أساسيات ميكانيكا الكم

بأمثلة محلولة

Principles of Quantum Mechanics

with

Solved Examples

إعداد

أ.د. إبراهيم محمود أحمد ناصر

أستاذ الفيزياء النظرية

جامعة الملك فهد للبترول والمعادن

الظهران-المملكة العربية السعودية

د. عفاف السيد عبدالهادي

أستاذ الفيزياء النظرية المشارك

جامعة العاشر من رمضان

مدينة العاشر من رمضان-ج.م.ع

العبيكان

Obeikan

ح مكتبة العبيكان، ١٤٣٢هـ

فهرسة مكتبة الملك فهد الوطنية أثناء النشر

ناصر، إبراهيم محمود أحمد

أساسيات ميكانيكا الكم بأمثلة محلولة. / إبراهيم محمود محمد ناصر؛ عفاف السيد عبدالهادي

- الرياض، ١٤٣٢هـ

٤٨٨ ص؛ ١٦,٥ × ٢٤ سم

ردمك: ١-١٠١-٥٠٣-٦٠٣-٩٧٨

١- نظرية الكم ٢- الميكانيكا أ. عبد الهادي، عفاف السيد (مؤلف مشارك) ب. العنوان

ديوي ١٢,٥٣٠ رقم الإيداع: ١٤٣٢/٢٣

صدر هذا الكتاب بدعم من جامعة الملك فهد للبترول والمعادن تحت مشروع تأليف كتاب رقم AR وضمن اتفاقية نشر خاصة بين شركة العبيكان للأبحاث والتطوير وعمادة البحث العلمي في الجامعة

الطبعة الأولى

١٤٣٤هـ/ ٢٠١٣م

الناشر: العبيكان Obeikan للنشر

الرياض - المحمدية - طريق الأمير تركي بن عبدالعزيز الأول

هاتف ٤٨٠٨٦٥٤ فاكس ٤٨٠٨٠٩٥ ص. ب ٦٧٦٢٢ الرمز ١١٥١٧

موقعنا على الإنترنت

www.obeikanpublishing.com

متجر العبيكان على أبل

http://itunes.apple.com/sa/app/obeikan-store

التوزيع: مكتبة العبيكان Obeikan

الرياض - المحمدية - طريق الأمير تركي بن عبدالعزيز الأول

هاتف ٤٨٠٨٦٥٤ فاكس ٤٨٠٨٠٩٥ ص. ب ٦٧٦٢٢ الرمز ١١٥١٧ ص. ب ٦٢٨٠٧ الرمز ١١٥٩٥

www.obeikanretail.com

بسم الله الرحمن الرحیم

المحتويات

الباب الأول

انحسار الفيزياء التقليدية

(Defeat of the Classical Physics)

الباب الثاني

فروض ميكانيكا الكم

Postulates of Quantum Mechanics

الباب الثالث

معادلة شرودنجر الموجية وتطبيقاتها

(The Schrödinger's Wave Equation and its Applications)

الباب الرابع

نظرية المؤثرات وأقواس ديراك

(Operators Theory and Dirac's Brackets)

الباب الخامس

المتذبذب التوافقي الخطي

(The Linear Harmonic Oscillator)

الباب السادس

كمية الحركة الزاوية المدارية لجسيم

(Orbital Angular Momentum of a One Particle System)

الباب السابع

ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة بالهيدروجين

(Hydrogen atom and Hydrogen-like atoms)

الباب الثامن

التطور الزمني للنظام الكمي

(Time evolution of the quantum system)

الباب التاسع
المتذبذب التوافقي الخطي باستخدام نظرية المؤثرات
(Linear Harmonic Oscillator Using Operator Theory Approach)

الباب العاشر
كمية الحركة الزاوية المغزلية
(Spin Angular Momentum)

الباب الحادي عشر

كمية الحركة الزاوية الكلية

(Total Angular Momentum)

الباب الثاني عشر

مؤثر الكثافة

(The density operator)

الجزء الثاني : طرق تقريبية لحل مسائل ميكانيكا الكم وتطبيقاتها

(Approximation methods in solving quantum mechanics problems and their applications)

الباب الثالث عشر

نظرية التغاير

(Variational theory)

الباب الرابع عشر

نظرية الاضطراب للحالات المستقرة

(Time-Independent Perturbation Theory)

الباب الخامس عشر
التقريب شبه التقليدي (WKB)

Semi-classical approximation (WKB)

الباب السادس عشر
نظرية الاضطراب الزمنية

(Time-Dependent Perturbation Theory)

الباب السابع عشر
تفاعل الإشعاع مع المادة
(Interaction of radiation with matter)

الباب الثامن عشر
نظرية التشتت
(Scattering Theory)

الملاحق

Appendices

مقدمة الكتاب

هذا كتاب في ميكانيكا الكم، نقدمه لطلاب السنوات النهائية، والدراسات العليا، في كليات العلوم والتربية والهندسة، وهو حصيلة جزء من محاضرات ألقاها أحد المؤلفين (باللغة الإنجليزية) بمادة ميكانيكا الكم على طلاب السنة الرابعة، وطلبة الماجستير، في قسم الفيزياء بجامعة الملك فهد للبترول والمعادن خلال عدة سنوات.

تم إعداد هذا الكتاب للدارسين بلغة الضاد، لقلة توافر الكتب الحديثة باللغة العربية في هذا المجال، وقد أثرينا مادته بحيث يغني عن الرجوع إلى مصادر أخرى في الموضوع نفسه؛ لذلك فقد بدأنا بالمبادئ الأساسية لهذا الفرع، وأنهيناه ببعض الطرق التقريبية الخاصة بميكانيكا الكم التي لها تطبيقات عديدة بمختلف الفروع العلمية الأخرى.

حاولنا في هذا الكتاب تبسيط المفاهيم الفيزيائية بأمثلة متعددة ليسهل استيعاب المادة، هذا بالإضافة إلى الواجبات المنزلية والتمارين التي تثري قريحة القارئ وتروي شغفه، واستعنا ببعض البرامج العلمية، مثل ماثيماتيكا، لإجراء الحسابات والرسومات، والتي نحث أبناءَنا الطلاب على استخدامها ليستطيعوا التأكد من حلولهم وتخيلها. وفي هذا الكتاب يتعلم القارئ بعض التقنيات الرياضية اللازمة لحل بعض المسائل التي لم نكن نحلم بحلها من قبل.

اقتضت طبيعة مادة هذا الكتاب أن تقسم إلى أبواب عديدة ومنفصلة، حتى تعطي لأستاذ المادة المرونة في اختيار الأبواب المناسبة للمقرر الخاص به. وهذا الكتاب عد خصيصاً لعام دراسي كامل أو فصلين دراسيين. خلال دراستنا سوف نرمز إلى الكمية المتجهة برموز لاتينية داكنة (مثل المتجه $\boldsymbol{L}$ ويرمز لكمية الحركة الزاوية) أما المؤثرات فسوف نعرفها بالرمز $\hat{}$ (مثل مؤثر كمية الحركة الزاوية $\hat{L}$).

اشتمل الباب الأول من هذا الكتاب: على مقدمة بينا فيها الأسباب التي أدت إلى سقوط إمبراطورية الفيزياء التقليدية وبزوغ عصر الفيزياء الحديثة، ومنها تعرضنا لنشوء نظرية ميكانيكا الكم وارتقائها بطريقة مختصرة، مع الاستدلال ببعض الأمثلة التوضيحية. فروض نظرية ميكانيكا الكم عُرضت بالباب الثاني مع بعض التمارين البسيطة. في الباب الثالث: استنبطنا بطريقة مبسطة، معادلة شرودنجر الموجية

مع شرح بعض من تطبيقاتها المهمة. وبينّا في الباب الرابع: نظرية المؤثرات، وأقواس ديراك اللتين لهما ارتباط مباشر بنظرية ميكانيكا الكم. في الباب الخامس: تمت فيه دراسة المتذبذب التوافقي الخطي بواسطة المعادلات التفاضلية. وفي الباب السادس: فصلنا القول في كمية الحركة الزاوية وأكثرنا فيه من الأمثلة. أما في الباب السابع: فقد توقفنا فيه عند ذرة الهيدروجين وشبيهاتها من وجهة نظر ميكانيكا الكم.

في الباب الثامن: تم إلقاء نظرة سريعة على التطور الزمني للنظام الكمي. في الباب التاسع: تمت معالجة المتذبذب التوافقي الخطي باستخدام نظرية المؤثرات، وهي طريقة مهمة تستخدم في فيزياء الكم المتطورة. أما الباب العاشر: فقد أفردناه لعرض كمية الحركة الزاوية المغزلية وتطبيقاتها، لما لها من أهمية خاصة في نظريات ميكانيكا الكم المتقدمة والحسابات الكمية. الباب الحادي عشر: يحتوي على شرح كمية الحركة الزاوية الكلية وتطبيقاتها. مؤثر مصفوفة الكثافة، تم شرحه في الباب الثاني عشر.

في الجزء الثاني من الكتاب، بدأنا الباب الثالث عشر: بعرض واحدةً من الطرق التقريبية لحل مسائل ميكانيكا الكم، وهي نظرية التغاير وتطبيقاتها في الفيزياء الذرية والجزيئية. وأنهينا الباب الثالث عشر: بملحق عن أيون جزيء الهيدروجين، وآخر عن ذرة الهيليوم. في الباب الرابع عشر: استعرضنا نظرية الاضطراب للحالات المستقرة مع بعض التطبيقات في الفيزياء الذرية، وذلك لإيجاد التصحيحات الأولية للطاقة، والدالة المميزة لنظام فيزيائي معقد. وأنهينا الباب بملحق خاص عن ظاهرة شتارك، وملحق عن ذرة الهيليوم. تم عرض التقريب شبه التقليدي (WKB)، بطريقة مختصرة، حيث إن مستواه الرياضي أعلى من مستوى هذا الكتاب، بالباب الخامس عشر، ونظرية الاضطراب الزمنية بالباب السادس عشر، وتفاعل الإشعاع مع المادة بالباب السابع عشر. في الباب الثامن عشر: تم استعراض نظرية التشتت بطريقتين تقريبيتين: طريقة بورن التقريبية، وطريقة التحليل الجزئي للموجة.

ألحقنا بالكتاب مجموعة من الملاحق العامة، وهي: نظام الوحدات الذرية، ملخص للدوال الخاصة، وبعض التفاضلات والتكاملات المهمة، وانتهينا بالمراجع وقائمة للمصطلحات العلمية.

همسة في أذن الدارس: دراسة ميكانيكا الكم، ما هي إلا مادة علمية، كغيرها من المواد لا تفهم إلا بحل المسائل المتنوعة. وأن تعلم هذه المادة بدون حل مسائلها: كمن يأمل في تعلم السباحة من غير أن يبلل بدنه. لذلك فإننا نأمل من الدارس أن يحاول تدريب نفسه على فهم الأمثلة المحلولة، ومحاولة حلها بنفسه، وحل الواجبات

المنزلية والتمارين المعروضة بدون النظر إلى الحلول المرفقة. وإذا لم يوفق فبإمكانه الاستعانة بالحلول لمعرفة ما قد غاب عنه. ونتمنى أن يفي كتابنا هذا باحتياجات المعاهد والكليات العلمية والتربوية، وأن يحوز على رضا الدارسين والمدرسين.

نود هنا أن نسجل شكرنا الخاص إلي جامعة الملك فهد للبترول والمعادن، التي دعمت هذا المشروع تحت مشروع تأليف كتاب رقم 1427/08- ARA_ت ك ع- 1427/08.

تمت المراجعة الأولية للنص اللغوي بواسطة الأستاذ محمد بن رضي بن ناصر الشماسي، المحاضر في قسم اللغة العربية سابقاً، وتنظيم الكتاب تم بمساعدة د. أحمد سالم، المحاضر بالقسم.

ونود أيضاً أن نشكر بامتنان زملاءنا: د. على باجنيد، بكلية العلوم-جامعة أم القرى، ود. إبراهيم عبد الرحمن بكلية التربية-جامعة الدمام، لمراجعتهم وتصحيحهم بعضاً من أجزاء الكتاب. ونشكر العديد من طلابنا وزملائنا وأصدقائنا بالقسم على ملاحظاتهم واقتراحاتهم في تصحيح الهفوات اللغوية والأخطاء المطبعية. وأخيراً، نود أن نشكر المحكمين، والمدقق اللغوي بعمادة البحث العلمي، اللذين قاموا بالمهمة الطويلة في مراجعة النص العربي الأخير والمحتوى العلمي، حيث استفدنا كثيراً من آرائهم ومقترحاتهم العلمية واللغوية القيمة التي أُخذت في الاعتبار عند تنقيح هذا الكتاب.

وننتظر من الأساتذة وزملائنا الأفاضل والطلبة الأعزاء النقد البناء لأسلوبنا وأخطائنا اللغوية أو العلمية، حتى يتسنى لنا أخذها بالاعتبار في الطبعات المقبلة للكتاب، آملين سماع أرائكم واقتراحاتكم على العنوان الإلكتروني imnasser@kfupm.edu.sa وسوف تنشر مراسلاتكم على الموقع التالي:

http://faculty.kfupm.edu.sa/PHYS/imnasser/

ملحوظة أخيرة: إن الكتابة (النص والمعادلات) والحسابات الرياضية والرسومات تمت كاملةً بواسطة المؤلفين، ولهذا فإن أي أخطاء مطبعية تنسب إليهما.

المؤلفان

أ.د. إبراهيم محمود أحمد ناصر

د. عفاف السيد عبد الهادى

1431-1430

e-mail: imnasser@kfupm.edu.sa

الباب الأول

انحسار الفيزياء التقليدية

(Defeat of the Classical Physics)

الباب الأول

انحسار الفيزياء التقليدية

لفترة ليست بالقصيرة، ونظراً لقصور في الإمكانيات المعملية، وحتى نهاية القرن التاسع عشر، كان تفسير جميع الظواهر الفيزيائية مبنياً على الأسس الآتية:

أ- قوانين نيوتن في الميكانيكا وقانون الجاذبية.

ب- معادلات ماكسويل لوصف الكهربية والمغناطيسية.

ج- الميكانيكا الإحصائية لوصف حالة التجمعات الكبيرة من المادة.

هذه الأسس الفيزيائية وصفت الطبيعة المجردة بطريقة صحيحة تحت جميع الظروف. فعلى سبيل المثال فإن قوانين نيوتن وصفت المسار والحركة للجسم التقليدى، وهو الجسم الذي يعرف بكتلة m وسرعة $\mathbf{v}$ وكمية حركة خطية $\boldsymbol{p} = m\,\mathbf{v}$ وطاقة حركة $K = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\cdots$إلخ، وهو محدد بالمكان (Localized) ويمكن تمييزه (Distinguishable).

أما معادلات ماكسويل فقد وصفت حركة الموجات التقليدية، التي تُعرف بطول موجي λ وتردد ν وسرعة الموجة هي $c = \nu\lambda$ وأيضاً شدة تتناسب مع مربع السعة، وهي غير محددة بالمكان (Non – Localized) بمعنى أنها تنتشر في الفراغ وتشغل حيزاً كبيراً، وتظهر الخواص المميزة للموجات في ظاهرتي الحيود والتداخل.

وفي نهاية القرن التاسع عشر وبداية القرن العشرين، ونظراً للتطور في الإمكانيات المعملية، فقد بدأت تظهر في الأفق ظواهر فيزيائية كثيرة عجزت عن تفسيرها قوانين الفيزياء التقليدية. وعندما اكتشف الإلكترون كبنية أساسية في الذرة أصبح التركيب الذري غنياً بالمعلومات، ولكنها غامضة ومبهمة. وبدأت تظهر صعوبات أخرى وتتضارب مع قوانين الفيزياء التقليدية، مثل:

١- إشعاع الجسم الأسود (Black body radiation)

٢- الظاهرة الكهروضوئية (Photoelectric phenomena)

٣- مبادئ النظرية الذرية (Principle of atomic theory)

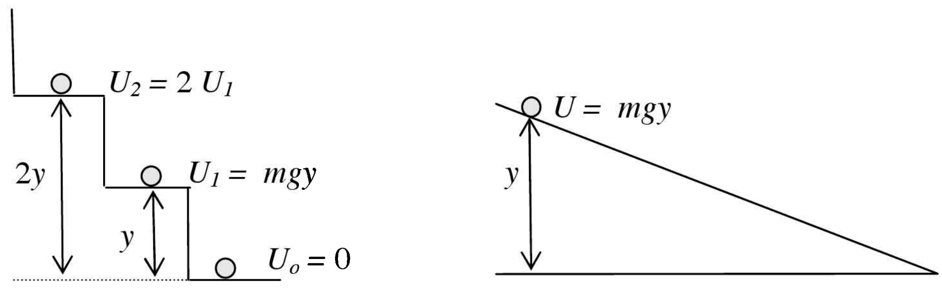
٤- تشتت كمتون (Compton scattering)

٥- وأخيراً حيود كل أنواع الجسيمات (Diffraction of particles)

٦- تجربة ميكلسون-مورلي (Michelson-Morely experiment)

إن الصعوبات، من ١ إلى ٥، التي واجهت الفيزياء التقليدية أدت إلى بزوغ علم جديد مبني على بعض الافتراضات، سميَ هذا العلم "ميكانيكا الكم". وقد بدأت ميكانيكا الكم عندما ظهر فرض بلانك بخصوص تكمم الطاقة الكهرومغناطيسية المنطلقة والممتصة بواسطة جسم ساخن وذلك لتفسير لغز إشعاع الجسم الأسود. بعد هذا افترض دي-برولي الخاصية الموجية للجسيمات، ومنها اشتق الطول الموجي المصاحب للجسيمات بالعلاقة $\lambda = h/p$ ، حيث p هو كمية الحركة الخطية للجسيم. وقد أدت الصعوبة رقم ٦ إلى ظهور النظرية النسبية الخاصة لأينشتين، والتي توافقت مع قوانين ماكسويل ولكنها غيرت نظرتنا وفهمنا للزمن الفراغي وطورت قوانين نيوتن. وتبحث النظرية النسبية عن قوانين تفسر الظواهر الطبيعية ميكانيكية أو غير ميكانيكية، ولا تتأثر بالزمان والمكان، ولن نتعرض في هذا الكتاب إلى شرح النظرية النسبية الخاصة أو العامة.

من السهل تخيل تكمم الطاقة، إذا تخيلنا كرةً كتلتها m ، تتدحرج على مستوى مائل (انظر الشكل a١) فإن طاقة الجهد للكرة تعرف بالعلاقة $U = mgy$ حيث g هي عجلة الجاذبية الأرضية و y هو ارتفاع الكرة عن سطح الأرض. نلاحظ هنا أن الارتفاع يأخذ القيم المتصلة (المستمرة) من ٠ إلى ∞ وتبعاً لها تتغير قيمة U. هذه الصورة تختلف تماماً عندما توضع الكرة على مستوى متدرج ذي ارتفاعات ثابتة (انظر الشكل b١) فإن طاقة الجهد لها الآن تعرف بالعلاقة $U_n = nU_1$, حيث $U_1 = mgy$ هي طاقة جهد الكرة بالمستوى الدرجي الأول و n هو عدد صحيح موجب يدل على مستوى الدرج.



(b) (a)

شكل (١) a- كرة تتدحرج على مستوى مائل b- كرة تستقر على مستوى مدرج

وفى الأساس فإن الصعوبات التى ذكرت سابقاً ساهمت في تطوير ميكانيكا الكم حيث تم التحقق عملياً من السلوك الازدواجي للجسيمات، بمعنى أن الجسيمات المتحركة لها الخاصية المزدوجة (الموجية أو الجسيمية).

وقبل أن نسترجع باختصار أهم الصعوبات التى واجهت الفيزياء التقليدية، وأدت إلى تطوير نظرية ميكانيكا الكم، نود أن نلفت نظر القارئ لنوعي النظام الفيزيائي اللذين سوف يذكران بكثرة في شرحنا ألا وهما:

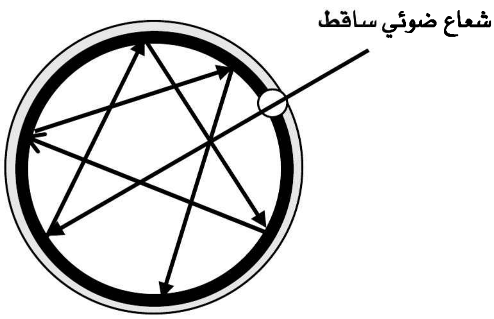
الأول: النظام العيني (Macroscopic system) : وهو جزء من العالم المادي (الملموس). من الممكن أن يكون النظام العيني عربة تتحرك، أو تياراً كهربياً في ملف متحرك...الخ.

والثاني: النظام المجهري (Microscopic system) : وهو جزء من العالم الصغير جداً، فمن الممكن أن يكون النظام المجهري إلكتروناً بذرة الهيدروجين، أو جزيئاً، أو إلكتروناً يتحرك في مجال مغناطيسي ...إلخ.

إن مهمة ميكانيكا الكم دراسة نتائج النظام المجهري تحليلها.

١- إشعاع الجسم الأسود (١٩٠١)

نعلم أن الحرارة الإشعاعية المنبعثة من جسم ما، تعتمد على مساحته ونوعية مادته، ودرجة حرارته. ويعرّف الجسم الأسود (وهو جسم نظري): بأنه الجسم الذي له أعلى قدرة امتصاصية للأشعة الكهرومغناطيسية الساقطة عليه، ومن ثم فلن يكون هناك ضوء ينعكس منه، ولذلك لا نستطيع تحديد لونه. وحيث إن قدرته على الامتصاص عالية، فإن قدرته عالية أيضاً على الإشعاع. ونستطيع تمثيل الجسم الأسود بجسم مغلق، أجوف، ذي سطح داخلي مطلي باللون الأسود وفيه ثقب صغير كما بالشكل (٢)؛ ولهذا فإن الجسم الأسود يمتص كل الضوء الساقط عليه من خلال الثقب، حيث إن الأشعة النافذة خلال الثقب لن يسمح لها بالخروج مرةً أخرى، وذلك نتيجة للانعكاسات المتتالية. وعند تسخين الجسم الأسود لدرجة الحرارة المطلقة (T)، فإنه يشعّ ضوءاً يحتوي على جميع الأطوال الموجية الممكنة اعتماداً على درجة حرارته.

