour calculer la fonction de partition à partir de laquelle les propriétés thermodynamiques telles que l'énergie moyenne, l'énergie libre, l'entropie et la capacité thermique spécifique sont calculées.

Mots clés *: La méthode d'analyse fonctionnelle Nikiforov – Uvarov, l'équation de Schrödinger dépendante du temps, le potentiel de Hellmann, la fonction d'onde, l'entropie*.