كلية التربية للعلوم الصرفة / قسم الكيمياء
المرحلة الرابعة

كيمياء الكم

بعض المفاهيم الأساسية وأسس الميكانيك التقليدي

- النظم الإحداثية ، الأعداد المعقدة ، المؤثرات ، الدالات الموجية المقبولة ، ، معادلة القيمة الذاتية، النظام ألاحتفاظي، قانون نيوتن في الحركة، معادلة لاكرانج و هاملتون في الحركة.

أسباب ظهور ميكانيك الكم

- إشعاع الجسم الأسود ، التأثير الكهروضوئي ، الخطوط الطيفية للذرات ، نموذج رذرفورد- بور للذرة.

ميكانيك الكم

- فرضيات ميكانيك الكم ، عامل هيرفي ، التعامدية والتناسقية، معادلة شرودنكر على جسيم في صندوق ، المهتز التوافقي ، الدوار الصلد ، ذرة الهيدروجين

طرق التقريب لحل معادلة شرودنكر

طريقة التغيير

طريقة التشويش

الفصل الأول : بعض المفاهيم الأساسية وأسس الميكانيك التقليدي

1- النظم الإحداثية Coordinate Systems:

استخدمت الرياضيات في معظم مجالات الكيمياء الفيزياوية وبالأخص في ميكانيك الكم والتركيب الجزيئي وان أي نظام إحداثي يمثل طريقة لتعيين موقع جسيم (او أي نقطة في الفراغ). هناك أنواع مختلفة من الأنظمة الإحداثية أهمها:

الإحداثيات الكارتيزية Cartesian Coordinates.

الإحداثيات الكروية – القطبية Spherical-Polar Coordinate.

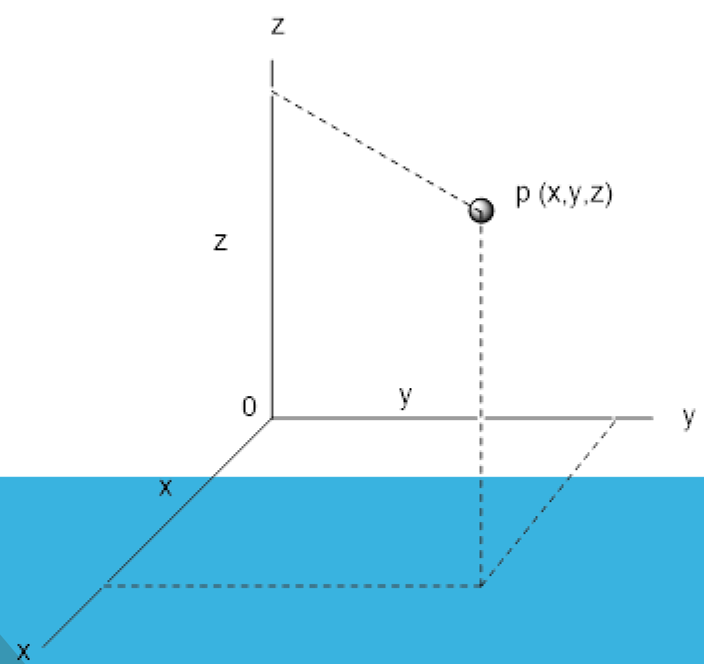
الإحداثيات الاسطوانية Cylindrical Coordinate.

الإحداثيات الاهليجية متحدة البؤرة Confocal Ellipsoidal Coordinates.

إن اختيار أي نوع من هذه الإحداثيات يعتمد بالأساس على المسألة المراد حلها بحيث يجعلها أكثر بساطة.

- الإحداثيات الكارتيزية (الديكارتية) Cartesian Coordinates

هذه الإحداثيات أكثر شيوعا" في الاستخدام ووفقا لهذا النظام يمكن تمثيل موقع النقطة (p) في الفراغ بواسطة مسافات على طول ثلاثة محاور متعامدة هي (x,y,z) كما في الشكل التالي:



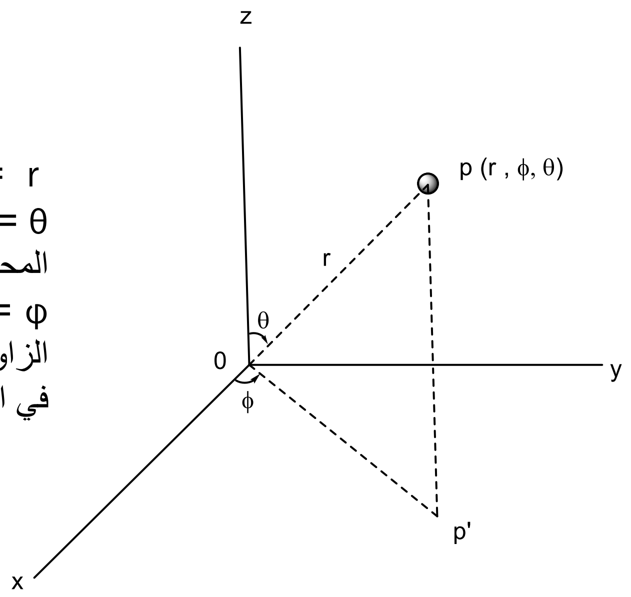
2 - الإحداثيات الكروية – القطبية Spherical-Polar Coordinate

في هذا النظام الاحداثي يمكن تمثيل النقطة p في الفراغ بواسطة مسافة (r) وزاويتين (θ و φ) كما في الشكل التالي:

r = طول الشعاع p o

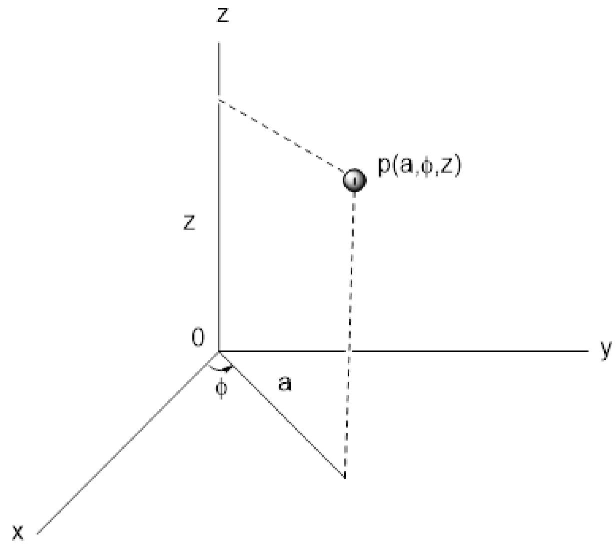
θ = الزاوية القطبية polar angle : وهي الزاوية المحصورة بين الشعاع o p والمحور z

φ = الزاوية السمتية azimuthal angle : وهي الزاوية المحصورة بين المحور x ومسقط الخط op في المستوي xy .



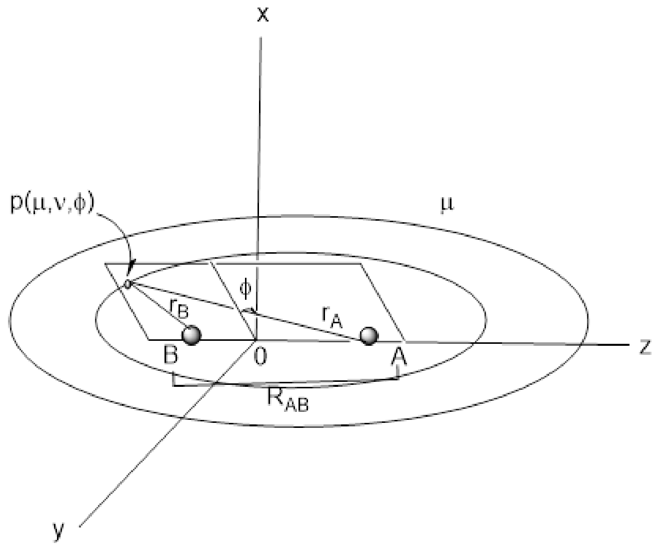
- الإحداثيات الاسطوانية Cylindrical Coordinate

تحدد النقطة p بواسطة مسافتين وزاوية ، المسافة الأولى هي z وتمثل طول مسقط النقطة p على المستوي xy والمسافة الثانية هي a وهي طول مسقط النقطة op على المستوي xz اما الزاوية φ فهي الزاوية المحصورة بين محور الخط 'op والمستوي xy كما في الشكل التالي:



الإحداِثيات الاهليجية متحدة البؤرة Confocal Ellipsoidal Coordinates

تستخدم هذه الإحداثيات للمسائل المتضمنة مركزين A, B متباعدين بمسافة ثابتةR ، إن الخطين Ap و Bp تحدد مستوي النقطة p أما الخط المتكون من تقاطع هذا المستوي مع المستوي xy فأنه يحدد الزاوية φ . ويمكن تعريف إحداثيات النقطة p بـ (μ,υ,φ) من تحديد المسافتين r_Aوr_B على طول الخطين Ap و Bp على التوالي حيث إن:



الأعداد المعقدة (المركبة):

إن نظام الأعداد الحقيقية لم يعد كافيا" لتلبية الاحتياجات الرياضية وخاصة فيما يتعلق بالفيزياء النظرية .