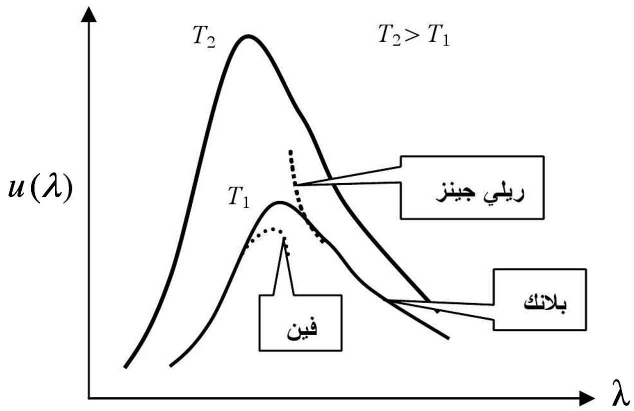


شكل (2) شكل نموذجي للجسم الأسود

وبناءً على ما تقدم من الوصف، والدراسات المعملية المكثفة، انظر الشكل (٣)، فإن الجسم الأسود تظهر له بعض المعالم الاستقرائية المهمة وهي:

أ- يمتص كل الأشعة الساقطة (ولا يعكسها) بغض النظر عن الطول الموجي أو الاتجاه.

ب- له قدرة عالية على الإشعاع (في جميع الاتجاهات) بالمقارنة للأجسام الأخرى.



شكل (٣) مخطط لتوزيع الطاقة الإشعاعية $u(\lambda)$ للجسم الأسود مع طول الموجة λ عند درجات حرارة مختلفة.

ج- منحنى الطاقة الإشعاعية المنبعثة من الجسم الأسود لا يعتمد على طبيعة مادته، ولكن يعتمد على درجة حرارته (T).

د- تقع المنحنيات ذات درجة الحرارة المنخفضة تماماً داخل المنحنيات ذات درجات الحرارة المرتفعة.

ه- عند درجة حرارة ثابتة (T) تزداد الطاقة الإشعاعية المنبعثة من الجسم الأسود كلما ازداد طول الموجة، ثم تصل إلى القيمة العظمى (λ_{max}) تبدأ بعدها الطاقة في الانخفاض بزيادة الطول الموجي.

و- قانون فين للإزاحة (Wein's displacement law): وينص على أن:
"العلاقة بين القيمة العظمى للطول الموجي (λ_{max}) ودرجة الحرارة المطلقة (T) للجسم هي علاقة عكسية" بمعنى أن:

$$\lambda_{max}T = \text{ثابت}$$

وهي علاقة تعبر عددياً عن الحقيقة التجريبية التالية: كلما ازدادت درجة حرارة الجسم الأسود؛ فإن القيمة العظمى في طيفه تُزاح باتجاه تناقص الطول الموجي (ازدياد التردد). وهذا يتفق مع الحقيقة التالية: وهي أنه كلما ارتفعت درجة حرارة جسم متوهج يُصبح أكثر لمعاناً وأكثر بياضاً.

ز- قانون ستيفان للمساحة (Stephan's law for area): ينص على أن: "الطاقة الإشعاعية الكلية لوحدة المساحات عند درجة حرارة ثابتة (T) تُعرف بالمساحة المحصورة بين المنحنى المحدد بقيمة (T) ومحور الطول الموجي وتعطى بالعلاقة:

$$U = bT^4$$ "

حيث b ثابت، وقيمته هي $b = 7.55\times10^{-16}\ \mathrm{J\,m^{-3}K^{-4}}$

ح- قانون ريلي- جينز (Rayleigh-Jeans law) وينص على أنه: "عند الترددات المنخفضة (الأطوال الموجية الطويلة) تُعرف الطاقة الإشعاعية بالعلاقة:

$$u(\lambda) \propto \frac{T}{\lambda^4}$$

وبناءً على معرفتنا بمبادئ الفيزياء التقليدية، نتوقع أن الجسم الساخن يشع باستمرار كل حرارته على هيئة موجات كهرومغناطيسية. لكن من قانون ريلي- جينز نجد أن معدل الإشعاع يصل إلى ما لا نهاية عندما يؤول الطول الموجي الكهرومغناطيسي إلى الصفر، وسميت هذه المعضلة غير المنطقية حين ذاك بلغز "الكارثة فوق البنفسجية" (Ultra-violet catastrophe). وأصبح السؤال: ما الذي أدى إلى هذا اللغز نظرياً؟ وكيف السبيل إلى حله؟

ط- قانون فين (Wien's law) وينص على أنه:
"عند الترددات المرتفعة (الأطوال الموجية القصيرة) تعرف الطاقة الإشعاعية بالعلاقة:

$$u(\lambda) \propto \lambda^{-5}e^{-d/\lambda T}$$ "

حيث d ثابت.

وفي عام ١٩٠١ م نجح بلانك (Planck) في حل مسألة الجسم الأسود، ومنها تم حل معضلة "الكارثة فوق البنفسجية" وذلك بفرض أن: "طاقة الجسم الإشعاعية، الممتصة أو المنبعثة، لا تمثل فيضاً من القيم المتصلة؛ ولكن تتكون من وحدات طاقة لا تتجزأ، وسميت طاقة كمّ "Quanta" ومقدار الطاقة "E" التي تحملها كل طاقة كمّ، تتناسب مع تردد الإشعاع "ν"، بمعنى أن:

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

حيث h هو ثابت بلانك.

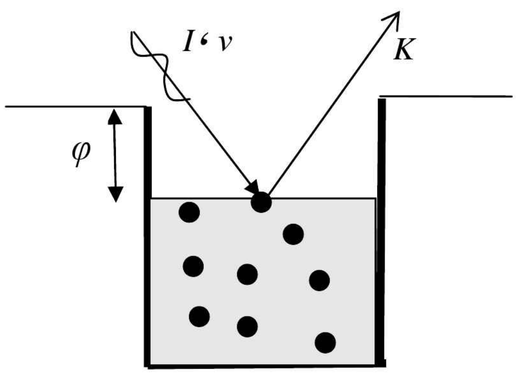
ومن فرضيته الغريبة، في ذلك الوقت، اشتق بلانك علاقته المشهورة للطاقة الإشعاعية في الصورة:

$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{\left(e^{hc/\lambda k_B T} - 1\right)} \tag{1}$$

حيث k_B هو ثابت بولتزمان. وقد وجد أن هذا القانون أعطى تفسيراً كاملاً للنتائج المعملية للإشعاع الحراري من الأجسام الصلبة على الرغم من غرابة الفرضية المقترحة في ذلك الوقت.

٢- الظاهرة الكهروضوئية (١٩٠٣)

ترتبط هذه الظاهرة بانبعاث الإلكترونات من سطح المعدن عند سقوط الضوء (ذي الشدة الضوئية I والتردد ν) عليه، انظر الشكل ٤. وينبعث من سطح المعدن عدد N من الإلكترونات ولكل إلكترون طاقة حركية K. وللظاهرة الكهروضوئية بعض المعالم المهمة وهي:



شكل(٤) شكل مبسط للظاهرة الكهروضوئية ويبين شعاعاً ضوئياً ساقطاً بتردد ν وشدة ضوئية I والكترون • على سطح المعدن ينبعث بطاقة حركية K. φ هي دالة الشغل الكهروضوئية للمعدن.

أ- لا تحدث الظاهرة الكهروضوئية إلا إذا تحقق الشرط $\nu > \nu_o$ حيث ν_o هو التردد الحرج للمادة.

ب- الطاقة الحركية K تعتمد على ν ولا تعتمد على I.

ج- عند تحقق الشرط $\nu > \nu_o$ تنبعث الإلكترونات فوراً، بحيث ينعدم الزمن بين سقوط الضوء وحركة الانبعاث.

د- زيادة الشدة I تزيد من عدد الإلكترونات المنبعثة فقط، ولا تزيد من طاقة الحركة للإلكترونات K.

بالطبع لم تستطع الفيزياء التقليدية تفسير هذه الظاهرة؛ بل أعطت تفسيرات عكسية تماماً للنتائج المعملية. استطاع أينشتين (Einstein) تفسير هذه الظاهرة في عام ١٩٠٣م، وبها حصل على جائزة نوبل عام ١٩٢١م. وقد افترض أينشتين أن الضوء ما هو إلا جسيمات (سماها فوتون) تتحرك بسرعة الضوء، وطاقة هذا الفوتون هي طاقة مكماة وتعطى بالعلاقة $E = h\nu$. وعند سقوط الفوتون على المعدن يفقد طاقته على شكل كمة (Quanta) (ليست متصلة) ويكتسبها الإلكترون ككمة أيضاً. هذه الطاقة المكتسبة: يفقد الإلكترون جزءاً منها للتغلب على قوى الربط للمعدن (Binding energy) ويتحرر من سطحه بالطاقة المتبقية على شكل طاقة حركية ترتبط بالعلاقة:

$$K = h\nu - \varphi = h\nu - h\nu_o \tag{٢}$$

حيث $\varphi = h\nu_o$ هي دالة الشغل الكهروضوئية، وتعرف دالة الشغل بأنها أقل طاقة يكتسبها الإلكترون للتحرر من سطح المعدن، وبالطبع فهي تعتمد على طبيعة المعدن.

مثال: لوحظ أن الظاهرة الكهروضوئية تبدأ عندما يصل تردد الضوء الساقط على سطح المعدن إلى القيمة الحرجة 8.0×10^{14} Hz، فما هي دالة الشغل الكهروضوئية للمعدن؟

الحل: دالة الشغل الكهروضوئية للمعدن تحسب من المعادلة:

$$\varphi = h\nu_o = (6.63\times10^{-34}\ \text{J.s})(8.0\times10^{14}\ \text{Hz})$$
$$= 5.3\times10^{-19}\ \text{J} = \underline{3.3\ \text{eV}}.$$

مثال: إذا ارتفع تردد الضوء الساقط في المثال السابق إلى 9.0×10^{14} Hz فما هي طاقة الحركة للإلكترون المنبعث.

الحل: طاقة الحركة للإلكترون المنبعث تحسب من المعادلة:

$$K = h(\nu-\nu_o) = (6.63\times10^{-34}\ \text{J.s})(9.0\times10^{14} - 8.0\times10^{14}\ )\text{Hz}$$
$$= 0.66\times10^{-19}\ \text{J} = \underline{0.41\ \text{eV}}$$

مثال: لضوء ساقط على سطح معدن بطول موجي $\lambda_{inc} = 6.8\times10^{-7}$ m ، احسب تردد الضوء الساقط والتردد الحرج للمعدن. اشرح احتمالية حدوث الظاهرة. استخدم $\varphi = 2.4\,\text{eV}$.

الحل: تردد الضوء الساقط يحسب من المعادلة:

$$\nu = \frac{c}{\lambda_{inc}} = \frac{3.0\times10^{6}\ \text{m/s}}{6.8\times10^{-7}\ \text{m}}$$
$$= 4.4\times10^{14}\ \text{Hz}$$

والتردد الحرج للمعدن يحسب من المعادلة:

$$\nu_o = \frac{\varphi}{h} = \frac{2.4\times1.6\times10^{-19}\ \text{J}}{6.63\times10^{-34}\ \text{J.s}} = \underline{5.8\times10^{14}\ \text{Hz}}$$

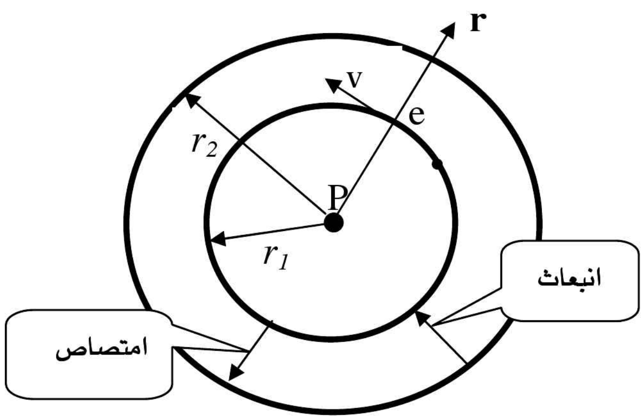
وحيث إن $\nu < \nu_o$ فإن هذا يعني أن $K < 0$ وهو حالة غير مسموح بها فيزيائياً. لذا لن يكون هناك ظاهرة كهروضوئية.

٣- نموذج بور (Bohr) لذرة الهيدروجين (١٩١٣)

افترض النموذج التقليدي للذرة (نموذج راذرفورد (Rutherford)) أن ذرة الهيدروجين (انظر الشكل ٥ a) تتكون من نواة مركزية ضخمة نسبياً، فيها بروتون "P" ذو شحنة موجبة، وإلكترون "e" (ذو شحنة سالبة) يدور حول نواة الذرة. وقد باء هذا النموذج بفشل ذريع في تفسير الخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين. فتبعاً لنظريات ماكسويل فإن الإلكترون سوف يفقد طاقته باستمرار نتيجة الإشعاع، وينتهي مصيره بالسقوط بنواة الذرة.

شكل (٥) a- نموذج راذرفورد.

وأصبح السؤال المُلحّ: لماذا تعطي ذرة الهيدروجين طيفاً خطياً وليس طيفاً مستمراً (شريطياً) كالضوء الأبيض عندما يتحلل بالمنشور؟ ولتفسير الخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين وضع بور نموذجه (انظر الشكل ٥ b) على ثلاثة فروض أساسية وهي:



شكل (٥) b- رسم مبسط لذرة بور للهيدروجين

أ- يتحرك الإلكترون، بسرعة v ، في مدارات دائرية ثابتة (مستقرة) على مسافة r من النواة. وذلك نتيجةً لمساواة قوى التجاذب الالكتروستاتيكية بين البروتون والإلكترون والقوة الطاردة المركزية (مثال لهذا: حركة الكواكب حول الشمس.)

ب- كمية الحركة الدورانية " L " للإلكترون بالمدارات المستقرة يجب أن تحقق العلاقة المكماة:

$$L = mvr = n\hbar, \qquad n = 1,2,3,\cdots \tag{٣}$$

حيث n هو العدد الكمي.

ج- لا ينبعث من الإلكترون أي طاقة إشعاعية، وهو يتحرك في مداراته المستقرة، ولكن تنبعث منه الأشعة فقط عندما ينتقل من مدار علوي ذي طاقة "E_i" الى مدار آخر أقل منه في الطاقة "E_f". وتحسب تردد الأشعة المنبعثة ν بالعلاقة:

$$\Delta E = h\nu = E_i - E_f \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{E_i - E_f}{h}. \tag{٤}$$

وباستخدام فروض بور تم حساب أنصاف أقطار المدارات (r_n) وطاقاتها (E_n) بالعلاقات:

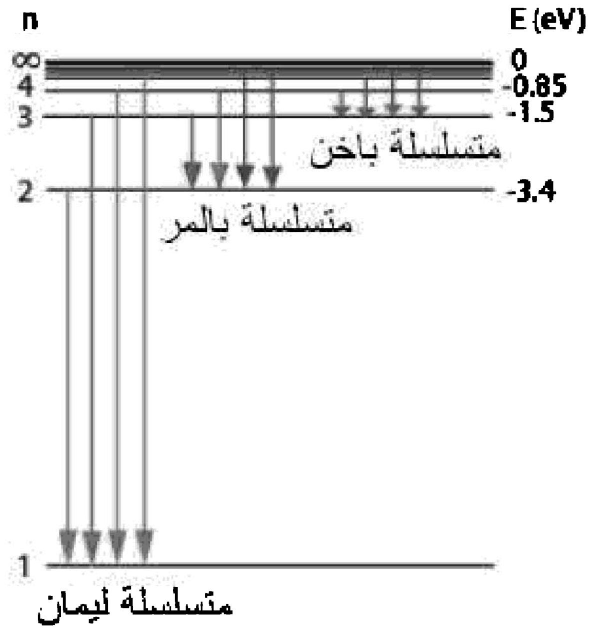
$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_o, \tag{a5}$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}\ \text{Ry}, \qquad \text{Ry} = 13.6\ \text{eV}. \tag{b5}$$

حيث a_o هي نصف قطر ذرة بور (انظر الملحق A) و Z هوعدد البروتونات بالنواة.

من المعادلة (b5) نلاحظ أن لكل قيمة Z يوجد عدد لا نهائي من قيم الطاقة (انظر الشكل c5) بدايةً من المستوى الأرضي (أدنى مستوى حيث $n = 1$) نجد أن $(E_1 = -13.6 Z^2\ \text{eV})$ إلى مرحلة التأين (بمعنى أن الإلكترون يصبح حراً) حيث $(n = \infty)$ و $E_\infty = 0$. وللقيم $n = 2, 3, \cdots$ نحصل على المستويات المثارة. لذرة الهيدروجين نستخدم $Z = 1$ وبالإمكان استخدام المعادلة (b5) للذرات الشبيهة بالهيدروجين التي تحتوي على عدد Z من البروتونات وإلكترون واحد فقط، بمعنى أن الذرة فقدت بعضاً من إلكتروناتها ولم يتبقَ لها غير إلكترون واحد، مثال لذلك $Z = 2$ في حالة الهيليوم وحيد التأين (He^{1+})، $Z = 3$ في حالة الليثيوم ثنائي التأين ($\left(Li^{2+}\right)$ ...إلخ). نلاحظ هنا أيضاً أنَّ المسافات بين مستويات الطاقة تقل مع زيادة n ، تبعاً للمعادلة:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = -Z^2\left[\frac{1}{(n+1)^2} - \frac{1}{n^2}\right] \underset{n \gg 1}{\approx} \frac{Z^2}{n^3}$$



شكل (٥) c - طيف الطاقة وبعض المتسلسلات الطيفية لذرة الهيدروجين.

من المعادلتين (٥) و(b5) نستطيع أن نصل لعلاقة بور الشهيرة:

$$\nu = \frac{Z^2}{h}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)\text{Ry.} \qquad (٦)$$

التي استخدمت لتعيين وحساب مستويات الطاقة وطاقة التأين لذرة الهيدروجين. ونجحت المعادلة (٦) في تفسير متسلسلات الطيف الخطي لذرة للهيدروجين (وأيضاً أطياف الذرات ذات الإلكترون الواحد))انظر الشكل ٥ c) مثل:

١- متسلسلة ليمان (Lyman series) فوق البنفسجية ($n_f = 1, \ n_i = 2, 3, \cdots$)،
٢- متسلسلة بالمر (Palmer series) للطيف المرئي ($n_f = 2, \ n_i = 3, 4, \cdots$)،
٣- متسلسلة باخن (Pachen series) تحت الحمراء ($n_f = 3, \ n_i = 4, 5, \cdots$).

وعلى الرغم من نجاح نظرية بوهر في تفسير أطياف الذرات ذات الإلكترون الواحد، لكنها فشلت في تفسير أطياف الذرات الأخرى التي تتكون من إلكترونين فأكثر، وفشلت أيضاً في تفسير الأطياف الناتجة من تأثير المجال الخارجي (كهربي أو مغناطيسي). لذلك فقد ظهرت نظريات وفروض أخرى لمعالجة الخلل في نظرية بور.

مثال: احسب التردد الناتج من انتقال إلكترون بذرة الهيدروجين من المستوى الثالث "$n_i=3$" إلى المستوى الثاني "$n_f=2$".

الحل: $$\nu=\frac{Z^2}{h}\left(\frac{1}{n_f^2}-\frac{1}{n_i^2}\right)Ry=\frac{13.6\times1.6\times10^{-19}\,J}{6.63\times10^{-34}\ J.s}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right)=\underline{4.6\times10^{14}\ Hz}$$

مثال: ماهي الطاقة اللازمة لنقل إلكترون بذرة الهيدروجين من المستوى الثاني "$n_i=2$" إلى المستوى الثالث "$n_f=3$".

الحل:

$$\Delta E=-\frac{13.6}{3^2}-(-\frac{13.6}{2^2})=-1.51-(-3.40)$$
$$=1.89\ eV=\underline{3.0\times10^{-19}\ J.}$$

مثال: ماهي الطاقة اللازمة لنقل إلكترون في حالة الهيليوم وحيد التأين ($Z=2$) من المستوى الثاني "$n_i=2$" إلى المستوى الثالث "$n_f=3$".

الحل: $$\Delta E=Z^2\left[-\frac{13.6}{3^2}-(-\frac{13.6}{2^2})\right]=7.56\ eV=\underline{12.0\times10^{-19}\ J.}$$

مثال: ماهي الطاقة اللازمة لتأيين ذرة الهيدروجين.

الحل: $$\Delta E=\left(\frac{1}{n_f^2}-\frac{1}{n_i^2}\right)Ry=\left(\frac{1}{\infty}-\frac{1}{1}\right)Ry=1\ Ry=\underline{13.6\ eV}$$

مثال: ماهي طاقة الفوتون المنبعث نتيجة لانتقال إلكترون بذرة الهيدروجين من المستوى العاشر "$n_i=10$" إلى المستوى الثاني "$n_f=2$".

الحل: $$\Delta E=\left(\frac{1}{n_f^2}-\frac{1}{n_i^2}\right)13.6\ eV=\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{10^2}\right)13.6\ eV=\underline{3.26\ eV}$$

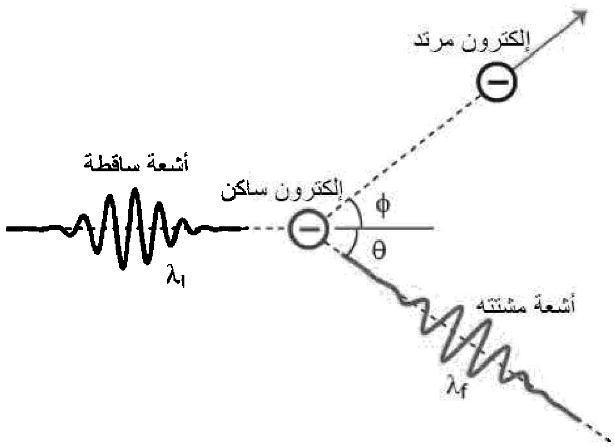
مثال: تأكد من نتائج الطول الموجي والتردد الناتج من انتقال إلكترون بذرة الهيدروجين من المستويات الابتدائية "n_i" إلى النهائية "n_f" بالجدول التالي. ($nm = 10^{-9}\ m$)

الحل: باستخدام المعادلة $\nu = \frac{Z^2}{h}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) Ry$ و $\lambda = c/\nu$ نحصل على الجدول التالي:

n_i	n_f	$\lambda(nm)$	$\nu(Hz)$
∞	١	٩١	3.3×10^{15}
٥	١	٩٥	3.25×10^{15}
٥	٤	٤٠٠٠	7.5×10^{13}
٣	٢	٦٦٧	4.5×10^{14}
٢	١	١٢١	2.48×10^{15}

٤- تشتت كمتون (Compton scatering) (١٩٢٣)

تفسر الفيزياء التقليدية تشتت الأشعة الكهرومغناطيسية (مثل أشعة X السينية) بالمادة بأن المجال الكهربي للموجة الكهرومغناطيسية الساقطة بتردد ν يؤثر على شحنات المادة، ويجعلها تهتز قسراً بنفس تردد الموجة الساقطة (ظاهرة الرنين). ومن ثم فإن هذه الشحنات، المهتزة قسراً، تشع موجاتها الكهرومغناطيسية المكتسبة بنفس التردد. ولهذا لا يوجد أي اختلاف بين تردد الموجة الكهرومغناطيسية الساقطة والمشتتة.