- لا يوجد عدد حقيقي يوافق المعادلة

عدد خيالي

- العدد المركب (او العدد المعقد) : هو العدد الذي يتكون من جزئين جزء حقيقي وجزء خيالي.

$(z = x + i\,y$ أعداد حقيقية $y, x)$ عدد خيالي i

- لكل عدد مركب (معقد) مرافق معقد z^*

$z^* = x - i\,y$

من حاصل ضرب القيمة المطلقة للعددين (المركب والمرافق z^* , z) نحصل على مقدار حقيقي موجب :

أما طريقة جمع الأعداد المركبة فيكون بجمع الأعداد الحقيقية مع بعضها والأجزاء الخيالية مع بعضها كلا" على انفراد فمثلا" $(a + b)$

$a = x1 + i\,y1\,,\ \ b = x2 + i\,y2$

$a + b = (x1 + x2) + i\,(y1 + y2)$

$a - b = (x1 - x2) - i\,(y1 - y2)$

المؤثرات Operators

ان كل عملية رياضية محددة مثل إضافة كمية معينة او الضرب بها .... الخ يمكن تمثيلها بوساطة رمز خاص يسمى مؤثرا" operator . فالمؤثر هو رمز يدل على عملية او سلسلة عمليات رياضية تجرى على دالة وتغيرها الى دالة جديدة.

مثال 1 : إذا كان و مؤثران بحيث إن يمثل إضافة a الى الدالة f و يمثل عملية ضرب الدالة f بـ c فأن :

c f = (a + f)

f = (C . f) + a

وفي حالة التعامل مع اكثر من مؤثر فأنه يجب مراعاة تنظيم عمل المؤثرات بنفس الترتيب الذي تذكر فيه والمعتاد عليه ان نبدأ دائما" بالمؤثر الكائن على جهة اليمين ونتجه نحو اليسار.

إذا كان   =   فأن المؤثرين يقال إنهما متبادلان Commute وتدعى الكمية   - بالمبدل Commutator وتكتب غالبا" بالشكل[,   ] فإذا كان   ، متبادلين فعندئذ تكون قيمة المبدل صفرا" وبالعكس عندما تكون قيمة المبدل صفرا" فأن   ، متبادلان.

أنواع المؤثرات الرياضية:

المؤثرات الخطية linear operators .

المؤثرات غير الخطية non – linear operators .

1- المؤثرات الخطية linear operators

يكون المؤثر خطيا" إذا توفر فيه الشرط التالي:

= (f + g)   f + g او

n   f   = n f   حيث ان n كمية ثابتة

يعتبر d/dx مؤثرا" خطيا" .

معادلات القيمة الذاتية (معادلة ايكن) Eigen value equation

ان المعادلة من النوع تدعى بمعادلة القيمة الذاتية حيث ان هو المؤثر على الدالة eigen function التي تسمى الدالة الذاتية و a هو ثابت ايكن eigen value.

Ex. : الدالة هي دالة ذاتية للمؤثر مع قيمة ثابت = 3 ويمكن الحصول على هذه القيمة عن طريق اجراء عملية التفاضل

كذلك الدالة sin 3x هي دالة ذاتية للمؤثر

الدالة هي sin3x و الثابت = -9

$$\frac{d^2}{dx^2}\sin 3x = -9\sin 3x$$

$$\frac{d}{dx}\sin 3x = 3\cos 3x$$

$$\frac{d}{dx}(3\cos 3x) = -9\sin 3x$$

الميكانيك التقليدي (الكلاسيكي)

Classical Mechanic

يعتبر الميكانيك التقليدي (الكلاسيكي) من اقدم فروع الفيزياء وتطور على ايدي علماء اهمهم اسحق نيوتن التي تميزت بما يلي:

تطبيقاتها العملية المباشرة ودرجة الدقة التي تعتبر كافية لوصف الاجسام المنظورة والتنبؤ بسلوكها.