شكل (٦) رسم مبسط لتشتت كمتون ويبين قبل التصادم أشعة ساقطة بطول موجي (λ_i) وهدف يتكون من إلكترون ساكن. بعد التصادم نحصل على أشعة مشتتة بطول موجي (λ_f) بزاوية θ وإلكترون مرتد بزاوية ϕ.

بحلول عام ١٩٢٣ اكتشف كمتون أن الأشعة المشتتة تحتوي على أطوال موجية (λ_f) أطول من الأطوال الموجية (λ_i) للأشعة الساقطة. ولتفسير هذا الاختلاف افترض كمتون أن هذه الظاهرة ناتجة من التصادم المرن بين الضوء كجسيمات (فوتون) وإلكترونات المادة. وحيث إن طاقة الفوتون عالية بالنسبة لطاقة الإلكترونات، فإن الفوتون سوف يفقد جزءاً من طاقته ليكتسبها الإلكترون المرتد.

وباستخدام قوانين حفظ الطاقة وكمية الحركة الخطية فقد نجح كمتون في اشتقاق العلاقة الآتية (انظر: الشكل ٦):

$$\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i = a(1 - \cos\theta) \tag{٧}$$

حيث $\Delta\lambda$ هي الإزاحة في الطول الموجي، $a = h/m_o c = 0.0243\ \mathring{A}$ هي طول موجة كمتون للمادة المشتتة (إلكترون في هذه الحالة). عند $\theta=0$ نحصل على $\lambda_f = \lambda_i$ وهو التشتت التقليدي أو تشتت تومسون.

والخلاصة هنا: أن الضوء عندما ينتقل، ينتقل كموجة ولكنه يتبادل الطاقة كجسيم.

مثال: فوتون بطول موجي $\lambda_i = 1.000\ \mathring{A}$ اصطدم بإلكترون معزول وساكن. احسب الطول الموجي للفوتون المشتت إذا علم أنه ارتد بعد التصادم.

الحل:

$$\because \Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i = (1 - \cos 180) \times 0.024\ \mathring{A}$$

$$= 0.048\,\mathring{A}$$

$$\therefore \lambda_f = \lambda_i + 0.048\text{A} = \underline{1.048\,\mathring{A}}$$

مثال: فوتون طاقته الابتدائية $E_i = 1.02\text{ MeV}$ تشتت بزاوية $\theta = 90^o$ بعد اصطدامه بإلكترون معزول وساكن. احسب طاقة الفوتون المشتت والإلكترون بعد التصادم.

الحل:

أولاً: نحسب التغير في الطول الموجي:

$$\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{m_o c}(1-\cos\theta) = \frac{h}{m_o c}$$
$$= \frac{(6.63\times10^{-34}\ \text{J.s})}{(9.1\times10^{-31}\text{Kg m})\times(3.0\times10^{8}\ \text{m/s})} = \underline{2.42\times10^{-12}\ \text{m}}$$

ثانياً: نحسب التغير في التردد " $\Delta\lambda = c\Delta\nu$ " فنجد أن:

$$\Delta\nu = \frac{c}{\Delta\lambda} = \frac{3.0\times10^{6}\ \text{m/s}}{2.42\times10^{-12}\ \text{m}} = \underline{1.24\times10^{18}\ \text{Hz}}$$

ثالثاً: نحسب التغير في الطاقة:

$$\Delta E = h\Delta\nu = (6.63\times10^{-34}\ \text{J.s})(1.24\times10^{18}\ \text{Hz})$$
$$= 8.18\times10^{-14}\ \text{J} = \underline{0.51\ \text{MeV}}$$

هذه الطاقة تحولت إلى الإلكترون المرتد لتصبح طاقته الحركية بعد التصادم = 0.51 MeV ، وتصبح طاقة الفوتون المشتت هي:

$(1.02-0.51)\text{MeV} = \underline{0.51\ \text{MeV}}$.

٥- فرضية دي-برولي (de-Broglie) (١٩٢٣)

رأينا فيما سبق (خلال دراستنا للخاصية الكهروضوئية وتشتت كمتون): أن الأشعة الكهرومغناطيسية يمكن أن تتصرف تحت ظروف معينة كما لو كانت جسيمات (فوتونات). وكما نعلم أن الله قَد فطر الأشياءَ متماثلة، لذلك إذا أصبح للإشعاع طبيعة جسيمية، فإن الجسيم أيضاً سوف يصبح له طبيعة موجية. ومن خلال مساواة معادلة أينشتين للطاقة ($E=mc^2$) ومعادلة الطاقة للموجة ($E=h\nu$) اقترح لويس دي-برولي أن الجسيم الذي يتحرك بسرعة v يمكن التعامل معه كموجة ترددها هو $\nu = \frac{mc^2}{h}$ وطولها الموجي:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\text{v}} \qquad (٨)$$

ومنها فإن هذه الفرضية تنص على أن "الجسيمات المتحركة تتمتع بخواص ازدواجية"

وهنا نسأل: لماذا لم نلاحظ الموجات المصاحبة للأجسام التقليدية؟ وللإجابة عن هذا السؤال دعونا نحسب على سبيل المثال الطول الموجي المصاحب لكرة قدم (Soccer ball) كتلتها 0.15 kg وسرعتها 40 m/s ؛

$$\lambda_{ball} = \frac{h}{mv} = \frac{6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J.s}}{(0.15\ \mathrm{kg})(40\ \mathrm{m/s})} \approx 1.1\times10^{-34}\,\mathrm{m}.$$

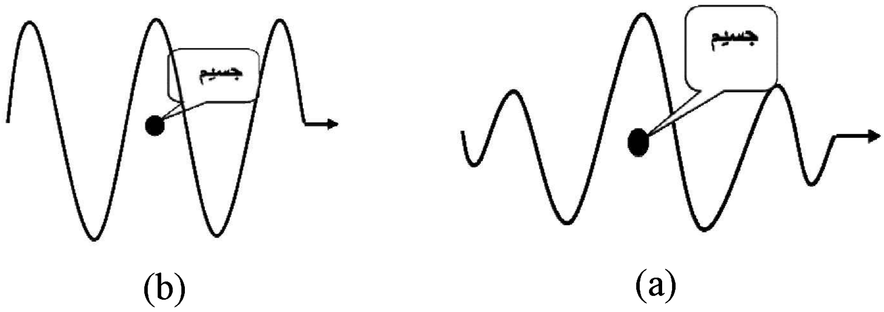
هذا الطول الموجي المصاحب للكرة لايمكن قياسه بالأجهزة المعملية المتاحة. والآن إذا أبدلنا الكرة بإلكترون وأبقينا السرعة كما هي، فإن الطول الموجي المصاحب للإلكترون يصبح:

$$\lambda_{elec} = \frac{h}{mv} = \frac{6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J.s}}{(9.109\times10^{-31}\ \mathrm{kg})(40\ \mathrm{m/s})} \approx \underline{1.8\times10^{-5}\mathrm{m}}.$$

وهي قيمة من السهل قياسها عملياً.

هذا وقد تحقق من هذه الفرضية عملياً بواسطة تجربة العالمين دافيسون وجيرمر الخاصة بحيود الإلكترونات عام (١٩٢٧).

ويجب أن نشدد هنا على أن موجة دي-برولي يجب أن تعبر عن الجسيم من عدة نواحٍ، وأهمها: تحديده بالمكان كما في شكل a٧ (ملحوظة: الشكل a٧ هو محصلة لحزمة من الموجات، ولهذا تسمى حزمة موجية (wave packet)). ومن ثم: فإن شكل b٧ لا يمكن أن يمثل الجسيم تمثيلاً صحيحاً حيث إن الموجة غير محددة بمكان.



شكل (٧) موجات دي-برولي المصاحبة لجسيم a- موجة مقبولة b- موجة غير مقبولة

من هذا نستنتج أنه لايمكن وصف الإلكترون بموجة وحيدة، ولكن يوصف بحزمة من الموجات ومن خلال سلوك الموجات من حيث التداخل البناء والهدام تظهر احتمالية لوجود الإلكترون بمنطقة محددة.

ننهي كلامنا هنا بتعليق وهو: أن الفرض الثاني من فروض بور ما هو إلا شكل آخر لفرضية دي-برولي التي تنص على أنه في حالة المستويات المستقرة فإن أعداداً صحيحة من موجات دي-برولي يجب أن تتطابق مع محيط المدار، وهكذا فإن الموجات يعضد بعضها بعضاً. ورياضياً تُكتب الفرضية كالتالي:

$$\boxed{2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{m\,\mathrm{v}} \quad \Rightarrow \quad m\,\mathrm{v}\,r = n\,\hbar} \qquad (٩)$$

٦- مبدأ بور المتمم

ينص هذا المبدأ على أن:

"سلوك الطاقة الكهرومغناطيسية الازدواجي هو متمم بعضه لبعض"

وهذا معناه ببساطة: إنّ أي قياسات معملية تستخدم الطاقة الكهرومغناطيسية بالإمكان تفسيرها بنموذج واحد فقط لا غير، وهو أن الطاقة الكهرومغناطيسية: إما جسيمات أو موجات، وليسا معاً.

هذا المبدأ أيضاً أدى إلى فهم ازدواجية الجسيم والموجة. فعندما تظهر إحدى الصفات بالتجربة المعملية، فإن الصفة الأخرى تنعدم. كمثال على ذلك: إذا ظهرت الصفة الموجية لإلكترون، كالحيود مثلاً، فلن تظهر صفته الجسيمية، ولكن إذا انحرف الإلكترون في مساره، نظراً لتواجد مجال كهربي خارجي كمثال، فإن الصفة الموجية له تنعدم.

٧- مبدأ عدم الدقة (عدم التحديد) لهيزنبرج (Heisenberg)

في الميكانيكا التقليدية تم افتراض أن المكان (ولنعرفه فرضاً بالمتغير x) وكمية الحركة الخطية المرافقة لها (ولنعرفه p_x) يمكن تحديدهما بدقة متناهية في آن واحد. ولكن وجد هيزنبرج أن ذلك غير ممكن في ميكانيكا الكم عند التعامل مع

الجسيمات المجهرية، ولا دخل هنا لكفاءة أجهزة القياس في هذه الفرضية. وقد اشتق بعض المتباينات ومنها:

$$\begin{aligned} \Delta x\, \Delta p_x &\geq \hbar/2, \\ \Delta E\, \Delta t &\geq \hbar/2. \end{aligned} \tag{١٠}$$

وتبين هذه المعادلة قاعدة عدم التحديد لهيزنبرج، وتنص على أنه: "من المستحيل قياس كميتين مترافقتين قانونا (مثل x و p_x) بدقة متناهية في آنٍ واحد".

بمعنى آخر: أنه كلما ازداد التحديد (الدقة) في قياس موضع الجسيم (مثلاً Δx صغيرة) ازداد عدم التحديد (عدم الدقة) في قياس كمية الحركة الخطية المرافقة لها (بمعنى أن Δp_x تكون كبيرة) وحاصل ضربهما يعطي بالمتباينة السابقة. وقد ظهرت الآثار الإيجابية لهذا المبدأ في بعض المسائل المهمة، ومنها إثبات عدم احتمالية وجود الإلكترون بالنواة.

مثال: افترض أن سرعتي إلكترون كتلته = 9.11×10^{-31} kg ورصاصة كتلتها = 0.03 kg قيستا بعدم دقة مقدارها $\Delta v = 10^{-3}$ m/s. ما هي أقل قيمة لعدم الدقة في قياس أماكن وجودهما؟

الحل: عدم الدقة في قياس مكان الإلكترون هو:

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2m\Delta v} = \frac{1.055\times10^{-34}\,\text{J.s}}{2(9.11\times10^{-31}\,\text{kg})(10^{-3}\,\text{m/s})} = \underline{0.05\,\text{m}}.$$

عدم الدقة في قياس مكان الرصاصة هو:

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2m\Delta v} = \frac{1.055\times10^{-34}\,\text{J.s}}{2(0.03\,\text{kg})(10^{-3}\,\text{m/s})} = \underline{3.5\times10^{-30}\,\text{m}}.$$

من هذا المثال يتضح التالي:

أ- للأجسام العينية، مثل الرصاصة، فإن فرضية عدم الدقة لا تنطبق عليها، لأن الخطأ بالقياس المتري أكبر بكثير جداً من 10^{-30} m.

ب- يختلف الأمر للأجسام المجهرية، حيث إن الخطأ 0.05 m أكبر بكثير جداً من الأطوال المجهرية. ولتفهم هذا الوضع، نحن نعلم أن الذرات في المواد الصلبة تبعد عن بعضها نحو 10^{-9} m فإذا كان الخطأ في القياس هو 0.05 m فمعنى هذا أن الإلكترون بإمكانه أن يكون بأي ذرة من 10^{9} ذرة متجاورة بالمادة، ولا نستطيع أن نحدد مكانه تماماً.

٨- التفسير الإحصائي (الاحتمالي) للدالة الموجية

رأينا من الفرضية الازدواجية لدي-برولي (de-Broglie) أن الجسيم يصاحبه موجة، قد سماها العالم شرودنجر (Schrödinger) (١٩٢٦) بالدالة الموجية، ورَمز لها بالرمز $\Psi(\boldsymbol{r},t)$. ولكننا حتى الآن لم نحدد أو نعرف خواص هذه الدالة. ولتحديد طبيعتها يجب أن نبحث عن العلاقة بين النظرة الموجية والنظرة الجسيمية، وهذا يتم بملاحظة الآتي:

أ- لشعاع كهرومغناطيسي أحادي اللون ساقط بزاوية عمودية على حائل، تعرف شدة الاستضاءة "I" بأنها الطاقة الساقطة على وحدة المساحات على وحدة الزمن، وتعرف بالمعادلة:

$$I = \varepsilon_o\, c \left|\boldsymbol{E}\right|^2 \qquad (١١)$$

حيث إن: ε_o سماحية الفراغ، $|\boldsymbol{E}|$ هو مقدار (سعة) المجال الكهربي اللحظي (الآني) على الحائل.

ب- وعندما نتعامل مع الشعاع الكهرومغناطيسي أحادي اللون على أنه جسيم (فوتون) طاقته هي $h\nu$، وعرفنا فيض الفوتونات "N" بأنه عدد الفوتونات الساقطة على وحدة المساحات على وحدة الزمن، فإن الشدة تعرف في هذه الحالة بالعلاقة:

$$I = N\, h\nu \qquad (١٢)$$

و بمساواة المعادلتين (١١) و(١٢) نجد أن:

$$N = \frac{\varepsilon_o\, c}{h\nu}\left|\boldsymbol{E}\right|^2 \quad \Rightarrow \quad N \propto \left|\boldsymbol{E}\right|^2 \qquad (١٣)$$

فماذا تعني المعادلة (١٣)؟ تعني أننا أوجدنا علاقة بين النظرة الموجية متمثلة في شدة المجال الكهربي للموجة $\left|\boldsymbol{E}\right|^2$ والنظرة الجسيمية متمثلة بعدد الفوتونات N.

وحيث إنه من المستحيل توقع مكان أو زمن وصول الفوتون إلى الحائل بدقة، لذلك فإن توزيع الفوتونات على الحائل سيكون توزيعاً عشوائياً. ولكن القيمة المتوسطة لوصول الفوتونات للحائل على وحدة المساحات على وحدة الزمن تكون ثابتة ويمكن توقعها. هذا يعني:

$$|E|^2 \propto \text{احتمالية تواجد الفوتونات}$$

وتعني ***"أن مربع مقدار شدة المجال الكهربي عند أي نقطة في الفراغ تتناسب مع احتمالية وجود الفوتون عند هذه النقطة"***.

الآن بإمكاننا القول: إن الدالة $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ ذاتها لا تحمل أي معنى فيزيائي واضح، لأنها من الممكن أن تكون دالة مركبة (Complex) ولا يمكن قياسها عملياً. ولكن المعنى الفيزيائي يأتي من مربع الدالة حيث نعرف:

$$\rho = |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = \Psi^*(\boldsymbol{r},t)\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

و$\Psi^*(\boldsymbol{r},t)$ هو المرافق المركب(Complex conjugate) للدالة $\Psi(\boldsymbol{r},t)$. هذا المقدار $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ (وهو قيمة حقيقية موجبة) يعطينا كثافة الاحتمال وتمثل احتمال تواجد الجسيم عند الوضع "$\boldsymbol{r}$" عند اللحظة "t". وعندما نتحدث عن فراغ ثلاثي الأبعاد فإن المقدار $|\Psi(x,y,z,t)|^2 d\tau$ سوف يعبر عن احتمالية وجود الجسيم بعنصر الحجم $d\tau$. وعنصر الحجم $d\tau$ يأخذ صوراً مختلفة تعتمد على الإحداثيات المستعملة. مثلاً في الإحداثيات الكرتيزية $d\tau = dx\,dy\,dz$ و تأخذ x,y,z القيم من $-\infty$ إلى ∞.

فى الأبواب المقبلة سوف نتعامل بكثرة مع موجات تأخذ الشكل $e^{\pm i(kx-\omega t)}$ حيث طاقتها هي:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

وكمية حركتها الخطية هي:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k .$$

والدالة $e^{i(kx-\omega t)}$ تعبر عن موجة مستوية تتحرك في الاتجاة الموجب للمحور السيني، وتسمى أحياناً دالة ساقطة (Incident wave) ، والدالة $e^{-i(kx-\omega t)}$ تعبر عن موجة مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وأحياناً تسمى دالة منعكسة

(Reflected wave). وهنا نأتي لسؤال: لماذا نتعامل بموجات مستوية بالشكل $e^{\pm i(kx-\omega t)}$ ولا نتعامل بموجات بالشكل $\psi_1=\cos(kx-\omega t)$ أو $\psi_2=\sin(kx-\omega t)$؟ السبب هنا يأتي من مبدأ التراكب (Superposition) ومنه نجد أن المحصلة:

$$\psi_1+\psi_2=2\sin(\omega t)\cos(kx)$$

وعند بدء الزمن ($t=0$) نجد أن هذا التراكب (المحصلة) يؤول للصفر، وتلغي الموجتان بعضهما بعضاً. وهذه حالة غير مقبولة فيزيائياً. وبالعكس فإن هذه الحالة لا تحدث إذا أخذنا الموجتين $\psi_1=e^{i(kx-\omega t)}$ و $\psi_2=e^{-i(kx-\omega t)}$.

٩- ملخص

أ- الأجسام المتحركة والطاقة الكهرومغناطيسية: لها خواص ازدواجية، بمعنى أنها شبه جسيمية وشبه موجية.

ب- الأجسام العينية من المادة: لها أساساً خواص جسيمية، مع أطوال موجية قصيرة جداً.

ج- الأجسام المجهرية من المادة: لها أساساً خواص موجية، مع أطوال موجية طويلة.

و قد لُخصت العلاقة بين المتغيرات بالجدول التالي:

الكمية الفيزيائية	الأجسام المتحركة	الموجات
الطاقة (E)	$\frac{1}{2}m\,\mathrm{v}^2$	$h\nu=\hbar\omega=\frac{hc}{\lambda}$
كمية الحركة الخطية (p)	$m\,\mathrm{v}$	$\frac{E}{c}=\frac{h\nu}{c}=\frac{h}{\lambda}$
الطول الموجي (λ)	$\frac{h}{p}=\frac{h}{m\,\mathrm{v}}$	$\frac{c}{\nu}$

١٠- تمارين عامة

١- باستخدام معادلة بلانك $u(\lambda)=\dfrac{8\pi hc}{\lambda^5}\dfrac{1}{\left(e^{hc/\lambda k_B T}-1\right)}$ أثبت قانون فين للإزاحة وعين قيمة الثابت.

الحل: لإثبات قانون فين للإزاحة، فإننا نبحث عن الطول الموجي الذي تكون فيه كثافة الطاقة المعطاة بمعادلة بلانك في قيمتها العظمى، وذلك باستخدام الشرط:

$$\left.\frac{\partial u(\lambda)}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=\lambda_{\max}}=0$$

وهذا الشرط يعطينا المعادلة:

$$x=5(1-e^{-x})$$

حيث $x=\dfrac{\beta hc}{\lambda_{\max}}$. بالإمكان حل المعادلة الأخيرة عددياً أو بالرسم البياني، وحلها هو:

$$x=\frac{\beta hc}{\lambda_{\max}}=\frac{hc}{\lambda_{\max}k_B T}=4.965$$

$$\Rightarrow \lambda_{\max}T=\frac{hc}{4.965k_B}=2.897\times10^{-3}\ \text{mK}$$

وهو المطلوب..

الباب الثاني

فروض ميكانيكا الكم

Postulates of Quantum Mechanics

الباب الثاني
فروض ميكانيكا الكم

في هذا الباب سوف نستعرض الفروض الأساسية، التي بنيت عليها نظرية ميكانيكا الكم مع بعض التطبيقات البسيطة. تُبنى ميكانيكا الكم على ثلاثة فروض أساسية، وهي:

١- الفرض الأول:

" أي نظام فيزيائي يوصف بدالة موجية ψ ".

هذه الدالة كما عرفناها من قبل بالباب الأول على أنها افتراضية (حقيقية أو مركبة)، ولا يمكن قياسها عملياً، ولكنها تعد كمقياس. المقدار $\rho = |\psi(r,t)|^2$ يعطينا كثافة الاحتمال، وتمثل احتمال تواجد الجسيم عند الوضع "r" عند اللحظة "t" وهنا يظهر سؤال: ما هي الشروط الواجب توافرها في الدالة ψ؟ والجواب هو: إذا عُرفت الدالة ψ في مدى محدد، مثلاً بين الإحداثيات (a,b)، فإن الدالة يجب أن تكون:

أ- وحيدة القيمة (Single valued)

ب- محددة (Finite and bounded)

ج- (وأيضاً مشتقاتها الأولى) متصلة ومستمرة (Continous everywhere).