ظهر عجزها عند تطبيقها على الجسيمات المجهرية كالذرات او مكونات الذرات (الالكترون , النيوترون والبروتون) او الاجسام التي تسير بسرعة هائلة تقترب من سرعة الضوء. وتقود هذه الى نتائج تناقض النتائج العملية المستحصلة من الظاهر المجهرية التي تحدث في حقول الفيزياء الذرية والنووية مما ادى هذا التناقض الى ظهور ميكانيك الكم او النظرية النسبية لاينشتاين.

وعلى الرغم من تفوق الميكانيك الكمي في معالجة المسائل التي تتعامل مع الجسيمات الصغيرة والتي تتحرك في نطاق السرعة الهائلة الا ان الميكانيك التقليدي بقي محتفظا" بأهميته التي تتجلى باعتباره القاعدة الاساسية التي يستند عليها هيكل الفيزياء الحديثة.

لا يوجد حد قاطع يفصل بين الميكانيك التقليدي والميكانيك الكمي بل هناك مناطق تداخل بينهما وان بعض قوانين الميكانيك التقليدي لازالت تستخدم في مجال الميكانيك الكمي لهذا السبب يمكن اعتبار الميكانيك الكمي امتداد للميكانيك التقليدي ولكن بمجموعة محددة من القوانين وبنمط وصفي خاص.

ميكانيك الكم Quantum Mechanic

في نهاية القرن التاسع عشر ظن كثير من الفيزيائيين ان العالم كله اصبح مفهوما ولم يتبقى الا بضعة ظواهر تحتاج الى تفسير منها كيفية توزيع الطاقة على الترددات او الاطوال الموجية في الاجسام الساخنة المثالية (أو ما يسمى اشعاع الجسم الاسود Black body radiation) حيث لوحظ وجود تناقض مع ما تقرره النظرية الكهرومغناطيسية وظاهرة التأثير الكهروضوئي حيث وجد ان الطاقة الحركية للاليكترونات المنبعثة لاتتناسب مع شدة الضوء بل مع تردده وكانت المشكلة الكبرى القائمة منذ زمن هي مشكلة فهم كيفية ظهور الاطياف اللونية الخطية البراقة والمعتمة عند تسخين الغازات تحت ضغوط واطئة وتداخلت هذه المشاكل كلها لدى بعض الفيزيائيين حتى غدت غير قابلة للحل لكن عموم الفيزياء كان قائما" على ثلاث اركان متينة هي :-

قوانين نيوتن في الحركة والجاذبية ومايتعلق بها من صياغات فيما يسمى ميكانيك لاكرانج وهاملتون.

نظرية ماكسويل في الكهرومغناطيسية وما يتعلق بها من علوم البصريات

علوم الداينميكا الحرارية والميكانيك الاحصائي ومايتعلق بها من قوانين الاشعاع .

المطلوب هو اذا" حل المشاكل العالقة لكي تكتمل نظرية الفيزياء الكلاسيكية وبذلك يصبح فهم العالم ممكنا"

من ابرز مضامين هذا التصور الكلاسيكي للعالم ما يلي :-

ان العالم مقسم الى مادة تمثلها الجسيمات ذوات الكتلة والطاقة التي تتمثل بالاشعاع الحراري والضوء والكهرومغناطيسية عموما"

ان العالم (الطبيعة) هي ظواهر حتمية قابلة للتكرار واغلبها قابلة للعكس

ان نتائج الدراسات الفيزيائية هي نتائج مؤكدة وقطعية تعتمد دقتها على دقة ادوات القياس واساليبه

في السنين الاولى من القرن العشرين تفاقمت مشكلات الفيزياء وبرزت الى حيز الفكر العلمي افكار ومفاهيم جديدة فرضه واقع الظاهرة الفيزيائية فظهرت نظريات جديدة من ضمنها نظرية الكم وتقوم هذه النظرية على ثلاثة اعمدة جديدة هي :-

نظرية النسبية

نظرية المجال الكمي والاليكترودانيميكي الكمي

الميكانيك الاحصائي الكمي

وأصبحت الفيزياء الكلاسيكية حالة خاصة من هذه النظرية الجديدة تختص بالتعامل مع العالم الكبير (العالم الجهري) وقد يتصور البعض ان نظرية الكم تقتصر على العالم الصغير (العالم المجهري) أي علم الذرات والجزيئات فقط لكن هذا غير صحيح فنظرية الكم وما يتبعها تنطبق على جميع العالم