أي وصف أو شرط آخر يعد مكملاً (ليس ضرورياً) للشروط السابقة. مثلاً، تعد الدالة متعامدة أو معيرة إذا حققت الشرط:

$$\int_{\text{all space}} \psi_m^*(r)\psi_n(r)\, d\tau = \delta_{mn}, \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{if } m = n \\ 0 & \text{if } m \neq n \end{cases} \qquad (١)$$

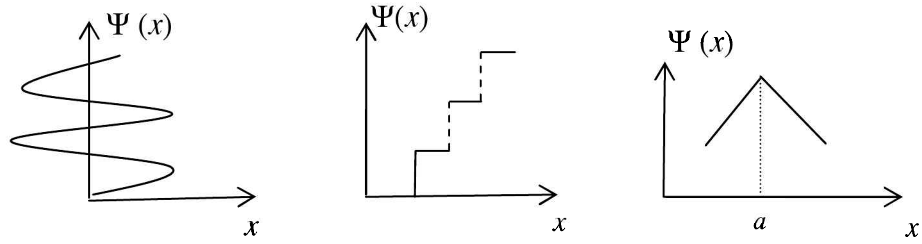
حيث إن الدالة ψ^* هي المرافق المركب للدالة ψ والدالة δ_{ij} تعرف بكرونكر دلتا. حيث إن $\delta_{ij} = 1$ هو شرط المعايرة و $\delta_{ij} = 0$ هو شرط التعامد.

إذا كانت الدالة معيرة فإن الصيغة التالية:

$$\text{Prob.}\ \{a \le x \le b\} = \int_a^b \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,dx$$
$$= \int_a^b |\psi_n(x)|^2 dx$$

تعطي احتمالية وجود الجسيم في المدى المحدد $\{a \le x \le b\} \equiv (a,b)$.

مثال: وضح لماذا لا تحقق الأشكال الآتية شروط ميكانيكا الكم؟



(c) (b) (a)

الحل: الأشكال السابقة لا تحقق شروط ميكانيكا الكم للأسباب التالية:

(a) الميل (المشتقة الأولى) للدالة $\Psi(x)$ غير متصل عند النقطة $x = a$.

(b) الدالة $\Psi(x)$ غير متصلة.

(c) الدالة $\Psi(x)$ متعددة القيم، حيث إن لكل قيمة x يوجد عدد لا نهائي من قيم $\Psi(x)$.

مثال: في المدى المحدد بين قوسين، وضح لماذا **لا** تحقق الدوال الموجية الآتية شروط ميكانيكا الكم؟

$$(a)\quad \psi_1 = e^{-x} \quad (-\infty, 0),$$
$$(b)\quad \psi_2 = e^{-|x|} \quad (-\infty, \infty),$$
$$(c)\quad \psi_3 = \frac{1}{x-4} \quad (0,5).$$

الحل:

(a) عندما $x \to -\infty$ فإن الدالة $\psi_1 \to \infty$ وتصبح غير محددة.

(b) الميل للدالة ψ_2 غير متصل عند النقطة $x = 0$.

(c) عندما $x \to 4$ فإن الدالة $\psi_3 \to \infty$ وتصبح غير محددة.

مثال: لموجة عيارية (مصاحبة لجسيم) معرفة في المدى $(0,L)$ بالعلاقة:

$$\psi(x) = c\sin(bx)$$

حيث $b = \pi / L$، احسب:

أ- ثابت العيارية c ،

ب- احتمالية وجود الجسيم في المدى $0 \to L/2$ ،

ج- احتمالية وجود الجسيم في المدى $0.25L \to 0.75L$.

الحل:

أ- ثابت العيارية يحسب من التكامل:

$$I = \int_0^L \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)dx = c^2\int_0^L \sin(bx)\sin(bx)dx$$

$$= c^2\int_0^L \sin^2(bx)dx = \frac{c^2}{2}\underbrace{\left| x - \frac{\sin(2bx)}{(2b)}\right|_0^L}_{=L} = \frac{c^2}{2}(L)$$

وباستخدام شرط العيارية " $I = 1$ " نجد أن:

$$c^2\left(\frac{L}{2}\right) = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{c = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

لحساب احتمالية وجود الجسيم في مدى محدد، مثلاً $\{a \le x \le b\}$ ، نستخدم التعريف:

$$\text{Prob}\{a \le x \le b\} = \int_a^b \psi^*_n(x)\,\psi_n(x)dx = \int_a^b \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$= \frac{2}{L}\int_a^b \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = \left|\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right|_a^b$$

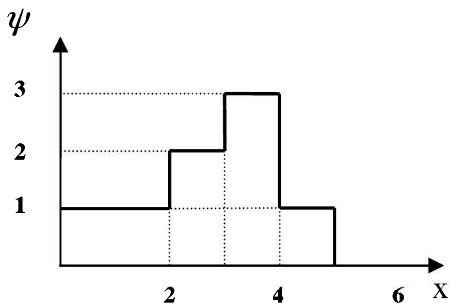
ب- في المدى $0 \to L/2$ ، نحصل على:

$$\text{Prob.}\{0 \le x \le L/2\} = \left|\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right|_0^{L/2}$$

$$= \frac{1}{2} \qquad\qquad \text{(for all } n\text{)}$$

ج- في المدى $0.25L \to 0.75L$ ، نحصل على:

$$\text{Prob. } \{0.25L \le x \le 0.75L\} = \left| \frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi}\sin(\frac{2\pi x}{L}) \right|_{0.25L}^{0.75L}$$
$$= 0.818$$



مثال: للدالة الموجية المرسومة ، احسب احتمالية وجود جسيم في المدى $\mathrm{X} = \{2,4\}$.

الحل: التجميع هنا يتم على مربع المساحات تحت المنحنى. في المدى $\mathrm{X} = \{0,5\}$ يوجد خمس مساحات من ١ إلى ٥ ، وفي المدى $\mathrm{X} = \{2,4\}$ يوجد مساحتان وهما ٣ و٤.

بحساب احتمالية وجود جسيم في المدى $\mathrm{X} = \{2,4\}$ نجد أن:

$$I = \sum_{i=3}^{4} \psi_i^2 = 9 + 4 = 13$$

واحتمالية وجود جسيم في المدى $\mathrm{X} = \{0,5\}$ هي:

$$II = \sum_{i=1}^{5} \psi_i^2 = 1 + 1 + 4 + 9 + 1 = 16,$$

ومنهما نجد أن احتمالية وجود جسيم في المدى $\mathrm{X} = \{2,4\}$ هي:

$$\text{Prob. } \{2 \le \mathrm{X} \le 4\} = \frac{I}{II} = \frac{\sum_{i=2}^{4} \psi_i^2}{\sum_{i=1}^{5} \psi_i^2} = \underline{\frac{13}{16}}$$

٢- الفرض الثاني:

"يوجد مؤثر (Operator) لكل كمية فيزيائية يمكن قياسها".

والمؤثر يمكن أن يكون عملية جمع (+) أو طرح (−) أو تفاضل.... لتمييز المؤثر سوف نضع أعلاه الإشارة "^". واختيار المؤثر يفضل أن يحقق معادلة القيمة المميزة، وهي بالصورة:

$$\overbrace{\hat{A}}^{\text{operator}} \quad \overbrace{\varphi}^{\text{eigenfunction}} = \underbrace{a}_{\text{eigenvalue}} \quad \overbrace{\varphi}^{\text{eigenfunction}} \qquad (٢)$$

حيث إن الدالة φ هي الدالة المميزة (Eigenfunction) (ويجب أن تظهر بكلا الطرفين) و a هي القيمة المميزة (Eigenvalue). وتُعرف الدالة المميزة: بأنها الدالة التي تحقق معادلة القيم المميزة، ولا يوجد عليها أي شروط أخرى إلا إذا استخدمت لوصف النظام الفيزيائي، فيجب أن ينطبق عليها الشروط الثلاثة السابقة.

مثال: هل المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ والدالة $\sin(ax)$ يكونان معادلة قيم مميزة؟

الحل: باستخدام المؤثر التفاضلي $\frac{d^2}{dx^2}$ على الدالة $\sin(ax)$ نجد أن:

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[\sin(ax)\right] = -a^2\left[\sin(ax)\right]$$

ومنها نستنتج أن المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ والدالة $\sin(ax)$ يكونان معادلة قيم مميزة، والقيمة المميزة لها هي $-a^2$.

بالنسبة للمؤثر يفضل (وليس شرطاً ضرورياً) أن يكون له خصائص خطية، بمعنى:

$$\begin{aligned} &\hat{A}\left[f(x)+g(x)\right] = \hat{A}f(x)+\hat{A}g(x), \\ &\hat{A}\left[kf(x)\right] = k\hat{A}f(x) \end{aligned} \qquad (٣)$$

حيث k مقدار ثابت و $g(x)$ و $f(x)$ هما دالتان اختياريتان.

مثال: أي من المؤثرات الآتية تعد مؤثرات خطية؟

$$(a)\ \sqrt{()} \qquad (b)\ \sin() \qquad (c)\ \ e^{()} \qquad (d)\ \frac{d}{dx}()$$

الحل:

$$(a)\ \sqrt{(\psi_1+\psi_2)} \neq \sqrt{(\psi_1)}+\sqrt{(\psi_2)}$$
$$(b)\ \sin(\psi_1+\psi_2) \neq \sin(\psi_1)+\sin(\psi_2)$$
$$(c)\ \ e^{(\psi_1+\psi_2)} \neq e^{(\psi_1)}+e^{(\psi_2)}$$
$$(d)\ \frac{d}{dx}(\psi_1+\psi_2) = \frac{d}{dx}(\psi_1)+\frac{d}{dx}(\psi_2)$$

إذاً المؤثر (d) هو المؤثر الخطي الوحيد في هذه المجموعة.

مثال: احسب الدالة المميزة للمؤثر $\hat{A} = \frac{d}{dx} - 2x$

الحل: بحل المعادلة المميزة $\hat{A}\psi = a\psi$ نجد أن:

$$\left(\frac{d}{dx} - 2x\right)\psi = a\psi$$

وتختصر إلى الصورة

$$\frac{d}{dx}\psi = (a+2x)\psi$$

وبإجراء التكامل ينتج:

$$\int \frac{d\psi}{\psi} = \int (a+2x)dx$$
$$\Rightarrow \qquad \boxed{\psi = c\,e^{ax+x^2}}$$

حيث c هو ثابت التكامل.

الجدول التالي يحتوي على بعض الكميات الفيزيائية والمؤثرات المناظرة لها في ميكانيكا الكم.

الكمية الفيزيائية	رمزها	المؤثر المناظر
إحداثي الموضع	x	$\hat{x} = x$
مركبة كمية الحركة الخطية	p_x	$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
كمية الحركة الخطية	$\boldsymbol{p}$	$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$
طاقة الحركة	$K = p^2/2m$	$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
كمية الحركة المدارية	$\boldsymbol{L}$	$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$
طاقة الوضع	V	$\hat{V} = V$
الطاقة الكلية	E	$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

مثال: احسب التعبير النهائي للمؤثر $\hat{D}\,x \equiv \frac{d}{dx}x$

الحل: بالتأثير على دالة اختيارية ψ بالمؤثر $\frac{d}{dx}x$ نجد:

$$\left(\frac{d}{dx}x\right)\psi = \frac{d}{dx}(x\psi) = x\frac{d\psi}{dx} + \psi\frac{dx}{dx} = \left(x\frac{d}{dx} + 1\right)\psi$$

وهذا يعني أن

$$\boxed{\left(\hat{D}x\right) \equiv \left(x\hat{D} + 1\right)}$$

مثال: احسب التعبير النهائي للمؤثر $(\hat{D} + \hat{x})^2$ ، حيث $\hat{D} = \frac{d}{dx}$.

الحل:

$$
\begin{aligned}
(\hat{D}+\hat{x})^2 &= (\hat{D}+\hat{x})(\hat{D}+\hat{x}) \\
&= \hat{D}^2+\hat{x}\hat{D}+\underbrace{\hat{D}\hat{x}}_{\hat{x}\hat{D}+1}+\hat{x}^2 = \hat{D}^2+\hat{x}\hat{D}+\hat{x}\hat{D}+1+\hat{x}^2 \\
&= \underline{\hat{D}^2+2\hat{x}\hat{D}+\hat{x}^2+1}
\end{aligned}
$$

هذا وقد استخدمنا في الحل نتيجة المثال السابق.

٣- الفرض الثالث:

" القيمة المتوقعة (Expectation value) ***للقيم الفيزيائية التي يمكن قياسها تعرف*** بالمعادلة:

$$\overline{\hat{A}} \equiv \langle \hat{A} \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \qquad (٤)$$

في حالة الدالة غير العيارية، وتأخذ الشكل:

$$\overline{\hat{A}} \equiv \langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau \qquad (٥)$$

في حالة الدالة العيارية. وتلعب القيمة المتوقعة دوراً رئيسياً في ميكانيكا الكم، حيث إننا نتعامل مع أعداد لا نهائية من الجسيمات، ولا نستطيع التعامل مع كل جسيم على حدة.

مثال: للدالة

$$f(x) = c(ax - x^2), \quad 0 \le x \le a$$

أ- احسب ثابت العيارية.

ب- احسب $<\hat{x}>\,,\ <\hat{x}^2>, \Delta\hat{x}$.

الحل:

أ- ثابت العيارية يحسب من التكامل:

$$I = \int_0^a f^*(x)\, f(x) dx = c^2 \int_0^a (ax - x^2)^2 dx$$
$$= \frac{c^2}{30} a^5$$

وباستخدام شرط العيارية " $I = 1$ " نجد أن:

$$\boxed{c = \sqrt{\frac{30}{a^5}}}$$

ب- القيم المتوقعة تحسب كالتالي:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^a f^*(x)\, x\, f(x) dx = c^2 \int_0^a x(ax - x^2)^2 dx$$
$$= \frac{a}{2},$$
$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_0^a f^*(x)\, x^2 f(x) dx = c^2 \int_0^a x^2(ax - x^2)^2 dx$$
$$= \frac{2a^2}{7}$$

ومن ثم فإن:

$$\Delta\hat{x} = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2} = \frac{a}{\sqrt{28}}$$

٤- تمارين عامة

١- في المدى المحدد بين قوسين، ارسم الدوال الموجية الآتية، لترى أنها تحقق شروط ميكانيكا الكم:

$$(\text{a}) \; \frac{\sin(x)}{x} \quad (0,\infty) \quad (\text{b}) \; a\,x \quad (-5,5) \qquad (\text{c}) \; e^{-x} \quad (0,\infty)$$

٢- تحقق من صحة معادلات المؤثرات الآتية:

$$(\text{a}) \; \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 = \left(\frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + x^2 + 1\right)$$

$$\text{b}) \; \left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^3 = \frac{d^3}{dx^3} + \frac{3}{x}\frac{d^2}{dx^2}$$

(c) $\left(x\frac{d}{dx}\right)^2 = x^2\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx}$

(d) $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2 = x^2\frac{d^2}{dx^2} + 3x\frac{d}{dx} + 1$

(e) $\left(\frac{d}{dx} \pm x\right)\left(\frac{d}{dx} \pm x\right) = \left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2 \mp 1\right)$

٣- حدد أيا من المعادلات الآتية تحقق معادلة القيم المميزة

(a) $\frac{d}{dx}\sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$

(b) $\frac{d^2}{dx^2}\sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$

(c) $\frac{d^n}{dx^n}e^{\alpha x}$

(d) $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx}$

٤- بمعرفة المؤثرين $\hat{A} = \frac{d}{dx}(\ )$ و $\hat{C} = \frac{1}{(\ )}$ والدالة $\psi = 45xy^2$ تحقق من المعادلات الآتية:

(a) $\hat{A}(\hat{C}\psi) = \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(45xy^2)}\right) = -\frac{1}{45x^2y^2}$

(b) $\hat{C}(\hat{A}(\psi)) = \hat{C}(\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(45xy^2)}\right) = \hat{C}(-\frac{1}{45x^2y^2}) = -45x^2y^2$

٥- للدالة

$$f(x) = \begin{cases} A, & a \le x \le b \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

حيث A ثابت. تحقق من الآتي:

$$A = \frac{1}{\sqrt{b-a}}, < \hat{x} > = \frac{b+a}{2}, < \hat{x}^2 > = \frac{b^2+ab+a^2}{3},$$
$$\Delta\hat{x} = \sqrt{< \hat{x}^2 > - < \hat{x} >^2} = \frac{\sqrt{b-a}}{\sqrt{12}}$$

٦- لدالة جاوس $-\infty \le x \le \infty$، $\psi(x) = Ne^{-x^2/2a}$ تحقق من الآتي:

$$N = \left(\frac{1}{\pi a}\right)^{1/4}, < \hat{x} >= 0, < \hat{x}^2 >= \frac{a}{2}, < \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} >= 0, < \hat{p}^2 >= \frac{\hbar^2}{2a},$$
$$\Delta x = \sqrt{< \hat{x}^2 > - < \hat{x} >^2} = \sqrt{\frac{a}{2}}, \ \Delta\hat{p} = \sqrt{< \hat{p}^2 > - < \hat{p} >^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2a}}, \text{ and}$$
$$< E = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} > = \frac{1}{2m}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2a}}, \quad \Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}$$

استخدم التكامل القياسي: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}},$

٧- للدالة

$$f(x) = \begin{cases} cx(a-x), & 0 \le x \le a \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

تحقق من الآتي:

$$c = \sqrt{\frac{30}{a^5}}, < \hat{x} >= \frac{a}{2}, < \hat{x}^2 >= \frac{2}{6}a^2, < \hat{p} >= 0, < \hat{p}^2 >= 10\frac{\hbar^2}{a^2},$$
$$\Delta\hat{x} = \sqrt{< \hat{x}^2 > - < \hat{x} >^2} = \frac{\sqrt{7}}{14}a, \ \Delta\hat{p} = \sqrt{< \hat{p}^2 > - < \hat{p} >^2} = \frac{\sqrt{10}}{a}\hbar, \text{ and}$$
$$< E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} >= 5\frac{\hbar^2}{ma^2}$$
$$\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = 0.6\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

٨- للدالة $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$ وفي المدى $0 \le x \le L$ تحقق من الآتي:

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{L}{2}; \quad \langle \hat{p} \rangle = 0; \quad \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{L^2}{6n^2}\left(\frac{2\pi^2 n^2 - 3}{\pi^2}\right); \quad \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{L^2}$$

$$\Delta\hat{x} = \sqrt{<\hat{x}^2> - <\hat{x}>^2} = \sqrt{\frac{L^2}{6n^2}\left(\frac{2n^2\pi^2 - 3}{\pi^2}\right) - \frac{L^2}{4}}$$

$$\Delta\hat{p} = \sqrt{<\hat{p}^2> - <\hat{p}>^2} = \sqrt{\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{L^2}}$$

$$\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\pi^2 n^2 - 2}{3}} = .57\hbar \rangle \frac{\hbar}{2}$$

الباب الثالث

معادلة شرودنجر الموجية وتطبيقاتها

The Schrödinger's Wave Equation and its Applications

الباب الثالث

معادلة شرودنجر الموجية وتطبيقاتها

من خلال دراستنا السابقة، للبابين الأول والثاني، عَلمنا أن قوانين نيوتن وصفت مسار وحركة الجسم التقليدي، ومعادلات ماكسويل وصفت حركة الموجات التقليدية الكهرومغناطيسية. والآن نحن نحتاج إلى وصفة رياضية تأخذ في الاعتبار الصفة الازدواجية للمادة، هذه الوصفة الرياضية يجب أن تأخذ في الاعتبار وصف الدالة الموجية ψ كما عرفناها بالسابق.

في هذا الباب سنتناول الوصفة الرياضية التي قدمها شرودنجر (١٩٢٦) وسميت بالميكانيكا الموجية أو ميكانيكا الكم مع تطبيقاتها البسيطة. وثمّةَ وصفة أخرى سميت بطريقة المصفوفات الميكانيكية وبدأها العالمان هيزنبرج وبورن في نفس العام، وسوف نتناولها في باب آخر. وبالطبع فنحن هنا سوف نتعامل مع النظام المجهري فقط. وتبعاً للنظام الفيزيائي المجهري يوجد هناك كميات (قيم) فيزيائية هي القيم التي يمكن قياسها أو حسابها مثل طاقة الحركة T، طاقة الوضع V أو الطاقة الكلية E... إلخ.

1- معادلة شرودنجر في بعد واحد

علمنا من الفرضية الثانية لميكانيكا الكم أن لكل كمية فيزيائية يمكن قياسها، كطاقة الحركة T والطاقة الكلية E، يكون هناك مؤثر، وحتى الآن لم نعرف كيفية حساب هذا المؤثر، ولحساب المؤثرات نتبع الخطوات التالية (للسهولة سنأخذ الحركة في اتجاه واحد فقط وهو اتجاه x):

أ- نبدأ بمعادلة الموجة المستوية المصاحبة للجسيم الحر على الصورة:

$$\psi = e^{i(kx-\omega t)} = e^{i(p_x x-Et)/\hbar} = e^{ip_x x/\hbar} e^{-iEt/\hbar} = f(x)f(t) \qquad (١)$$

حيث طاقة الجسيم هي $E=\hbar\omega$ و $p_x=\hbar k$ هي كمية حركته الخطية.

ب- للحصول على المؤثر $\hat{E}$ ، نفاضل المعادلة (١) بالنسبة للزمن، فنحصل على:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\psi \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \qquad (٢)$$

وهي معادلة مميزة على الصورة $\hat{E}\psi = E\psi$ ولذلك فإن:

$$\boxed{\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \tag{٣}$$

ج- للحصول على المؤثر $\hat{p}_x$ ، فإننا نفاضل المعادلة (١) بالنسبة إلى x لنجد:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar}p_x\, e^{i(p_x x - Et)/\hbar}\\ &= \frac{i}{\hbar}p_x\psi \\ \Rightarrow \qquad & \boxed{\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi}\end{aligned} \tag{٤}$$

حيث حصلنا على معادلة مميزة على الصورة $\hat{p}_x\psi = p_x\psi$ ، وتعطينا المؤثر

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$$

ومنها نجد $\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x\hat{p}_x = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

د- نقارن الآن بين ميكانيكا الكم والميكانيكا التقليدية، حيث إن:

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{٥}$$

وتصبح معادلة شرودنجر في الشكل العام هي $\hat{H}\psi = \hat{E}\psi$ حيث $\hat{H}$ يدعى هاميلتونيان (مؤثر هاميلتوني)

$$\boxed{\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}\right)}, \qquad \boxed{\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \tag{٦}$$

٢- معادلة شرودنجر المستقرة (غير الزمنية)

بدءاً بمعادلة شرودنجر التفاضلية:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}\right)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \tag{١}$$

نجد أنها تعتمد على الزمن، ونحن في دراستنا هذه نبحث عن دوال وقيم مميزة مستقرة (أي أنهن لا يعتمدن على الزمن). لهذا سوف نحاول فصل معادلات الزمن عن معادلات المكان باستخدام إحدى الطرق، وهي طريقة فصل المتغيرات، والطريقة كالتالي:

أ- نفترض إمكانية فصل الدالة $\Psi(x,t)$ إلى:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\psi(t) \tag{٢}$$

حيث $\psi(t)$ هي دالة تعتمد على الزمن و $\psi(x)$ هي دالة تعتمد على المكان.