معادلات الحركة

إن الهدف الاساسي للميكانيك التقليدي هو تشكيل معادلة الحركة لاي نظام ميكانيكي سواء كان على شكل جسيم منفرد او مجموعة من الجسيمات تخضع لتأثير قوى مختلفة وبعد ذلك توضع هذه المعادلة تحت شروط اولية للتوصل الى وصف كامل للحركة بدلالة الموقع والسرعة والتعجيل في أي لحظة زمنية وفي بعض الحالات لايمكن تطبيق قانون نيوتن لذلك ينبغي اللجوء الى طريقة لاكرانج وهاملتون

الانظمة المحافظة Conservative System

ان المسألة الاساسية للميكانيك الكلاسيكي هو وصف الحركة لانظمة من الجسيمات تحت تأثير قوى مختلفة أي حل المعادلة التفاضلية الناتجة عن قانون نيوتن التالي

قانون نيوتن للحركة

$$\sum F = m.a$$

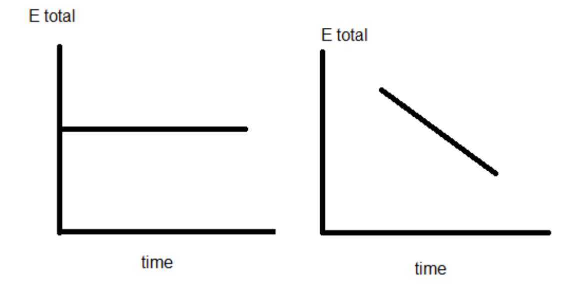
تعريف النظام المحافظ : هو النظام الذي يكون فيه حاصل جمع الطاقة الحركية (kinetic Energy) مع طاقة الجهد (potential Energy) مساويا لكمية ثابتة مع الزمن.

$$H = T + V$$
$$H = hamilton$$
$$T = kinetic.energy$$
$$V = potential.energy$$

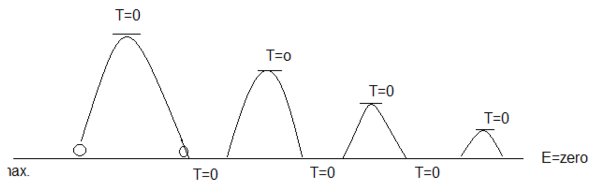
بمعنى اخر هو نظام معزول لا يتأثر بالقوى الخارجية ولا يمتلك قوى داخلية مشتته كالاحتكاك لذا يمكن تعريفه بأنه النظام الذي يمكن فيه اشتقاق القوى من دالة الجهد او الطاقة الكامنة :

$$F = -\nabla V$$
$$F_x = -\frac{dv_x}{dx}$$

الانظمة الموجودة في الطبيعة ترى ان العلاقة بين الطاقة والزمن علاقة عكسية لان كل شيء في الطبيعة يميل الى الاستقرار بفقدان الطاقة لكن في النظام المحافظ تبقى الطاقة ثابتة مع الزمن

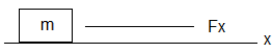


مثال على النظام المحافظ حركة الالكترون حول النواة وكذلك حركة الارض حول الشمس



لتوضيح ان التعريفين صحيحين نأخذ جسيم منفرد مجبر على الحركة في اتجاه واحد

ليكن x . حسب قانون نيوتن الثاني اذا كان الجسيم يسير باتجاه واحد (باتجاه x)



$$F_x = m.a$$

نفرض بأن ....

$$F_x = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

(F = القوة المؤثرة على الجسيم باتجاه x حسب التعريف الاول للنظام المحافظ)

حسب التعريف الثاني :

$$F_x = -\frac{dv_x}{dx}$$

$$-\frac{dv_x}{dx} = m.\frac{d^2x}{dt^2}$$

$$\frac{dx}{dt} = x$$

$$[-\frac{dv_x}{dx} = m.\frac{d\dot{x}}{dt}].dx$$

$$-\frac{dv_x}{dx}dx = m.\frac{d\dot{x}}{dt}.dx$$

$$-dv = m\dot{x}d\dot{x}$$

$$-v + c_1 = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + c_2$$

$$C = E = V + \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

بتكامل طرفي المعادلة ....