ب- فاضل الدالة (٢) مرة بالنسبة للزمن، ومرتين بالنسبة للمكان، فنحصل على:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\psi(x)\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} \tag{3a}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=\psi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \tag{3b}$$

ج- بالتعويض من المعادلتين (a٣) و(b٣) في المعادلة (١) والقسمة على $\psi(x)\,\psi(t)$ نجد:

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\hat{V}\psi(x)\right\}=\frac{1}{\psi(t)}\left\{i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\right\} \tag{٤}$$

د- في المعادلة (٤) نجد أن الطرف الأيسر يعتمد على المتغير "x" فقط، بينما الطرف الأيمن يعتمد على المتغير "t" فقط. من نظريات المعادلات التفاضلية تعلمنا أن ذلك ممكن فقط في حالة كون كل طرف يساوى كمية ثابتة، سوف نفترضها "c"، ولهذا

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}=c\psi(t) \tag{5a}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\hat{V}\psi(x)=c\psi(x) \tag{5b}$$

ه- تكامل المعادلة (5a) يعطي الدالة الزمنية

$$\psi(t)=e^{-ict/\hbar} \tag{٦}$$

بافتراض أن ثابت التكامل هو الوحدة وذلك للسهولة.

و- لحساب الثابت C نقارن المعادلتين (٦) و(٥) فنجد أن الثابت C ما هو إلا الطاقة الكلية E للجسيم ونحن نعلم أنها كمية محفوظة (ثابتة).

ز- أخيراً نحصل على معادلة شرودنجر التي لا تعتمد على الزمن، وهي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$
$$\Rightarrow\quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]\psi(x)=0 \qquad (٧)$$

المعادلة (٧) تمثل حركة جسيم، يتحرك بطاقة كلية E وطاقة وضع (طاقة كامنة) V، ولا تعتمد على الزمن، ولذلك يقال عنها: إنها تمثل حالة مستقرة.

٣- كثافة التيار الاحتمالية

في هذا الجزء سوف نقوم بتعريف كثافة التيار الاحتمالية، والكثافة الاحتمالية، وحفظها لما لهما من أهمية في دراسة احتمالية تواجد الجسيمات في المناطق الممنوعة من وجهة النظر التقليدية.

تم سابقاً (الباب الأول الفصل ٨) تعريف المقدار:

$$\rho d\tau=|\psi(r,t)|^2\, d\tau$$

بأنه كثافة الاحتمال وهو يمثل احتمال تواجد الجسيم في عنصر الحجم $d\tau$، حيث الدالة المعيرة $\psi(r,t)$ ترافق الجسيم المتحرك في عنصر الحجم.

دعونا نسأل أنفسنا! إذا تغير الزمن، ماذا يحدث للقيمة ρ لو تغيرت بالنقصان في مكان ما؟ للإجابة عن هذا السؤال يجب أن نحدد أولاً: أن مجموع الاحتمالات في الحجم المعرف له القيمة ١، بمعنى أن:

$$\int_V \rho d\tau=\int_V |\psi(r,t)|^2\, d\tau=1 \quad\Rightarrow\quad \frac{d}{dt}\int_V \rho d\tau=0$$

من ثم فإن أي تغير بالنقصان في منطقة بالحجم المعرف سوف يتبعها زيادة في منطقة أخرى بنفس الحجم. هذا التغير (أو الانتقال أو التدفق) في كثافة الاحتمال، من منطقة إلى أخرى، يمكن النظر على أنها "تيار للكثافة الاحتمالية". لذلك سوف نشتق صيغة أساسية لقانون حفظ الكثافة الاحتمالية. مع ملاحظة أن هذا الاشتقاق مبني على فرضية عدم وجود خلق أو إفناء للجسيمات، ومن ثم هذا لا يتحقق في التفاعلات النسبية ذات السرعات العالية، التي تصل قريباً من سرعة الضوء.

نبدأ بمعادلة شرودنجر للدالة الموجية ψ والمرافق المركب لها ψ^* واللتان تكتبان بالصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (١)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* = -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad (٢)$$

بضرب المعادلة (١) من اليسار بالدالة ψ^*، والمعادلة (٢) من اليسار بالدالة ψ، ثم بالطرح ينتج:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \qquad (٣)$$

إذا أخذنا في الاعتبار المعادلتين التاليتين:

$$\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = \nabla.\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right) \qquad (٤)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad (٥)$$

واعتمدنا الرمزين التاليين:

كثافة التيار:

$$\boxed{\boldsymbol{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)} \text{ ،}$$

والكثافة الاحتمالية:

$$\boxed{\rho = \psi^*\psi} \text{ ،}$$

فإن المعادلة (٣) تأخذ الصورة

$$\nabla \cdot \boldsymbol{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \qquad (٦)$$

وهي تشبه معادلة الاستمرارية (الاتصال) في ديناميكا الموائع، والتي تعبر هنا عن قانون حفظ الجسيمات.

مثال: احسب كثافة التيار للدالة $\psi(x) = A\, e^{ikx}$ حيث A ثابت.

الحل:

$$\boldsymbol{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right) = \frac{\hbar}{m} I_m \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi\right)$$
$$= \frac{\hbar}{m} I_m \left(A^* e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} A e^{ikx}\right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = v\, |A|^2 = \rho v$$

واجب منزلي: للدالة $\psi(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$ حيث A, B ثوابت، اثبت أن كثافة التيار هي $\boldsymbol{J} = v\left(|A|^2 - |B|^2\right)$.

٤- تطبيقات معادلة شرودنجر في بعد واحد

i-دراسة حركة جسيم حر (بمعنى أن $V = 0$)

معادلة شرودنجر لجسيم حر، في بعد واحد، تكتب على الصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\, \psi(x)$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi,$$

وحلها هو $\psi(x) = A\, e^{\pm ikx/\hbar}$ حيث إن A هو ثابت التكامل و $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

نلاحظ هنا أن k تأخذ قيماً حقيقية، حيث إنها مرتبطة بطاقة الحركة فقط.

وكمثال توضيحي دعونا نسترجع المسألة الرئيسة في ميكانيكا الكم، ألا وهي دراسة حركة جسيم داخل صندوق مغلق تماماً.

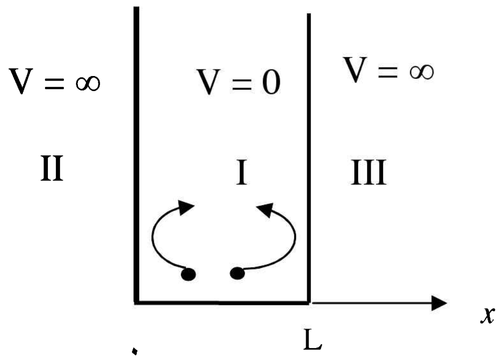
---

ii- دراسة حركة جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

في هذا المثال سوف ندرس حركة جسيم في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{1}$$

وهذا المثال ينطبق عملياً على حركة إلكترون حر بداخل قطعة معدنية، لها طاقة توتر سطحي يفوق الطاقة الحركية للإلكترون، ومن ثم فإن الإلكترون يتحرك داخل المعدن، ولا يتمكن من الهروب منه، إلا بإعطائه طاقة خارجية. ولحل هذه المسألة نلاحظ من شكل ١ أن حركة الجسيم حرة، ولكنها مقيدة في المدى $0 \le x \le L$ حيث إن الجهد $V = \infty$ خارج هذا المدى هو المسؤول عن انعكاس الجسيم من حائل الجهد.



شكل(١) جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

والطريقة المثلى لحل هذه النوعية من المسائل هو اتباع التالي:

أولاً: كتابة معادلة شرودنجر في المنطقة التي يمكن أن يتواجد فيها الجسيم.

من الشكل (٦) نجد أن الجسيم يتواجد في المنطقة (I) فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر تأخذ الصورة:

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= E\psi_I \\ \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= -k^2\psi_I, \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و m هو كتلة الجسيم و E هي الطاقة الكلية. المنطقتان $(II),(III)$ غير مسموح للجسيم بالانتقال أو بالتواجد فيهما نتيجة الجهد $V = \infty$ من ثم فإن دالة الموجة تتلاشى عند $x = 0$ و $x = L$ ، بمعنى أن:

$$\psi_{II}(x = 0) = \psi_{III}(x = L) = 0.$$

ثانياً: نقترح حلاً للمعادلة (المعادلات) المعطاة في الفقرة الأولى. نلاحظ هنا أن المعادلة(٢) تمثل معادلة حركة توافقية بسيطة وحلها يمكن وضعه بأي من الصور الثلاث التالية:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \qquad (3)$$

$$\psi_I(x) = a\,e^{ikx} + b\,e^{-ikx} \qquad (4.a)$$

$$\psi_I(x) = A'\sin(kx + \gamma) \qquad (4.a)$$

حيث $i = \sqrt{-1}$ و a, b, A, A', B, γ ثوابت تعين بواسطة الشروط الحدودية أو الشروط العيارية.

ثالثاً: اختر أحد الحلول، وليكن الحل المعرف بالمعادلة (٣).

رابعاً: استخدم الشروط الحدودية للتخلص من الثوابت غير المنطقية. مثلاً الشرط:

$$\psi_I(0) = 0 \qquad (5)$$

يتيح لنا التخلص من الثابت B وتؤول المعادلة (٣) إلى الدالة المميزة:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) \qquad (6)$$

خامساً: نبدأ في حساب الثوابت A, k

أ- لحساب الثابت k استخدم الشرط الحدي $\psi_I(x = L) = 0$ ، بمعنى:

$$\left.\begin{aligned} \because \quad \psi_I(x = L) &= 0 \\ \therefore \quad A\sin(kL) &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (7)$$

حيث n يعرف بأنه عدد كمي.

ب- لحساب الثابت A استخدم شرط المعايرة كالتالي:

$$\left.\begin{array}{l} \because \quad \int_0^L |\psi_I|^2 dx = 1 \\ \therefore A^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2(k_n x)dx}_{\frac{L}{2}} = 1 \end{array}\right\} \Rightarrow A = \sqrt{2/L} \qquad (8)$$

وتصبح الدالة المميزة على الصورة:

$$\psi_I(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x), \qquad n = 1,2,3,\cdots \qquad (٩)$$

ملاحظات:

أ- بمعلومية k_n نستطيع أن نحسب الطاقة الكلية E_n وهي:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = n^2\underbrace{\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)}_{E_1} = n^2 E_1, \qquad n = 1,2,3,\cdots \qquad (١٠)$$

وهي قيم مكماة (غير متصلة). وتعد القيمة $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ هي طاقة المستوى الأرضي للجسيم.

ب- القيمة $n = 0$ أهملت؛ لأنها تعطي حلاً صفرياً للطاقة، ومعناه أن الجسيم لا يتحرك. وأيضاً تعطي حلاً صفرياً للدالة ومربعها، أي: $|\psi_I(0 < x < L)|^2 = 0$، وهو حل غير فيزيائي، لأننا نعرف أن الجسيم موجود ولهُ طاقة حركة.

ج- القيم السالبة لـ n تعطي نمطاً مماثلاً للقيم الموجبة المقابلة.

د- قيم الطاقة تتناسب مع n^2.

هـ- المسافة بين مستويات الطاقة "ΔE" تزداد مع زيادة n تبعاً للعلاقة:

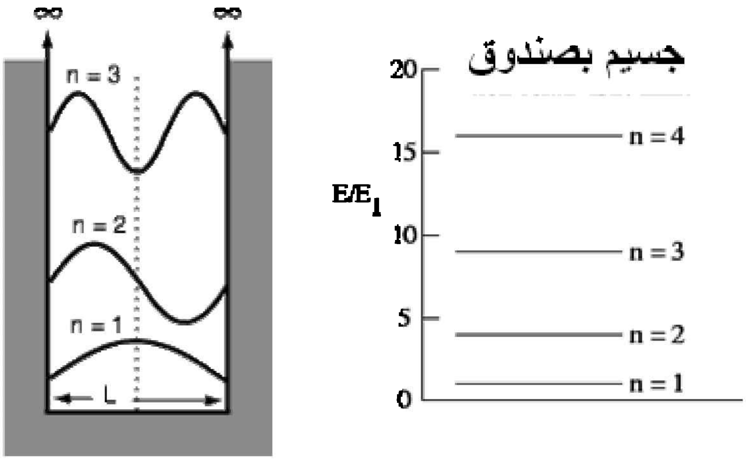
$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (n+1)^2 E_1 - n^2 E_1 = (2n+1)E_1$$

(انظر الشكل ٢ a)

و- عند حساب متوسط الإزاحة $< x >$ نجد أن:

$$\langle x \rangle = \int_0^L x\, |\psi_I|^2 dx = \frac{2}{L}\int_0^L x \sin^2(k_n x)dx = \frac{2}{L}\left(\frac{L^2}{4}\right) = \frac{L}{2} \qquad (١١)$$

ويفسر هذا فيزيائياً: بأن كثافة الاحتمال (وأيضاً الدالة) متماثلتان حول مركز الصندوق، أي : عند $\frac{L}{2}$. لهذا فإن احتمالية وجود الجسيم في النصف الأيمن من الصندوق يكون مساوياً لاحتمالية وجوده في النصف الأيسر. (انظر الشكل b٢)



(b) (a)

شكل (٢) لجهد الشكل (١) a-الطاقات المسموح بها b- الدوال المسموح بها

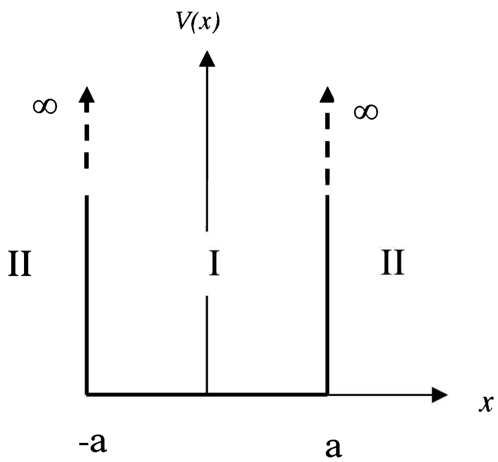
خ. متوسط كمية الحركة الخطية $\langle \hat{p} \rangle$ تحسب كالتالي:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \psi_I^* \hat{p}\, \psi_I\, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(k_n x)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\sin(k_n x)\right)dx = 0 \qquad (١٢)$$

وتفسر المعادلة (١٢) فيزيائياً: بأن انعدام متوسط كمية الحركة الخطية، لا تعني أن الجسيم لا يتحرك، ولكن تعني أن احتمالية تحرك الجسيم للشمال يكون مساوياً لاحتمالية تحركه لليمين؛ وذلك لأن كمية الحركة الخطية هي كمية متجهة وليست قياسية.

مثال: ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل؛ كما بالشكل ويوصف كالآتي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| > a \end{cases}$$



الحل:

نتيجة لقيم الجهد اللانهائية خارج المنطقة (I) ، لذلك ينعدم تواجد الجسيم بالمنطقتين (II) ، (III). بالمنطقة (I) نجد أن معادلة شرودنجر غير الزمنية تأخذ الشكل:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2}=E\psi_I \qquad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2}=-k^2\psi_I\,, \tag{١}$$

حيث $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$. الحل العام للمعادلة (١) هو:

$$\psi_I(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx) \tag{٢}$$

حيث A و B ثوابت تعين من خلال الشروط الفيزيائية. من شروط انعدام الدالة عند الحدود (a) و $(-a)$ نجد أن:

$$\psi_I(a)=0 \quad\Rightarrow\quad A\cos(ka)+B\sin(ka)=0, \tag{٣}$$

$$\psi_I(-a)=0 \quad\Rightarrow\quad A\cos(ka)-B\sin(ka)=0 \tag{٤}$$

بجمع المعادلتين (٣) و (٤) ينتج أن:

$$2A\cos(ka)=0 \qquad \Rightarrow\quad A=0 \ \text{ or } \ \cos(ka)=0 \tag{٥}$$

بطرح المعادلتين (٣) و (٤) ينتج أن:

$$2B\sin(ka)=0 \qquad \Rightarrow\quad B=0 \ \text{ or } \ \sin(ka)=0 \tag{٦}$$

ونحن هنا لا نبغي أن نساوي الثوابت A و B بالصفر، حيث إننا سنحصل على دالة $\psi_I(x)$ لا فائدة لها فيزيائياً. وأيضاً لا نود وضع الدوال $\sin(ka)$ و $\cos(ka)$ مساوية للصفر لبعض قيم k و E. وعليه يكون عندنا حلان وهما:

$$A=0 \quad B\neq 0 \quad\Rightarrow\quad \sin(ka)=0, \tag{i}$$

$$B=0 \quad A\neq 0 \quad\Rightarrow\quad \cos(ka)=0 \tag{ii}$$

في الحل الأول نجد أن:

$$\sin(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\pi, 2\pi, 3\pi, \cdots = n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح زوجي.

في الحل الثاني نجد أن:

$$\cos(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\frac{\pi}{2}, 3\frac{\pi}{2}, 5\frac{\pi}{2}, \cdots = n\frac{\pi}{2},$$

حيث n عدد صحيح فردي.

ومنه نصل إلى الخلاصة الآتية، وهي:

$$\psi_I(x)=\begin{cases} A\sin(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is even} \\ \\ B\cos(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is odd} \end{cases}$$

$$k_n^2=\frac{2mE_n}{\hbar^2}, \qquad \Rightarrow \qquad E_n=\frac{k_n^2\hbar^2}{2m}=n^2\underbrace{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}_{E_1}=n^2E_1$$

$$A=B=\sqrt{\frac{1}{a}}$$

---

iii- الجهد الدرجي (جهد العتبة)

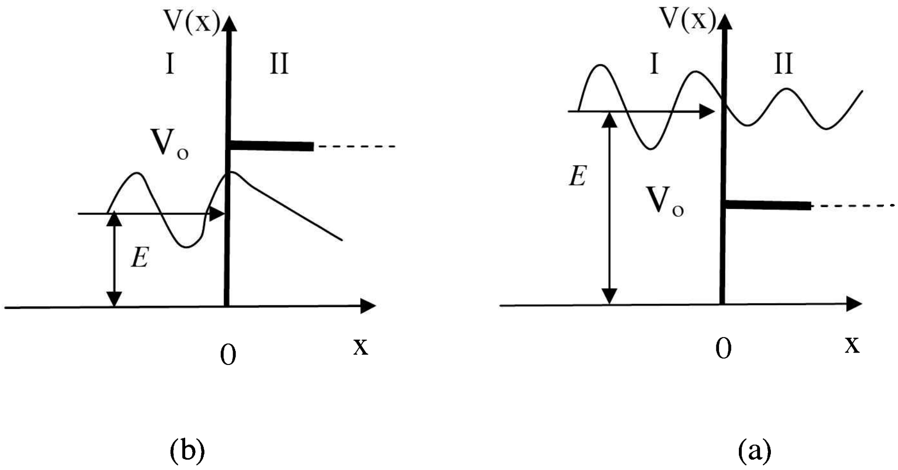
نحن هنا بصدد دراسة حزمة متجانسة من الجسيمات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases} 0, & x<0 \\ V_o, & x\geq 0 \end{cases}$$

في حالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل ٣). ومنها علينا أن نجد معادلات التيار: الساقط، والمنعكس، والنافذ، ومعامل الانعكاس، ومعامل النفاذية.

دعونا نسأل: ما هي وجهة النظر الكلاسيكية لهذا الجهد؟ قبل أن نبدأ في حل المسألة من وجهة نظر ميكانيكا الكم، دعونا نستعرض مثالاً بسيطاً من الحياة، لنتصور الحل الكلاسيكي. نحن في شبابنا وصحتنا لا نُعير اهتماماً لارتفاع درجات

السلالم، التي سنرمز لها بالرمز V_o، لأن طاقاتنا، التي سنرمز لها بالرمز E، أعلى بكثير مما هو عليه درجات السلم، بمعنى أن $E > V_o$. لكن عند الكبر، مرحلة الوهن، نفكر كثيراً في ارتفاع درجات السلالم، وغالباً ما نتراجع، وذلك لأن طاقاتنا أصبحت أقل بكثير من ارتفاع درجات السلالم، بمعنى أن $E < V_o$. الآن النظرة سوف تختلف تماماً من وجهة نظر ميكانيكا الكم، وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.



شكل (٣) (a) الحالة الأولى $E > V_o$ (b) الحالة الثانية $E < V_o$

الحالة الأولى $E > V_o$ مرحلة الشباب

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم $x = 0$ تعرف:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (١)$$

والحل العام لها هو:

$$\psi_I(x) = A \underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}} + B \underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (٢)$$

الدالة e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى دالة ساقطة (Incident wave)، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وتسمى دالة منعكسة (Reflected wave). A هي سعة الموجة الساقطة، و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من الحائل (x = 0) تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+V_o\psi_{II}=E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}=-\alpha^2\psi_{II},\quad \alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o) \qquad (٣)$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x)=C\ e^{i\alpha x}+D\ e^{-i\alpha x} \qquad (٤)$$

$e^{i\alpha x}$ هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave). وحيث إنه لا يوجد حائط جهد في المنطقة اليمنى، لكي ترتد منه الأشعة، فلهذا نضع $D=0$. والآن عند الحد x = 0 نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because\ \psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)$$
$$\therefore\quad A+B=C \qquad (٥)$$

ولمشتقتها الأولى:

$$\because\ \psi'_I(x=0)=\psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore\ ik(A-B)=i\alpha C \qquad (٦)$$

حل المعادلتين (٥) و(٦) يعطي:

$$B=\left(\frac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)A,\qquad C=\left(\frac{2k}{k+\alpha}\right)A \qquad (٧)$$

بالإمكان تعريف:

كثافة التيار الساقط = $\frac{\hbar k}{m}|A|^2=\mathrm{v}_1|A|^2$ ،

وكثافة التيار المنعكس = $\frac{\hbar k}{m}|B|^2=\mathrm{v}_1|B|^2$ ،

وكثافة التيار النافذ = $\frac{\hbar\alpha}{m}|C|^2=\mathrm{v}_2|C|^2$

حيث $\mathrm{v}_1=\hbar k/m$ و $\mathrm{v}_2=\hbar\alpha/m$. ومن ثم فإن:

معامل الانعكاس (R) =	$\dfrac{\text{كثافة التيار المنعكس}}{\text{كثافة التيار الساقط}}$	$= \left(\dfrac{k-\alpha}{k+\alpha}\right)^2$

معامل النفاذية (T) =	$\dfrac{\text{كثافة التيار النافذ}}{\text{كثافة التيار الساقط}}$	$= \dfrac{4k\alpha}{(k+\alpha)^2}$

أ- من العلاقتين السابقتين نجد أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.