ان أية خاصية لنظام ميكانيكي لا تعتمد على الزمن تدعى بالثابت الحركي والطاقة الكلية E بالنسبة للنظام المحافظ او الاحتفاظي في هذه الحالة تمثل ثابتا حركيا للنظام.

نعود الى كيفية ايجاد حلول للمعادلات التفاضلية الناتجة عن قانون نيوتن الثاني ولنأخذ الحركة التوافقية البسيطة وهي حركة الجسيم التي توجد فيها قوة مرجعية تتناسب مع ازاحة الجسيم عن نقطة ما الناتجة عن سحب سلك مثالي يخضع لقانون هوك (ينص قانون هوك على ان القوة تتناسب مع الازاحة من مركز التوازن وتكون القوة بالنسبة للحركة باتجاه واحد هو x)

$$F_x = -kx$$

$$-F_x = kx$$

F_x = قوة السحب $-F_x$ = قوة الارجاع   k = ثابت القوة   x = الاستطالة التي سببتها القوة (الإزاحة باتجاه x).

السلك المثالي يمثل بلغة الكيمياء بشكل جزيئة ثنائية الذرة (H-H,Cl-Cl) وللسهولة نستخدم المحور x كاتجاه للحركة.

يصبح عندئذ قانون نيوتن الثاني في الحركة كما يلي :

$$-kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x_t$$

وهذه المعادلة هي معادلة القيمة الذاتية حيث تحقق تفاضل الدالة x_t مرتين وعندئذ يصبح الحل لمسألة الحركة التوافقية البسيطة بأتجاه واحد هو

$$x_t = A\sin\sqrt{\frac{k}{m}}.t$$

ان دالة الجيب تتذبذب بين (1- , 1) لذلك فأن قيمة الثابت A يمثل اقصى مدى للازاحة باتجاه x.

اشتقاق قانون الطاقة الكامنة v

$$-\frac{dv}{dx} = -kx$$

$$\int_0^v dv = k\int_0^x xdx$$

$$[v]_0^v = k\left[\frac{x^2}{2}\right]_0^x$$

$$v_v - v_0 = k\left[\frac{x^2 - 0}{2}\right]$$

$$v = k\frac{x^2}{2}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

$$x = A\sin(\sqrt{\frac{k}{m}}.t)$$

$$v = k\frac{(A^2\sin^2(\sqrt{\frac{k}{m}}.t))}{2}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

اشتقاق قانون الطاقة الحركية T

$$T = \frac{mv^2}{2}$$

$$v = \frac{dx}{dt} = x^2$$

$$dx = A\cos(\sqrt{\frac{k}{m}}.t).\sqrt{\frac{k}{m}}.dt$$

$$\therefore \frac{dx}{dt} = A\cos(\sqrt{\frac{k}{m}}.t)..\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$T = \frac{mv^2}{2}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

$$T = \frac{m[A\cos(\sqrt{\frac{k}{m}}.t).(\sqrt{\frac{k}{m}}]^2}{2}$$

$$T = \frac{kA^2\cos^2(\sqrt{\frac{k}{m}}.t)}{2}\ldots\ldots\ldots(4)$$

وبجمع المعادلتين (2 و 4)

$$H = T + V$$

$$H = \frac{kA^2 \cos^2(\sqrt{\frac{k}{m}}.t)}{2} + k\frac{(A^2 \sin^2(\sqrt{\frac{k}{m}}.t))}{2}$$

$$\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$$

$$T + V = \frac{kA^2}{2}$$

اذا" قيمة الطاقة للنظام المحافظ = كمية ثابتة (H)

معادلة لاكرانج Lagranges Equation

تعتبر دالة لاكرانج كمية داينمكية غير موجهة وتعرف بالصيغة التالية:

$$L_{(q,q\ ,t)} = T_{(q\ ,q)} - V_{(q,t)}$$

L = دالة لاكرانج

$T_{(q,q)}$ = طاقة حركية (دالة السرعة + دالة الإحداثيات العامة)

$V_{(q,t)}$ = طاقة كامنة (دالة الإحداثيات + دالة الزمن)

إن الإحداثيات العامة لأي نظام في الكيمياء لازمة لتعيين موقع النظام تعينا" تاما" في الفضاء . لنفرض إننا أخذنا نظاما" محافظا" يحتوي على ثلاث جسيمات فلكي نحدد تماما" حالة النظام عند زمن معلوم t يجب أن نحدد مواقع وسرع الجسيمات الثلاثة وان عملا" كهذا يستوجب تحديد تسع إحداثيات وتسع سرع :

$x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3$

$x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3$

وبصورة عامة فأن لنظام مكون من N من الجسيمات يجب تحديد 3N من الإحداثيات وكذلك 3N من السرع.