ب- الفيزياء التقليدية تمنع أي انعكاس عندما $E > V_o$ وهذا غير منطبق في قوانين ميكانيكا الكم، وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات.

الحالة الثانية $E < V_o$ مرحلة الوهن

معادلة شرودنجر في المنطقة اليسرى من المستقيم $x = 0$ لن تتغير، ومن ثم سوف نستخدم المعادلتين (١) و(٢). معادلة شرودنجر في المنطقة اليمنى من المستقيم $x = 0$ هي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \beta^2\psi_{II}, \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E) \qquad (٨)$$

وحلها العام هو:

$$\psi_{II}(x) = C\, e^{-\beta x} + D\, e^{\beta x} \qquad (٩)$$

الدالة $e^{\beta x}$ هي دالة موجية تزايدية في المدى $\{0,\infty\}$ بمعنى أن $\lim_{x\to\infty} e^{\beta x} = \infty$ ومن ثم لا تحقق شروط ميكانيكا الكم، لهذا نضع $D = 0$. الآن عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدالة:

$$\because \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$$
$$\therefore A + B = C \qquad (١٠)$$

ولمشتقتها:

$$\because \psi'_I(x=0)=\psi'_{II}(x=0)$$
$$\therefore k(A-B)=-\beta C \qquad (11)$$

بحل المعادلتين (١٠) و(١١) نحصل على:

$$B=\left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A,$$
$$C=\left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A \qquad (12)$$

مثال: استخدم التحويلات القطبية التالية:

$$k=r\cos\delta, \qquad \beta=r\sin\delta,$$
$$r=\sqrt{k^2+\beta^2}, \qquad \delta=\tan^{-1}\left(\frac{\beta}{k}\right)=\sqrt{\frac{V_o-E}{E}} \qquad (13)$$

لتبسيط المعادلة (١٢)

الحل: الثابت B يبسط كالتالي:

$$B=\left(\frac{ik+\beta}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right)A=\left(\frac{\cos\delta-i\sin\delta}{\cos\delta+i\sin\delta}\right)A$$
$$=\frac{re^{-i\delta}}{re^{i\delta}}A \qquad (14)$$
$$=e^{-2i\delta}A$$

الثابت C يبسط كالتالي:

$$C=\left(\frac{2ik}{ik-\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}\right)A=\left(\frac{2k}{k+i\beta}-1+1\right)A$$
$$=\left(\frac{k-i\beta}{k+i\beta}+1\right)A \qquad (15)$$
$$=\left(e^{-2i\delta}+1\right)A$$

ولنا هنا بعض الملاحظات:

أ- الشعاع الساقط والمنعكس لهما نفس الشدة، بمعنى أن:

$$|B|^2 = B^*B = \left(\frac{k - i\beta}{k + i\beta}\right) \times \left(\frac{k + i\beta}{k - i\beta}\right) |A|^2$$
$$= |A|^2$$

وهذا يعني أن جميع الجسيمات الساقطة بطاقة $E < V_o$ سوف تنعكس كلياً عندما تصل إلى الحائل، ويتساوى معامل الانعكاس بالوحدة (بمعنى أن $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$). ومن ثم سوف ينعدم معامل النفاذية، أي أن "$T = 0$".

ب- باستخدام المعادلات (١٣-١٥) يمكننا وضع الدوال الموجية بالصورة:

$$\psi_I(x) = 2Ae^{-i\delta}\cos(kx + \delta), \qquad (١٦)$$

$$\psi_{II}(x) = \left(2A\cos\delta\, e^{-i\delta}\right)e^{-\beta x} \qquad (١٧)$$

المعادلة (١٦) هي معادلة موجات موقوفة.

ج- كلاسيكياً تعد المنطقة (II) منطقة محظورة على الجسيمات، وذلك لأن طاقة الحركة ($T = E - V_o$) سوف تصبح كمية سالبة نظراً لأن $E < V_o$.

د- من المعادلة (١٧) نستنتج أن:

- كثافة التيار في المنطقة (II) منعدمة؛ لأن الدالة حقيقية.
- احتمالية وجود الجسيمات في المنطقة (II) تُعطَى بالمعادلة:

$$P_{II}(x) = |\psi_{II}|^2 = \left(2A\cos\delta\right)^2 e^{-2\beta x} \qquad (١٨)$$

وهذه تعطي قيماً مقبولة عند $x = 0$ وتقل تدريجياً (أسياً) مع زيادة المسافة. انظر: الشكل (٣)b.

ه- تنعدم الدالة $\psi_{II}(x)$ تماماً عندما $V_o \to \infty$، وتأخذ الدالة $\psi_I(x)$ بالشكل:

$$\psi_I(x) = A\sin kx$$

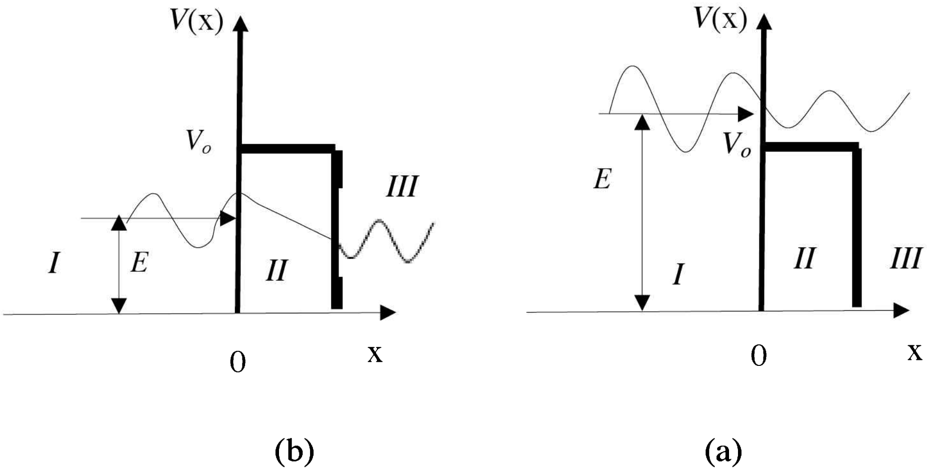
إذ يجب أن تنعدم عندما $x = 0$.

و- يمكن استنتاج المعادلة (١٢) مباشرةً؛ وذلك بتغيير $i\alpha \to -\beta$ في المعادلة (٧).

iv-حاجز الجهد المستطيل

دراسة حزمة متجانسة من الجسيمات تتحرك في اتجاه حاجز جهد على الصورة:

$$V(x)=\begin{cases} V_o, & 0<x<a \\ 0, & a\le x\le 0 \end{cases}$$



شكل (٤) (a) الحالة الأولى $E>V_o$ (b) الحالة الثانية $E<V_o$

في كلتا الحالتين وهما أن تكون طاقة الجسيم الكلية E أكبر من V_o أو أصغر من V_o حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد (انظر الشكل ٤). ومنها سوف نستنتج معادلات التيار: الساقط، والمنعكس، والنافذ، ومعامل الانعكاس، ومعامل النفاذية.

الحالة الأولى $E<V_o$

معادلة شرودنجر اللازمنية في المنطقة (I) ، $-\infty\le x\le 0$ ، تعطي كالآتي:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}=-k^2\psi_I, \qquad (١)$$

حيث $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$. والحل العام للمعادلة (١) هو:

$$\psi_I(x)=A\underbrace{e^{ikx}}_{\text{Incident wave}}+B\underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}} \qquad (٢)$$

e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى دالة ساقطة، e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وتسمى دالة منعكسة. A هي سعة الموجة الساقطة و B هي سعة الموجة المنعكسة من حائط الجهد.

معادلة شرودنجر غير الزمنية في منطقة حاجز الجهد (II) ، $0 \le x \le a$ ، تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \alpha^2\psi_{II} \qquad (٣)$$

حيث $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E)$. والحل العام للمعادلة (٣) هو:

$$\psi_{II}(x) = C\ e^{\alpha x} + D\ e^{-\alpha x} \qquad (٤)$$

$e^{\alpha x}$ هي دالة أسية تزايدية، تمثل اضطراباً منعكساً غير متذبذب يتحرك خلال الحائل في الاتجاه السالب للمتغير x . $e^{-\alpha x}$ يعبر دالة أُسية تناقصية، تمثل اضطراباً غير متردد يتحرك خلال الحائل مع زيادة المتغير x. ونظراً لقيم x المحددة بين 0 و a فإنه لن يتم إهمال أي من الحدود.

معادلة شرودنجر غير الزمنية في المنطقة (III) ، $a \le x \le \infty$ ، تعطي كالآتي:

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = -k^2\psi_{III}, \qquad (٥)$$

وحل المعادلة (٥) العام هو:

$$\psi_{III}(x) = G \underbrace{e^{ikx}}_{\text{Transmitted wave}} + K \cancel{\underbrace{e^{-ikx}}_{\text{Reflected wave}}} \qquad (٦)$$

e^{ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه الموجب للمحور السيني، وتسمى موجة نافذة (Transmitted wave). e^{-ikx} هي دالة موجية مستوية تتحرك في الاتجاه السالب للمحور السيني، وتسمى دالة مرتدة. G هي سعة الموجة الساقطة و H هي سعة الموجة المرتدة من ∞ . وبما إنه لا توجد موجة مرتدة من ∞ فإننا نستطيع وضع $K = 0$.

وعليه فإن الحلول المقبولة هي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= C\, e^{\alpha x} + D\, e^{-\alpha x} \\ \psi_{III}(x) &= G\, e^{ikx} \end{aligned} \qquad (٤)$$

الآن: عند الحد $x = 0$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدوال:

$$\begin{aligned} &\because \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \\ &\therefore \quad A + B = C + D \end{aligned} \qquad (٥)$$

ولمشتقاتها:

$$\begin{aligned} &\because \psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0) \\ &\therefore \quad ik(A-B) = \alpha C - \alpha D \end{aligned} \qquad (٦)$$

عند الحد $x = a$ نستطيع أن نطبق الشروط الحدودية للدوال:

$$\begin{aligned} &\because \psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a) \\ &\therefore \quad Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a} = Ge^{ika} \end{aligned} \qquad (٧)$$

ولمشتقاتها:

$$\begin{aligned} &\because \quad \psi'_{II}(x=a) = \psi'_{III}(x=a) \\ &\therefore \quad \alpha Ce^{\alpha a} - \alpha De^{-\alpha a} = ikGe^{ika} \end{aligned} \qquad (٨)$$

حصلنا هنا على أربع معادلات، ولكن لخمسة مجاهيل. ومن خلال حل المعادلات (٥ ، ٦، ٧، ٨) لكل من A و B بدلالة G نحصل على:

$$\begin{aligned} A &= \left[\cosh(\alpha a) + \frac{i}{2}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)\sinh(\alpha a)\right] Ge^{ika} \\ B &= -\frac{i}{2}\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)\sinh(\alpha a) Ge^{ika} \end{aligned} \qquad (٩)$$

من تعريف كثافة التيار الساقط = $v_1 |A|^2$ ، وكثافة التيار المنعكس = $v_1 |B|^2$ ، وكثافة التيار النافذ = $v_2 |G|^2$ حيث $v_i = \hbar k_i / m$ ، نجد أن معامل الانعكاس (R) يأخذ الصورة:

$$R = \frac{BB^*}{AA^*} = \left(\frac{B}{A}\right)\left(\frac{B^*}{A^*}\right) = \frac{\frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k}+\frac{k}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)}{\cosh^2(\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k}-\frac{k}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)}$$

$$= \frac{\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)}{1+\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)} = \left[1+\frac{4E(V_o - E)}{V_o^2 \sinh^2(\alpha a)}\right]^{-1} \qquad (١٠)$$

وذلك باستخدام قيم α و k.

ومعامل النفاذية (T) يأخذ الشكل التالي:

$$T = \frac{GG^*}{AA^*} = \left(\frac{G}{A}\right)\left(\frac{G^*}{A^*}\right) = \left(1+\frac{V_o^2}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)\right)^{-1} \qquad (١١)$$

ونقف هنا لسرد بعض التعليقات، وهي:

أ- من العلاقتين (١٠) و (١١) وجدنا أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات.

ب- للمقارنة بالنظرية التقليدية نضع $\hbar = 0$ لنجد أن α و k تؤولان إلى ∞. ومنهما يؤول $R \to 1$ و $T \to 0$، كما هو متوقع من تصرف الجسيمات التقليدية.

ج- من معامل النفاذية نجد أن $T = 0$ عندما $E = 0$. ومع ازدياد طاقة الحركة الابتدائية للجسيم بحيث إن $0 < E < V_o$ نجد أن T تصبح لها قيمة أقل من الواحد الصحيح. هذا يعني أن الجسيمات قد تمر خلال حائل الجهد V_o حتى وإن كانت طاقة الحركة الابتدائية للجسيم أقل من V_o. وهذا غير محتمل في قوانين الميكانيكا التقليدية، وذلك ناتج من الخواص الموجية للجسيمات. وهذه هي ظاهرة التأثير النفقي (Tunneling effect). وللعلم يوجد ظواهر فيزيائية كثيرة لا تفسر إلا بظاهرة التأثير النفقي منها:

⇐ انبعاث الإلكترونات من سطح المعادن الباردة نتيجة تأثير مجال خارجي.

⇐ الدايود (الثنائي) النفقي (Tunnel diodes) في الدوائر الكهربائية.

⇐ التوصيل الكهربي للمواد العازلة.

⇐ التأثير النفقي في الأنوية ومنها انحلال جسيمات α من المواد المشعة.

⇐ التأثير النفقي في فيزياء الجوامد.

⇐ التأثير النفقي في المواد فائقة التوصيل.

د- إذا زادت الطاقة E ، نجد أن الكمية $(V_o - E)$ تقل، و تقل معها α. ومع ثبوت عرض الجهد a نجد أن $\sinh^2(\alpha a)$ تقل أسرع من $(V_o - E)$. لذلك فإن T تزداد مع زيادة E. إذا زاد عرض الجهد a فإن $\sinh^2(\alpha a)$ تزداد بسرعة ولذلك تقل معها T بسرعة.

مثال: استنتج معادلة تقريبية لمعامل النفاذية، وذلك عند تحقق الشرط $\alpha a >> 1$.

الحل: عند تحقق الشرط $\alpha a >> 1$ نجد أن:

$$e^{-a\alpha} \to 0, \quad \sinh^2(a\alpha) = \left(\frac{e^{a\alpha} - e^{-a\alpha}}{2}\right)^2 \approx \frac{1}{4}e^{2a\alpha} >> 1$$

ومن ثم فإن:

$$\begin{aligned} T &= \left(1 + \frac{V_o^{\,2}}{4E(V_o - E)}\sinh^2(\alpha a)\right)^{-1} \\ &\approx \frac{4E(V_o - E)}{V_o^{\,2}}\sinh^{-2}(\alpha a) \approx \frac{16E(V_o - E)}{V_o^{\,2}}e^{-2\alpha a} \\ &= \underline{\frac{16}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o})e^{-2a\alpha}} \end{aligned}$$

الحالة الثانية $E > V_o$

معادلات شرودنجر في المنطقتين (I) و(III) لن تتغير، ومن ثم سوف نستخدم المعادلتين (٢) و(٦). ومعادلة شرودنجر غير الزمنية في منطقة حاجز الجهد (II)، $0 \le x \le a$، سوف تعرف بالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_o\psi_{II} = E\psi_{II}$$
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\beta^2\psi_{II} \qquad (١٢)$$

حيث $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_o)$. والحل العام للمعادلة (١٢) هو:

$$\psi_{II}(x) = C\, e^{i\beta x} + D\, e^{-i\beta x} \qquad (١٣)$$

لذلك نجد أن مجموعة الحلول المقبولة هي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= C\, e^{i\beta x} + D\, e^{-i\beta x} \\ \psi_{III}(x) &= G\, e^{ikx} \end{aligned} \qquad (١٤)$$

وبتطبيق الشروط الحدودية للدوال ومشتقاتها وهي:

$$\begin{aligned} \psi_I(x = 0) &= \psi_{II}(x = 0) \\ \psi'_I(x = 0) &= \psi'_{II}(x = 0) \\ \psi_{II}(x = a) &= \psi_{III}(x = a) \\ \psi'_{II}(x = a) &= \psi'_{III}(x = a) \end{aligned} \qquad (١٥)$$

ووضع $\alpha = i\beta$ بالمعادلتين (١٠) و (١١) نحصل على:

$$R = \left[1 + \frac{4E(E - V_o)}{V_o^2 \sin^2(\beta a)}\right]^{-1} \qquad (١٦)$$

$$T = \left(1 + \frac{V_o^2}{4E(E - V_o)} \sin^2(\beta a)\right)^{-1} \qquad (١٧)$$

ولنا هنا بعض التعليقات وهي:

أ- من العلاقتين (١٦) و (١٧) نجد أن $T + R = 1$ وهو قانون حفظ الجسيمات. للقيمة $E \rightarrow V_o$ نجد أن $\sin(\beta a) \approx \beta a$ ومنها نحصل على:

$$T = \left(1 + \frac{mV_o a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}$$

ب- مع ازدياد طاقة الجسيم $E\left(E > V_o\right)$ نجد أن معامل النفاذية يتذبذب، كما يتضح من المعادلة (١٧).

ج- من المعادلة (١٧) نجد أن $T = 1$ عندما يتحقق الشرط:

$$\beta a = n\pi, \qquad n = 1,2,3,\cdots$$

ومنه:

$$\sqrt{\frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2}}\, a = n\pi$$

أو:

$$\frac{2\pi}{\lambda} a = n\pi \qquad \Rightarrow \qquad a = n\frac{\lambda}{2}$$

وهذا يعني أن عرض الحائل يتساوى مع أعداد صحيحة من نصف الطول الموجي لدى-برولية داخل الحائل. وبتربيع المعادلات السابقة نحصل على:

$$E = V_o\left[1 + n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8mV_o a}\right]$$

د- من المعادلة (١٧) نجد أيضاً أن T تصل إلى نهاية صغرى عندما يتحقق الشرط:

$$\beta a = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

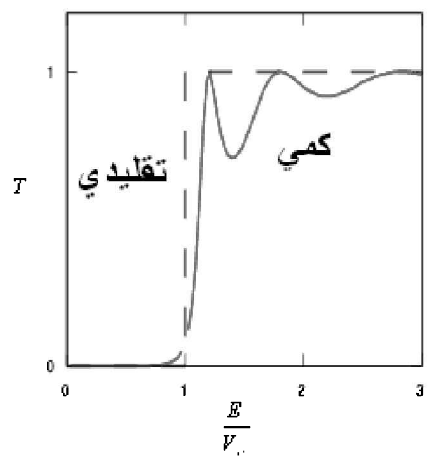
ومنها نحصل على:

$$E = V_o\left[1 + (2n + 1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8mV_o a}\right]$$

وأقل قيمة لمعامل النفاذية:

$$T = T_{\min} = \left(1 + \frac{V_o^{\,2}}{4E(E - V_o)}\right)^{-1}$$

حتى مع وجود الشرط $(E > V_o)$ قد تنعكس الجسيمات من الحائل، وهذه نتيجة من نتائج ميكانيكا الكم.

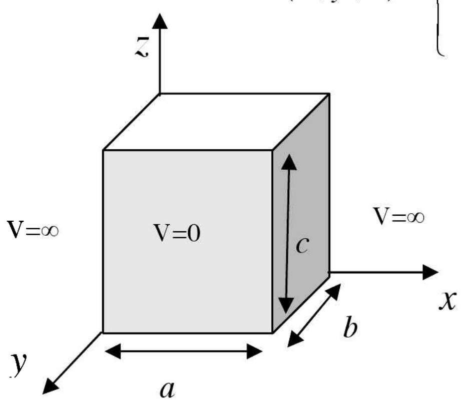


الشكل السابق يوضح تغير معامل النفاذية مع $(\frac{E}{V_o})$ في ميكانيكا الكم، المنحنى المتصل، وفي النظرية التقليدية، المنحنى المتقطع. نلاحظ أن سلوك معامل النفاذية في ميكانيكا الكم يعطي قيماً في المدى $(\frac{E}{V_o} < 1)$.

٥- تطبيق معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد

مثال: ادرس حركة جسيم داخل صندوق مقفل ذي ثلاثة أبعاد في مجال جهد يوصف بالتالي (انظر الشكل ٥):

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 \langle x \langle a,\ 0 \langle y \langle b,\ 0 \langle z \langle c \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$



شكل (٥) جسيم داخل صندوق (ذي ثلاثة أبعاد)

طاقة الوضع (V) خارج الصندوق متناهية في الكبر، وفي داخله مساوية للصفر.