يمكن كتابة الصيغة العامة لمعادلة لاكرانج للنظام المحافظ كما يلي:

$$\frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial L}{\partial q^{\bullet}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$

نفترض إن لدينا تحليلا" لحركة جسيم بحيث إن قوة الاستعادة (المرجعة) تتناسب طرديا" مع إزاحة الجسيم من نقطة ما وان هذه الحركة تمثل حركة توافقية بسيطة مثل حركة اهتزازات الجزيئة ثنائية الذرة أو حركة الذرة في الشبكة البلورية.

يمكن إثبات قوانين نيوتن لجسيم يتحرك بمسافة x باستخدام معادلة لاكرانج وكما يلي:

$$F = am$$
$$F = -kx$$
$$q_i = x$$
$$q^{\bullet}{}_i = x^{\bullet}$$
$$T(q_i, q_i^{\bullet}) = \frac{1}{2} m x^{\bullet 2}$$
$$V(q_i, t) = \frac{1}{2} k x^2$$
$$L = T - V$$
$$L(x, x^{\bullet}, t) = \frac{1}{2} m x^{\bullet 2} - \frac{1}{2} k x^2$$
$$\frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial L}{\partial q_i^{\bullet}} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$
$$\frac{d}{dt}(m x^{\bullet}) - (-kx) = 0$$
$$\frac{dx^{\bullet}}{dt} m + kx = 0$$
$$\ddot{x} m + kx = 0$$
$$am = -kx = F$$

الزخم المعمم ومعادلات لاكرانج - هاملتون في الحركة

من الملائم في كثير من المسائل أن نعبر عن الطاقة بدلالة الزخم (p_i) المرتبط بالاحداثي بدلا" من السرعة ويعرف الزخم المرتبط بالاحداثي بالصيغة التالية :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial q_i^{\bullet}}$$

ويمكن كتابة المعادلات المناسبة لمسألة الحركة التوافقية البسيطة لأي جسيم بعد تعويض قيمة الدالة الحركية بدلالة الزخم كالآتي:

$$H = T + V$$

$$T = \frac{1}{2} m x^{\bullet 2} \ldots\ldots, V = \frac{1}{2} k x^2$$

$$L = T - V$$

$$L = \frac{1}{2} m x^{\bullet 2} - \frac{1}{2} k x^2$$

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial x^{\bullet}} = m x^{\bullet}$$

$$x^{\bullet} = \frac{p_x}{m}$$

$$T = \frac{1}{2} m \left(\frac{p_x}{m}\right)^2 \rightarrow T = \frac{1}{2m} p_x^2$$

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} k x^2$$

مثال 1:

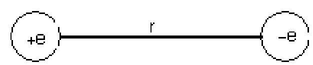
اوجد دالة هاملتون لذرة الهيدروجين

ملاحظة : إذا كان الجسيم ثابت فأن الطاقة الحركية له T = صفر

الحل:

تتكون ذرة الهيدروجين من (إلكترون + نواة تحتوي على بروتون) وتمثل ابسط الأنظمة . نفترض إن الإلكترون يدور حول النواة على بعد r ونعبر عن الطاقة الحركية للإلكترون بدلالة الزخم كما يلي:

$$T = \frac{1}{2m} p_x^2$$



عليه يمكن كتابة دالة هاملتون H التي تمثل مجموع الطاقة الحركية والطاقة الكامنة لذرة الهيدروجين بالشكل التالي:

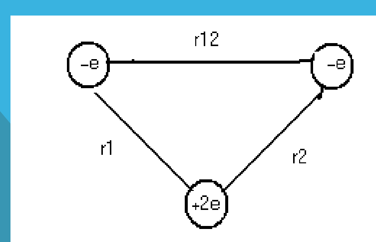
$$H = T + V$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{(+e)(-e)}{r}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

مثال 2

اوجد دالة هاملتون لذرة الهليوم He (تحتوي على ثلاث جسيمات 2e + نواة)