الحل: الجسيم لا يوجد إلا في المنطقة $(a,b,c) \rangle (x,y,z) \rangle (0,0,0)$ فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد في هذه المنطقة تأخذ الصورة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \qquad (١)$$

وبذلك ψ سوف تعتمد على الإحداثيات الثلاث (x, y, z). لحل المعادلة (١) نستخدم طريقة فصل المتغيرات، وهي كالتالي:

أ- نفترض أن

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \qquad (٢)$$

ب- بالتعويض من (٢) في (١) واستخدام $E = E_x + E_y + E_z$ ، والشروط الحدودية

$$\begin{aligned} \psi(0,y,z) &= \psi(a,y,z) \quad \text{for all } y \text{, and } z \\ \psi(x,0,z) &= \psi(x,b,z) \quad \text{for all } x \text{, and } z \\ \psi(x,y,0) &= \psi(x,y,c) \quad \text{for all } x \text{, and } y \end{aligned} \tag{٣}$$

بالإمكان الحصول على المعادلات التالية:

$$\begin{aligned} \frac{d^2X(x)}{dx^2} + k_x^2 X(x) = 0, \quad k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \\ \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + k_y^2 Y(y) = 0, \quad k_y^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2}, \\ \frac{d^2Z(z)}{dz^2} + k_z^2 Z(z) = 0, \quad k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}. \end{aligned} \tag{٤}$$

من ثم فقد تم تحويل المعادلة التفاضلية ذات المتغيرات الثلاث إلى ثلاث معادلات تفاضلية، كل واحدة تعتمد على متغير واحد فقط. ونجد أن كل معادلة من المعادلات (٤) مشابهة لمعادلة جسيم في صندوق ذي بعد واحد، لذلك نحصل عند استخدامنا للشروط الحدودية:

$$\begin{aligned} \psi(0,y,z) &= \psi(a,y,z) = 0 \\ \psi(x,0,z) &= \psi(x,b,z) = 0 \\ \psi(x,y,0) &= \psi(x,y,c) = 0 \end{aligned}$$

على الحلول التالية:

$$\begin{aligned} X(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin k_x x, \quad k_x = \frac{n_x \pi}{a}, \quad n_x = 1,2,\cdots \\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}} \sin k_y y, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{b}, \quad n_y = 1,2,\cdots \\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}} \sin k_z Z \quad k_z = \frac{n_z \pi}{c}, \quad n_z = 1,2,\cdots \end{aligned} \tag{٥}$$

وأيضاً

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x{}^2}{a^2} + \frac{n_y{}^2}{b^2} + \frac{n_z{}^2}{c^2} \right) \tag{٦}$$

والدالة المميزة تصبح:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right), \quad \begin{aligned} n_x &= 1,2,\cdots \\ n_y &= 1,2,\cdots \\ n_z &= 1,2,\cdots \end{aligned} \tag{٧}$$

تعليقات:

أ- من المعادلة (٦) نرى أن قيم الطاقة غير متصلة (أي مكممة)،

ب- الأعداد (n_x, n_y, n_z) هي أعداد الكم في الاتجاهات الثلاثة. وهذه الأعداد مستقلة، أي: لا يعتمد بعضها على البعض الآخر.

ج- شرط المعايرة يتطلب:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dxdydz = \int_0^a |X(x)|^2 dx \int_0^b |Y(y)|^2 dy \int_0^c |Z(z)|^2 dz = 1 \qquad (٨)$$

د- في حالة المكعب $(a = b = c = L)$ فإن:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\underbrace{\left(n_x^{\ 2} + n_y^{\ 2} + n_z^{\ 2}\right)}_{n^2} = n^2 E_1, \qquad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \qquad (٩)$$

هـ- من المعادلة (٩) سنعرف درجة الانتماء (أو التحلل) بأنها عدد الدوال التي لها (تنتمي إلى) نفس الطاقة. هذا الانتماء ناتج من تماثل المكعب، ويزول تماماً بتغير أطوال الصندوق. والجدول التالي يصف درجات الانتماء الخاصة بالمكعب.

ψ_{n_x,n_y,n_z}	n_z	n_y	n_x	n^2	درجة الانتماء
$\psi_{1,1,1}$	١	١	١	٣	١
$\psi_{1,1,2}$	٢	١	١	٦	٣
$\psi_{1,2,1}$	١	٢	١	٦	
$\psi_{2,1,1}$	١	١	٢	٦	
$\psi_{1,2,2}$	٢	٢	١	٩	٣
$\psi_{2,1,2}$	٢	١	٢	٩	
$\psi_{2,2,1}$	١	٢	٢	٩	
$\psi_{1,1,3}$	٣	١	١	١١	٣
$\psi_{1,3,1}$	١	٣	١	١١	
$\psi_{3,1,1}$	١	١	٣	١١	
$\psi_{2,2,2}$	٢	٢	٢	١٢	١

٦- تمارين عامة

١- جسيم يتحرك في بئر جهدي يعطى بالشكل:

$$V(x)=\begin{cases} -V_o, & 0<x<a \\ 0, & a\le x\le 0 \end{cases}$$

حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد. ارسم بئر الجهد، واحسب معامل الانعكاس ومعامل النفاذية. ماهو شرط انعدام معامل الانعكاس؟

٢- جسيم يتحرك في بئر جهدي يعطى بالشكل:

$$V(x)=\begin{cases} V_o, & x\le 0 \\ 0, & 0<x<a \\ \infty, & x\ge a \end{cases}$$

حيث V_o هو ارتفاع حاجز الجهد. عندما $E<V_o$ أ- ارسم بئر الجهد، و احسب معامل الانعكاس ومعامل النفاذية.

٣- احسب الدالة والقيم المميزة لجسيم داخل صندوق مقفل ثنائي الأبعاد في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x,y)=\begin{cases} 0, & 0\langle x\langle a, 0\langle y\langle b \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

٤- لجسيم يتحرك في مجال جهد:

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\,\delta(x); \qquad \alpha=\text{ positive constant}$$

حيث $\delta(x)$ هي دالة ديراك دلتا (انظر الملحق B). أثبت أن

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{\alpha^2}{\alpha^2+k^2},\quad T=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\frac{k^2}{\alpha^2+k^2}$$

ملحق (3.A)
المعادلة التفاضلية البسيطة

سوف نستعرض هنا حلاً للمعادلة التفاضلية البسيطة من الرتبة الثانية في الصورة:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \qquad (١)$$

حيث k^2 قيمة ثابتة. لحل المعادلة (١) دعونا نستخدم التعويض:

$$\Psi = e^{mx} \qquad (٢)$$

لنحصل على المعادلة $m^2 + k^2 = 0$ التي لها الجذران $m = \pm i\ k$ حيث $i = \sqrt{-1}$. من ثم فإن الحل الخاص للمعادلة (١) يكون بالصورة e^{imx} أو e^{-imx}، وبجمع الحلين نحصل على الحل العام وهو:

$$\Psi = A\ e^{imx} + B\ e^{-imx} \qquad (٣)$$

باستخدام المفكوك $e^{\pm ix} = \cos x \pm i \sin x$ نحصل على صيغة أخرى للحل العام بالصورة:

$$\begin{aligned}\Psi &= (A+B)\cos(mx) + (A-B)i\sin(mx)\\ &= C\cos(mx) + D\sin(mx)\end{aligned} \qquad (٤)$$

حيث A, B, C, D ثوابت اختيارية.

و بالمثل للمعادلة التفاضلية:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - m^2\Psi = 0 \qquad (٥)$$

يكون حلها العام بالصورة:

$$\begin{aligned}\Psi &= A\ e^{mx} + B\ e^{-mx}\\ &= C\cosh(mx) + D\sinh(mx)\end{aligned} \qquad (٦)$$

ملحق (3.B)

الجهود المتماثلة كروياً*

يقال عن طاقة الجهد $V(\boldsymbol{r})$ بأنها متماثلة كروياً (Spherically symmetric) إذا كانت $V(\boldsymbol{r})$ لا تتغير بالدوران (Rotationally invariant) ، ولهذا فإن $V(\boldsymbol{r})$ تعتمد فقط على المسافة $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ من مركز القوة، والتي ستختار كنقطة أصل للإحداثيات. من ثم فإن الأسطح المتساوية في الجهد تتكون من سطوح كرات مركزية (قشرة Shell) تبعد عن المركز بالمسافة الثابتة $|r|=\text{constant}$. ومميزات الجهد المركزي هي:

١- إن كمية الحركة المدارية L له تكون محفوظة (ثابتة)،

٢- منه نستطيع تعريف القوة المركزية بالمعادلة:

$$\boldsymbol{F}=-\nabla V(r)=-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\partial V}{\partial r}$$

أ- اختزال (تبسيط) مسألة القوى المركزية:

لجسيم كتلته μ يتحرك في مجال قوة مركزية نجد أن الهملتونيان يعرف له كالتالي:

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}=\frac{P^2}{2\mu}+V(r)$$

وله صفة التبادل مع مؤثرات كمية الحركة المدارية، على سبيل المثال:

$$\left[\hat{H},\hat{L}\right]=\left[\hat{H},\hat{L}^2\right]=\left[\hat{H},\hat{L}_z\right]=0$$

وحيث إن:

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right]=0$$

لذلك فإن المؤثرات $\hat{L}^2$ ، $\hat{L}_z$ و $\hat{H}$ يصبح لهن دالة مميزة مشتركة. دعونا نعرف الدالة في الإحداثيات الكروية بالشكل التالي:

$$\Psi(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

ومنها نجد أن معادلة شرودنجر (راجع ذرة الهيدروجين) تصبح:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\Psi = E\Psi$$

وتأخذ المعادلة القطرية الشكل:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]R(r) = ER(r)$$

وهي معادلة تفاضلية مبنية على فصل المتغيرات للمؤثر ∇^2 (ويُدعى لابلاسيان) في الإحداثيات الكروية.

من الملائم أيضاً أن نستخدم التعويض التالي:

$$u(r) = rR(r)$$

لنجد أن $u(r)$ تحقق المعادلة القطرية:

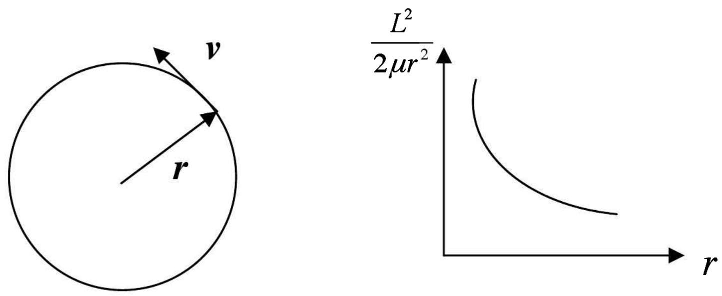
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]u = Eu$$

وهي متطابقة في الصيغة مع معادلة شرودنجر ذات البعد الواحد مع الاختلاف في تعريف الجهد المؤثر بالشكل:

$$V_{eff}(r) = V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

الحد الإضافي بالجهد، $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ ، يسمى الجهد الطارد المركزي (Centrifugal potential). وظهور هذا الحد الإضافي بالجهد يمكن تفهمه من مبادئ الميكانيكا التقليدية كالتالي: لجسيم كتلته μ ، يتحرك في مدار دائري نصف قطره r ، تنشأ علية قوة طرد مركزية F_r تتجه قطرياً للخارج (كما بالشكل ١). قيمة القوة تحسب من المعادلة:

$$F_r = \mu \frac{v^2}{r} = \frac{L^2}{\mu r^3},$$



شكل (١) أ- الجهد الطارد المركزي ب- جسيم يتحرك في مدار دائري

حيث عرفنا $L = \mu vr$ بكمية الحركة الزاوية للمدار الدائري. ويعرف الجهد بالعلاقة $V(r) = \frac{L^2}{2\mu r^2}$ (نتيجةً لأن $F_r = -\frac{\partial V}{\partial r}$). وتبعاً لفروض ميكانيكا الكم، يجب أن نستعيض عن L^2 بالقيمة المميزة لها وهي $l(l+1)\hbar^2$.

على الرغم من تطابق المعادلة السابقة مع معادلة شرودنجر ذات البعد الواحد، فإن الشروط الحدودية المطلوبة للحل مختلفة تماماً, حيث r موجبة. ولتكون الدالة محددة في كل الأماكن فيجب أن نضع هنا الشرط الحدودي $u(0) = 0$ أي أنها تنعدم عند مركز القوى.

في حالة الموجة-s، وتعني أن $l = 0$، فإن المعادلة القطرية تؤول إلى:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \left[E - V(r)\right]u = 0$$

ب-حركة الجسيم الحر:

عندما نضع الجهد $V(r) = 0$، نجد أن حركة الجسيم الحر تتحقق بالمعادلة:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] R_{E,l}(r) = 0$$

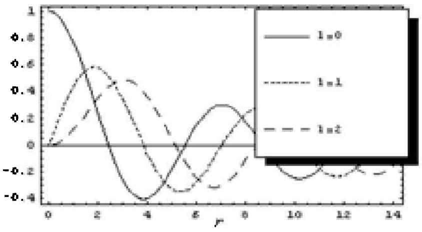
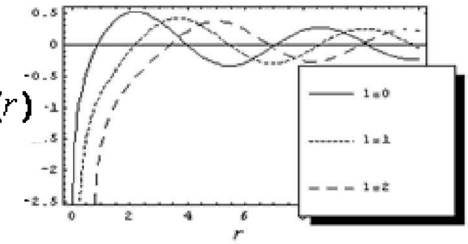
باستخدام المتغيرات $\rho = kr$ و $R_l(\rho) = R_{E,l}(r)$

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + (1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2})\right] R_l(\rho) = 0$$

وهي معادلة بسل التفاضلية الكروية، وحلها العام هو:

$$R_l(\rho) = AJ_l(kr) + B\eta_l(kr)$$

حيث A و B ثوابت اختيارية، J_l هي دالة بسل الكروية و η_l هي دالة نيومان و $E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$. الشكل التالي يوضح الدالتين $J_l(r)$ و $\eta_l(r)$ لقيم مختلفة للمسافة r.

$J_l(r)$  $\eta_l(r)$ 

والجدول التالي يوضح الدوال $J_l(x)$ ، $\eta_l(x)$ للمتغير x والدالة $P_l(\cos\theta)$ لقيم مختلفة للمتغير $\cos\theta$.

l	$P_l(\cos\theta)$	$j_l(x)$	$\eta_l(x)$
0	1	$\frac{\sin x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x}$
1	$\cos\theta$	$\frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$
2	$\frac{1}{4}(1+3\cos 2\theta)$	$\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3\cos x}{x^2}$	$-\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3\sin x}{x^2}$

وحيث إن الحل عند المركز يجب أن يكون منتظماً ومحدودَ القيمة (finite and regular) فيجب وضع $B = 0$. بالتالي فإن:

$$R_l(r) = Cj_l(kr)$$

وحيث إن القيم المميزة k هي قيم موجبة، لذلك نجد أن الطاقة $E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$ تأخذ جميع القيم الموجبة في المدى $\{0,\infty\}$، وتُمثّل بطيف مستمر (continuous spectrum).

وقد رأينا سابقاً أن الجسيم الحر، ذو كمية الحركة $\hbar k$ والطاقة $E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$ ، يمكن تمثيله بواسطة موجة مستوية $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$. وحيث إن الدالة الكروية

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi) = Cj_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

تكون دالة كاملة، فإننا نستطيع أن نضع الموجة المستوية $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ بدلالتها بالشكل:

$$e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm}(k)\, j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

باختيارنا للمحور Z باتجاه المتجه $\boldsymbol{k}$ ، فإن:

$$e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} = e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$$

ولا تعتمد على الزاوية φ . باستخدام التعويض $w = \cos\theta$ نجد:

$$\begin{aligned} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} = e^{ikr\cos\theta} &= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(w) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} i^l j_l(kr)Y^*_{lm}(\hat{k})Y_{lm}(\hat{r}) \\ &\underset{r\to\infty}{\approx} \frac{1}{kr}\sum_l i^l\left(2l+1\right)\sin(kr - \frac{l\pi}{2})P_l(w) \end{aligned}$$

مثال: ادرس حركة جسيم، في الحالة $(l = 0)$ ، داخل بئر جهدي كروي التماثل، ويعرف بالعلاقة الآتية:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{for} \quad r < a \\ \infty, & \text{for} \quad r > a \end{cases}$$

الحل: يتحرك الجسيم بحرية ضمن المدى $0 \le r < a$ وتأخذ الدالة الصورة العامة:

$$\begin{aligned} \Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) &= R(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi) \\ &= \left[AJ_l(kr) + B\eta_l(kr)\right]Y_{l,m}(\theta,\varphi) \end{aligned}$$

حيث A و B ثوابت اختيارية، ولكن الثابت B يؤول للصفر، حيث إن الدالة محددة عند المركز$(r = 0)$. وحيث إن الجسيم لا يستطيع اختراق الحاجز عند الحد $r \ge a$

وهذا ناتج عن كون الحاجز لا حد لارتفاعه، بمعنى أن $V(a) = \infty$. لذلك فإن الدالة يجب أن تختفي (تؤول للصفر) عند الحد $r \geq a$ ، ومنه نستنتج أن:

$$J_l(ka) = 0$$

المعادلة الأخيرة تتحقق لقيم متعددة لجذور دالة بسل الكروية، ولنفترضها χ_{nl} ، انظر الجدول الآتي:

رقم الجذر	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
١	3.14	4.493	5.763	6.99
٢	6.28	7.725	9.09	10.42
٣	9.43	10.90	12.32	13.70

ومنها نجد أن الطاقة تتحقق بالمعادلة:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\chi_{nl}}{a} \right)^2$$

مثال: ادرس حركة جسيم داخل بئر جهدي كروي التماثل محدد العمق، ويعرف بالعلاقة الآتية:

$$V(r) = \begin{cases} -V_o, & \text{for} \quad r \leq a \\ 0, & \text{for} \quad r > a \end{cases}$$

الحل: باستخدام المعادلة الموجية نجد أن:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - V_0(r) u = Eu, \qquad r \leq a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = Eu, \qquad r > a$$

ومن دراستنا السابقة نجد أن الحل العام يمكن وضعه بالصورة:

$$u_{in}(r) = A\sin(k_{in}r) + B\cos(k_{in}r), \quad k_{in} = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \qquad r \le a$$

$$u_{out}(r) = Ce^{-k_{out}r}, \qquad k_{out} = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \qquad r > a$$

حيث إن اهتمامنا يتجه نحو طاقة المدارات ذات المستويات المرتبطة (bound-state energy levels) ، التي تتحقق من الشرط $E < 0$. والشرط الحدودي $u_{in}(0) = 0$ يتطلب $B = 0$.

وحيث إن الدالة ومشتقاتها يجب أن تكون متصلة خلال الحد $r = a$ فنجد أن الشرط الحدودي:

$$\left.\frac{\left(\frac{du_{in}(r)}{dr}\right)}{u_{in}(r)}\right|_{r=a} = \left.\frac{\left(\frac{du_{out}(r)}{dr}\right)}{u_{out}(r)}\right|_{r=a}$$

يعطينا المعادلة:

$$k_{in}\cot k_{in} = -k_{out}$$

وبضرب المعادلة الأخيرة بالمقدار a واستعمال العلاقتين:

$$\xi = ak_{in}, \qquad \eta = ak_{out}$$

نصل إلى المعادلة:

$$\xi\cot\xi = -\eta, \qquad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2$$

واجب منزلي: ارسم الدالة $\xi\cot\xi = -\eta$ ومن الرسم أثبت أنه لا يوجد مدارات إلا إذا تحقق الشرط $V_0 a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$، ويوجد مستوى واحد مرتبط في حالة $\frac{9\pi^2\hbar^2}{8\mu} \ge V_0 a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$، إلخ......

الباب الرابع

نظرية المؤثرات وأقواس ديراك

Operators Theory and Dirac’s Brackets

الباب الرابع
نظرية المؤثرات وأقواس ديراك

في هذا الباب سوف نقدم وصفة بسيطة اقترحها ديراك للتعامل مع الدوال الموجية للنظام؛ التي تسمى أحيانا دوال الحالة. وهي طريقة مختصرة وملائمة لوصف الحالة الكمية. وقد اقترحها ديراك لكي يتمكن من دمج نظريتي شرودنجر للميكانيكا الموجية، وهيزنبرج لميكانيكا المصفوفات وأيضاً ليتعامل مع الدوال بصور مجردة بغض النظر عن إحداثياتها.

وقد علمنا مما تقدم في الأبواب السابقة أن الدالة $\Psi(q,t)$ ، التي تحسب من حل معادلة شرودنجر، تصف حركة الجسيم ومنها نستطيع حساب احتمالية وجوده في مكان ما. وهدفنا في هذا الباب هو إيجاد طريقة عامة لمحاكاة الدالة الموجية بشيء نستطيع التعامل معها رياضياً، مثل المتجهات. فهل سننجح للوصول إلى هدفنا؟ هذا ما سنعرفه في الأجزاء التالية.

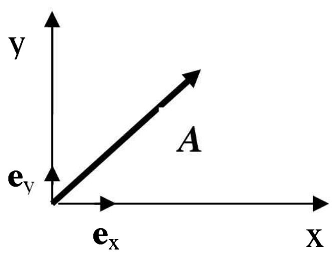
١- أقواس ديراك (كت وبرا)

نبدأ هنا بمثال بسيط لمتجه في بعدين، حيث إنه من السهل تعميمه إلى أي فراغ افتراضي. ولنبدأ بفرض أننا نتعامل مع المتجه $\boldsymbol{A}$ في بعدين $(\mathrm{x,y})$ ، كما بالشكل ١، حيث إن:

$$\boldsymbol{A} = A_x\boldsymbol{e}_x + A_y\boldsymbol{e}_y \qquad (١)$$

حيث $A_x = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{e}_x$ و $A_y = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{e}_y$ هما مساقط المتجه $\boldsymbol{A}$ في الإحداثيات $(\mathrm{x,y})$ على الترتيب. $\boldsymbol{e}_x , \boldsymbol{e}_y$ هما متجهات الوحدة في اتجاهي $(\mathrm{x,y})$ على الترتيب ويحققان خاصتي التعامد- العيارية، بمعنى أن:

$$\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j = \begin{cases} 1 & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases}, \qquad i, j \equiv x, y \qquad (٢)$$



شكل (١) المتجه A في الإحداثيات $(\mathrm{x,y})$.

المعادلة (٢) يمكن أيضاً أن تُعرف من خلال استخدام المصفوفات، بحيث نستطيع أن نضع متجهات الوحدة بالصورة:

$$\boldsymbol{e}_x \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \boldsymbol{e}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

وبالتالي فإن:

$$\boldsymbol{A} = A_x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + A_y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} \tag{٣}$$

مثال: أثبت خواص المعادلة (٢) باستخدام المصفوفات.