الفصل الثاني

نظرية الكم Quantum Theory

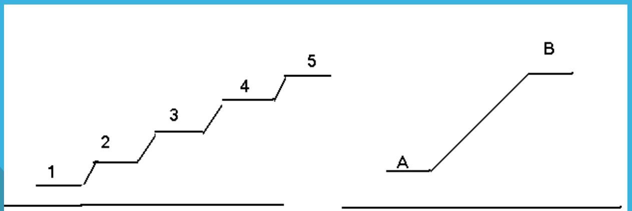
بسبب وجود وتنامي المشاكل الكبيرة التي لا يمكن حلها أو تفسيره ظهر علم جديد يدعى بنظرية الكم Quantum Theory إن أصل هذا العلم أو النظرية يمكن اعزائه للعالم بلانك Planck في عام 1900 حيث أعطى فرضيته المشهورة نتيجة لتفسير ظاهرة الجسم الأسود و تنص فرضيته على (إن الطاقة مثل المادة غير مستمرة وتحتوي على عدد كبير من الوحدات الصغيرة والمنفصلة تدعى كمات والكمية (المكممة) يقصد بها محددة مثل الثقب الذي لا يمكن سده بكمية اكبر منه. أو الكرة في حفرة لا يمكن دفعها خارج الحفرة إلا باستخدام مقدار من الطاقة (كم من الطاقة)، وعملية اكتساب أو فقدان الطاقة يكون بشكل كمات ثم أخفقت نظرية بلانك وظهر ميكانيك الكم.

إن العالم من خلال تجربته وجد أن العلاقة طردية بين الطاقة والتردد حسب العلاقة التالية:

$$E = h\nu$$

<u>مقارنة بين الميكانيك التقليدي ونظرية الكم</u>

بموجب الميكانيك التقليدي (الكلاسيكي) يمكن للنظام أو الطاقة أن تأخذ أي قيمة وبدون تحديد سواء كان فقدان أو اكتساب لكن بموجب نظرية الكم فالطاقة ممكن ان تكون قيمة على شكل مجاميع أحادية أي أعداد صحيحة $1h\nu$، $2h\nu$، $3h\nu$ ولا يمكن أن تأخذ قيم كسرية 1/2 ، 1/3



نظرية الكم :هناك خمس مستويات في هذه النظرية

الميكانيك التقليدي (مجال الطاقة مفتوح

أعقب العالم بلانك العالم اينشتاين مستخدما" نظرية بلانك ولم تقتصر نظريته على ظاهرة الانبعاث والامتصاص بل تعدت إلى تفسير الأشعة وتفاعل المادة إذ اعتبر إن الضوء يتكون من كمات صغيرة منفصلة أعطى لها اسم فوتون وتحمل طاقة مقدارها hv وبذلك تمكن من تفسير ظاهرة التأثير الكهروضوئي وحل جميع المسائل المتضمنة انبعاث وامتصاص الأشعة من خلال تطبيق مفهوم الكم.

تطور مفهوم ميكانيك الكم على مرحلتين:

1- المرحلة الأولى : دخول مفهوم الكم (1905-1927) وكان خليطا" من المفاهيم التقليدية والمعاصرة.

2- المرحلة الثانية: رسخت على أيدي كل من هايزنبرك Hiesenberg و شرودنكر Schrodinger و ديراك Dirac وآخرين عام 1925 وذلك بإدخال ميكانيك الكم أو ميكانيك الموجي (لان فكرة الأمواج حلت محل الجسيمات في معادلة شرودنكر الموجية.

ويمكن تعريف ميكانيك الكم على انه نظام رياضي قدم بثلاث طرق:

1- تمثيل شرودنكر : حيث مثل النظام بالموجة وتغلب فيه على نقاط الضعف في نظرية بور.

2- تمثيل هايزنبرك او ما يسمى ميكانيك المصفوفات حيث مثل النظام بالمصفوفة matrix ويمكن الحصول على معلومات النظام عن طريق حل هذه المصفوفة.

3- تمثيل ديراك حيث اثبت بأن الطريقتين أعلاه صحيحة وتعطي نفس النتائج لكنها تختلف فقط في التمثيل الرياضي وقدم طريقة ثالثة مثل فيها النظام بدالتين تسمى دالة كيت ودالة برا (Ket & Bra Mechanics) وجميع هذه الطرق صحيحة وتؤدي إلى نتيجة واحدة لكن أسهلها طريقة ميكانيك الموجى لشرودنكر.