الحل: لإثبات خواص المعادلة (٢) باستخدام المصفوفات، دعونا نوضح كيف نحسب حاصل الضرب $\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{e}_y$. لقد عَرفنا $\boldsymbol{e}_y$ بالمصفوفة $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ولضرب المصفوفة من اليسار بالعنصر $\boldsymbol{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$، ولكي نحقق قوانين ضرب المصفوفات، يجب أن نحول صفوف $\boldsymbol{e}_x$ إلى أعمدة والأعمدة إلى صفوف، ونأخذ المرافق المركب (إذا كانت عناصر المصفوفة مركبة) للحصول على النتيجة المعرفة بالمتجهات:

$$\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{e}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

لاحظ أننا حولنا $\boldsymbol{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ إلى المرافق المركب $\boldsymbol{e}_x^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}$.

واجب منزلي: أثبت بقية الخواص للمعادلة (٢) باستخدام المصفوفات.

والآن من السهل تعميم الإحداثيات الثنائية إلى فراغ مركب وغير متناهي الأبعاد يسمى "فراغ هلبرت" بحيث إن:

$$\boldsymbol{A} = \sum_i A_i \, \boldsymbol{e}_i \tag{٤}$$

حيث إن متجهات الوحدة تحقق خاصتي التعامد- العيارية $\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}$.
وبمقارنة المعادلة (٤) مع الدالة التامة:

$$\Psi = \sum_i a_i \ \varphi_i \qquad (٥)$$

نجد أن:

أ- الدالة الموجية Ψ يمكن التعبير عنها بالمتجه $\boldsymbol{A}$ ،

ب- المركبات φ_i يمكن التعبير عنها بمتجه الوحدة $\boldsymbol{e}_i$ ،

ج- المعاملات a_i يمكن التعبير عنها بالضرب القياسي $\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{A}$ ،

٢- الضرب القياسي

قبل أن ندرس كيف يتم الحصول على خاصتي العيارية والتعامد بواسطة المصفوفات سوف نستخدم طريقة جديدة تعرف بأقواس ديراك لتعريف $\boldsymbol{e}_x$ و $\boldsymbol{e}_y$ بالصورة:

$$|i\rangle \equiv \boldsymbol{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |j\rangle \equiv \boldsymbol{e}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

وسوف نُعرف الآن الحالة الكمية (كت): $\underbrace{|i\rangle}_{\text{ket}}$ والمرافق لها وهي (برا) $\underbrace{\langle i|}_{\text{bra}} = |i\rangle^\dagger$

بحيث إن حاصل الضرب القياسي يعرف بالصورة:

$$\underbrace{< i\,|}_{\text{bra}}.\underbrace{|\, i >}_{\text{ket}} = < i \,|\, i >$$

ويعطي كمية قياسية (ليست متجهة)، حقيقية وموجبة.

مثال: إذا عُرفت الحالة الكمية بالمصفوفة: $|a\rangle = \begin{pmatrix} 1+i \\ i \\ 2-i \end{pmatrix}$:

أ- احسب المرافق للمصفوفة، أي $\langle a|$

ب- احسب القيمة $\langle a|a\rangle$

الحل:

أ- $\langle a| = \begin{pmatrix}1+i & +i & 2-i\end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix}1-i & -i & 2+i\end{pmatrix}$

ب- $\langle a|a\rangle = \begin{pmatrix}1-i & -i & 2+i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1+i \\ i \\ 2-i\end{pmatrix} = \underline{8}$

ملاحظات:

أ- بعض الأمثلة للتحويلات:

$$|a\rangle + |b\rangle = |c\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle a| + \langle b| = \langle c|$$

$$< a \,|\, \lambda b > = \lambda < a \,|\, b > \quad \Rightarrow \quad < \lambda a \,|\, b > = \lambda^* < a \,|\, b >$$

$$\langle a|\left[\lambda|b\rangle + \gamma|c\rangle\right] = \lambda\langle a|b\rangle + \gamma\langle a|c\rangle$$

حيث λ, γ ثوابت.

ب- لحساب المرافق غالباً نتبع الجدول التالي:

التعريف	الكمية	المرافق
الثابت	λ	λ^*
كت	$a = \|\ \rangle$	$a^\dagger = \langle\ \|$
برا	$a^\dagger = \langle\ \|$	$a = \|\ \rangle$

مثال: للدالتين:

$$|\psi\rangle = i\,|\varphi_1\rangle - 5i\,|\varphi_2\rangle,$$
$$|\chi\rangle = -|\varphi_1\rangle + 2i\,|\varphi_2\rangle$$

حيث إن $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$ ، احسب القيم القياسية التالية:

(a) $\langle \psi | \psi \rangle$

(b) $\langle \chi | \chi \rangle$

(c) $\langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle$

الحل: نبدأ بإيجاد المرافق للدوال المعرفة كالتالي:

$$|\psi\rangle = i\,|\varphi_1\rangle - 5i\,|\varphi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\psi| = -i\,\langle\varphi_1| + 5i\,\langle\varphi_2|$$
$$|\chi\rangle = -|\varphi_1\rangle + 2i\,|\varphi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\chi| = -\langle\varphi_1| - 2i\,\langle\varphi_2|$$

بالتالي:

$$\text{(a)}\ \langle\psi|\psi\rangle = \left(-i\,\langle\varphi_1| + 5i\,\langle\varphi_2|\right)\left(i\,|\varphi_1\rangle - 5i\,|\varphi_2\rangle\right) = (-i)(i) + (5i)(-5i)$$
$$= 1 + 25 = \underline{26}$$

$$\text{(b)}\ \langle\chi|\chi\rangle = \left(-\langle\varphi_1| - 2i\,\langle\varphi_2|\right)\left(-|\varphi_1\rangle + 2i\,|\varphi_2\rangle\right) = (-1)(-1) + (-2i)(2i)$$
$$= 1 + 4 = \underline{5}$$

$$\text{(c)} \qquad \because |\psi + \chi\rangle = (i - 1)|\varphi_1\rangle - 3i\,|\varphi_2\rangle$$
$$\therefore \langle\psi + \chi| = (-i - 1) < \varphi_1 | - (-3i) < \varphi_2 |,$$

$$\therefore \langle\psi + \chi|\psi + \chi\rangle = (i - 1)(-i - 1) < \varphi_1 | \varphi_1 > + (-3i)(3i) < \varphi_2 | \varphi_2 >$$
$$= (1 + 1) + 9 = \underline{11}$$

مثال: احسب ثابت العيارية c للدالة الموجية $\langle\psi| = c\begin{pmatrix}4 & -3i\end{pmatrix}$.

الحل: باستخدام شرط العيارية $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ نجد أن:

$$\langle\psi|\psi\rangle = c^2\begin{pmatrix}4 & -3i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}4\\ 3i\end{pmatrix} = c^2(16 + 9) = 1 \quad \Rightarrow \quad c = 1/\sqrt{25} = \underline{\frac{1}{5}}.$$

٣- المؤثرات

تكلمنا باختصار في الباب السابق على المؤثرات وبعض من خصائصها، وفي هذا الجزء سوف نستعرض بعضاً من الخصائص الأخرى للمؤثرات.

لنأخذ مثالاً بسيطاً لدوران المحاور من الإحداثيات (x,y) إلى الإحداثيات (x',y') بزاوية مقدارها θ ، باتجاه مضاد لدوران عقارب الساعة، مع ثبوت قيمة المتجه $|\Psi>$ (انظر الشكل ٢). الآن نجد أن المتجه $|\Psi>$ يُعرف في الإحداثيات (x,y) بالصورة:

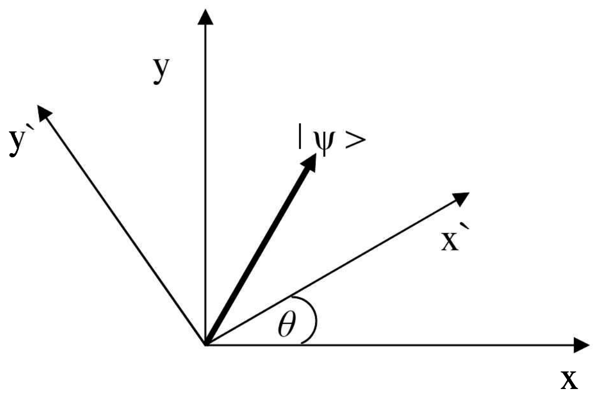
$$\left|\Psi\right\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$

وفي الإحداثيات (x',y') بالصورة:

$$\left|\Psi'\right\rangle = \begin{pmatrix} x_1' \\ y_1' \end{pmatrix}$$

ونحن نعلم أن العلاقة بين المحاور تُعطى بالعلاقة الخطية:

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ y_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$



شكل (٢) دوران المحاور من الإحداثيات (x,y) إلى الإحداثيات (x',y'). بزاوية مقدارها θ مع ثبوت قيمة المتجه $|\Psi>$

ولهذا نجد أن:

$$\left|\Psi'\right\rangle = \hat{A}\left|\Psi\right\rangle \qquad (٦)$$

ومنها نستطيع القول: إن المؤثر $\hat{A}$ عندما أثر على متجه الحالة $\left|\Psi\right\rangle$ حوله إلى متجه الحالة $\left|\Psi'\right\rangle$ في نفس الفراغ. وهذا يعني أننا نستطيع تغيير النظام الفيزيائي إلى نظام فيزيائي آخر باستخدام مؤثر في فراغ هلبرت.

واجب منزلي: أثبت أن $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$

ملاحظات مهمة على المؤثرات:

أ- مسموح بإجراء عمل المؤثرات الآتية:

$$\hat{A}\left|\Psi\right\rangle = |\Psi'>$$

$$\left\langle\Psi\right|\hat{A}^{\dagger} = \left\langle\Psi'\right|$$

$$\hat{A}\hat{B}\left|\Psi\right\rangle = \hat{A}\left(\hat{B}\left|\Psi\right\rangle\right)$$

ب- غير مسموح بإجراء عمليات المؤثرات الآتية:

$$\left|\Psi\right\rangle\hat{A} \quad \text{أو} \quad \hat{A}\left\langle\Psi\right|$$

ج- بالنسبة للمؤثر يفضل (وليس شرطاً ضرورياً) أن يكون له خصائص خطية، بمعنى:

$$\hat{A}\left[\alpha\left|\psi_1\right\rangle + \beta\left|\psi_2\right\rangle\right] = \alpha\hat{A}\left|\psi_1\right\rangle + \beta\hat{A}\left|\psi_2\right\rangle,$$

$$\left[\alpha\left\langle\psi_1\right| + \beta\left\langle\psi_2\right|\right]\hat{A} = \alpha\left\langle\psi_1\right|\hat{A} + \beta\left\langle\psi_2\right|\hat{A}.$$

حيث إن α, β ثوابت.

مثال: احسب القيمة المتوقعة للمؤثر $\left\langle\psi\right|\hat{B}\left|\psi\right\rangle$ بمعرفة أن:

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad <\psi| = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}.$$

الحل: بإجراء الحسابات:

$$\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad -i)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 \quad i)\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{2}(1-1) = \underline{0}.$$

٤- المؤثرات المسقطية

إذا عرفنا المتجه

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix}A_x\\ A_y\end{pmatrix} \qquad (٧)$$

فإننا نجد أن:

$$\langle \boldsymbol{e}_x|\boldsymbol{A}\rangle = (1 \quad 0)\begin{pmatrix}A_x\\ A_y\end{pmatrix} = A_x$$

وهذا يدل على أن الضرب القياسي $\langle \boldsymbol{e}_x|\boldsymbol{A}\rangle$ ماهو إلا مسقط المتجه $\boldsymbol{A}$ باتجاه المحور x . من ثم فإننا يمكن وضع المتجه $\boldsymbol{A}$ بالصورة:

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{A}\rangle &= |\boldsymbol{e}_x\rangle A_x + |\boldsymbol{e}_y\rangle A_y = |\boldsymbol{e}_x\rangle\langle \boldsymbol{e}_x|\boldsymbol{A}\rangle + |\boldsymbol{e}_y\rangle\langle \boldsymbol{e}_y|\boldsymbol{A}\rangle\\ &= \left\{|\boldsymbol{e}_x\rangle\langle \boldsymbol{e}_x| + |\boldsymbol{e}_y\rangle\langle \boldsymbol{e}_y|\right\}|\boldsymbol{A}\rangle\\ &= \hat{1}|\boldsymbol{A}\rangle\end{aligned}$$

ومنها نستطيع أن نعرف مؤثراً جديداً ، ألا وهو مؤثر الوحدة ، بالصورة:

$$\boxed{\hat{1} = \sum_i |\boldsymbol{e}_i\rangle\langle \boldsymbol{e}_i|} \qquad (8a)$$

و منه نعرف المؤثر المسقطي بالصورة:

$$\boxed{\hat{\mathrm{P}}_i = |\boldsymbol{e}_i\rangle\langle \boldsymbol{e}_i|}\,. \qquad (8b)$$

مثال: أثبت أن $\hat{\mathrm{P}}_i^{\,2} = \hat{\mathrm{P}}_i$

الحل:

$$\hat{\mathrm{P}}_i^{\,2}|\alpha\rangle = \hat{\mathrm{P}}_i\hat{\mathrm{P}}_i|\alpha\rangle = \hat{\mathrm{P}}_i|\boldsymbol{e}_i\rangle\langle \boldsymbol{e}_i|\alpha\rangle = |\boldsymbol{e}_i\rangle\underbrace{\langle \boldsymbol{e}_i|\boldsymbol{e}_i\rangle}_{\delta_{ii}}\langle \boldsymbol{e}_i|\alpha\rangle = \hat{\mathrm{P}}_i|\alpha\rangle$$

مثال: احسب تأثير $\hat{P}_x$ على المستوى $|A\rangle$.

الحل: تأثير $\hat{P}_x$ على المستوى $|A\rangle$ يحسب كالتالي:

$$\hat{P}_x \, |A\rangle = |e_x\rangle \underbrace{\langle e_x \, |A\rangle}_{A_x} = A_x \, |e_x\rangle$$

٥- مبدأ التراكب

نعلم أن المؤثر الهملتوني هو مؤثر خطي. ولهذا إذا كانت الدالتان المنفصلتان φ_1 و φ_2 هما حلان منفصلان يحققان معادلة شرودنجر، فإن مبدأ التراكب ينص على أن الدالة:

$$\Psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2$$

حيث $a_1, \, a_2$ ثوابت، هي أيضاً تحقق معادلة شرودنجر. لذلك إذا كانت:

$$|\varphi_i\rangle, \quad i = 1,2$$

تكون فئة كاملة، مثال على ذلك إحداثيات الوحدة في ثلاثة أبعاد:

$$|i> = \boldsymbol{e}_x = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \qquad |j> = \boldsymbol{e}_y = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \qquad |k> = \boldsymbol{e}_z = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

فإننا بالإمكان أن نكتب الدالة Ψ بالصورة $|\Psi\rangle = \sum_i a_i \, |\varphi_i\rangle$ ومنها نجد أن:

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \Psi \rangle &= \sum_{i,j} \langle a_i\varphi_i | a_j\varphi_j \rangle = \sum_{i,j} a_i^* a_j \underbrace{\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle}_{\delta_{ij}} \\ &= \sum_i |a_i|^2 = \sum_i P_i = 1\end{aligned} \qquad (٩)$$

حيث P_i هو الكثافة الاحتمالية (وليس المؤثر المسقطي $\hat{P}_i$) لتواجد النظام في الحالة $|\varphi_i\rangle$.

مثـــال: احـــسب القيمـــة المتوســـطة $\left\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \right\rangle$ حيـــث $\hat{G} | \varphi_i > = g_i | \varphi_i >$ و $\left| \Psi \right\rangle = \sum_i a_i \left| \varphi_i \right\rangle$ والدالة φ_i معيرة.

الحل: بواسطة المعلومة $\hat{G} | \varphi_i > = g_i | \varphi_i >$ نجد أن:

$$\left\langle \hat{G} \right\rangle = \left\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \right\rangle = \sum_{i,j} a_i^* a_j \underbrace{\left\langle \varphi_i | \hat{G} | \varphi_j \right\rangle}_{g_i \delta_{ij}} = \sum_i g_i |a_i|^2$$

$$= \sum_i g_i P_i \qquad (١٠)$$

لحساب سعة الاحتمال a_i من المعادلة $\Psi = \sum_i a_i \varphi_i$ نستخدم الضرب القياسي:

$$\left\langle \varphi_i | \Psi \right\rangle = \sum_j a_j \left\langle \varphi_i | \varphi_j \right\rangle = a_i \; .$$

مثال: جسيم، كتلته m ، يتحرك في جهد متذبذب توافقي معادلة جهده هي $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$، ودالة مستواه المعيرة هي:

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{6}} \left[\varphi_0(x) + i \varphi_1(x) - 2\varphi_2(x) \right]$$

حيث $\varphi_n(x)$ هي الدوال المميزة للمتذبذب التوافقي المناظرة للقيم المميزة $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$. احسب سعة الاحتمال لكل دالة $\varphi_i(x)$ وأوجد الطاقة المتوقعة لهذا المستوى.

الحل: من الدالة المعيرة $\psi(x,0)$ يمكن تكوين الجدول التالي (قراءة الجدول من اليمين لليسار):

n	الدوال المميزة φ_n	السعه لكل دالة a_n	القيم المميزة E_n	$E_n \mid a_n \mid^2$
0	φ_0	$a_o = \frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	$\frac{1}{12}\hbar\omega$
1	φ_1	$a_1 = \frac{i}{\sqrt{6}}$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$\frac{3}{12}\hbar\omega$
2	φ_2	$a_2 = -\frac{2}{\sqrt{6}}$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\frac{20}{12}\hbar\omega$

ومن ثم فإن الطاقة المتوقعة هي:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n \mid a_n \mid^2 = E_o |a_o|^2 + E_1 |a_1|^2 + E_2 |a_2|^2 = 2\hbar\omega.$$

مثال: عملة معدنية ذات وجهين، وجه للصورة يُعرف بالدالة $|\psi_1>$ ووجه للكتابة يعرف بالدالة $|\psi_2>$ ودالة الحالة العيارية $|\Psi\rangle$ تعرف بالعلاقة:

$$|\Psi\rangle = a_1 |\psi_1> + a_2 |\psi_2>$$

احسب a_1 و a_2.

الحل: باستخدام العلاقة $<\psi_i | \psi_j> = \delta_{ij}$ نجد أن:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \Psi \rangle &= \left(a^*_1 \langle\psi_1| + a^*_2 \langle\psi_2|\right)\left(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle\right) \\
&= a^*_1 \langle\psi_1|\left(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle\right) + a^*_2 \langle\psi_2|\left(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle\right) \\
&= |a_1|^2 \underbrace{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}_{=1} + a^*_1 a_2 \underbrace{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}_{=0} + a^*_2 a_1 \underbrace{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}_{=0} + |a_2|^2 \underbrace{\langle\psi_2|\psi_2\rangle}_{=1} \\
&= |a_1|^2 + |a_2|^2 \\
&= 1
\end{aligned}$$

هذه معادلة واحدة فقط في مجهولَيْن، من ثم لا نستطيع إيجاد قيمهما. ولكن حيث إننا نتعامل مع عملة ذات وجهين فقط، لذلك نستطيع وضع $|a_1|^2 = |a_2|^2 = \frac{1}{2}$ لنحقق حالة العيارية.

مثال: إذا عرفت الدالة:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{3}|\varphi_1\rangle + \frac{2}{3}|\varphi_2\rangle ،$$

حيث إن $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ ، فما هي احتمالية وجود جسيم في المستوى $|\varphi_1\rangle$ والمستوى $|\varphi_2\rangle$؟

الحل: أولاً: يجب أن نتأكد من عيارية الدالة كالتالي:

أ- نحسب الدالة المرافقة للدالة $|\psi\rangle$ لنجد أن:

$$\langle \psi | = \frac{1}{3}\langle \varphi_1 | + \frac{2}{3}\langle \varphi_2 |$$

ب- نحسب حاصل الضرب القياسي لهما وهو:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \frac{1}{9}\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle + \frac{4}{9}\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle$$
$$= \frac{5}{9} \neq 1$$

ومنها نستنتج أن الدالة $|\psi\rangle$ غير معيرة،

ثانياً: لعيارية الدالة $|\psi\rangle$ يمكن وضعا بالصورة $|\psi\rangle = A\left[\frac{1}{3}|\varphi_1\rangle + \frac{2}{3}|\varphi_2\rangle\right]$ حيث A هو ثابت العيارية. الآن باستخدام شرط العيارية $1 = \langle \psi | \psi \rangle$ نجد أن:

$$A^2\left(\frac{5}{9}\right) = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{9}{5}}$$

وتأخذ الدالة الصورة:

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{9}{5}}\left[\frac{1}{3}|\varphi_1\rangle + \frac{2}{3}|\varphi_2\rangle\right]$$

والآن نجد أن السعة الاحتمالية للمستوى $|\varphi_1\rangle$ واحتمالية تواجد الجسيم في هذا المستوى، هما على الترتيب: $a_1 = \sqrt{\frac{9}{5}}\frac{1}{3}$ و $P(\varphi_1) = a_1^2 = \left(\sqrt{\frac{9}{5}}\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{1}{5}$

بالنسبة للمستوى $|\varphi_2\rangle$ فإن السعة الاحتمالية واحتمالية تواجد الجسيم في هذا المستوى، هما على الترتيب: $a_2 = \sqrt{\frac{9}{5}}\frac{4}{3}$ و $P(\varphi_2) = a_2^2 = \left(\sqrt{\frac{9}{5}}\frac{4}{3}\right)^2 = \frac{4}{5}$

طريقة أخرى: يمكن حساب احتمالية وجود جسيم في المستوى $|\varphi_1\rangle$ باستخدام المعادلة:

$$P(\varphi_1) = \frac{|<\varphi_1|\psi>|^2}{<\psi|\psi>} = \frac{\frac{1}{9}<\varphi_1|\varphi_1>}{5/9} = \frac{1}{\underline{5}}$$

مثال: احسب قيمة الطاقة المتوقعة للدالة:

$$|\psi>=\underbrace{\sqrt{\frac{1}{19}}}_{a_1}|\varphi_1>+\underbrace{\sqrt{\frac{4}{19}}}_{a_2}|\varphi_2>+\underbrace{\sqrt{\frac{2}{19}}}_{a_3}|\varphi_3>+\underbrace{\sqrt{\frac{3}{19}}}_{a_4}|\varphi_4>+\underbrace{\sqrt{\frac{5}{19}}}_{a_5}|\varphi_5>$$

مع اعتبار أن:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle, \qquad E_n = n\varepsilon_o$$
$$\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn}$$

الحل: بفرض أن معاملات المركبات φ_n هي a_n، فيجب أن نتأكد **أولاً** من عيارية الدالة كالتالي:

$$<\psi|\psi> = \sum a_n^2 <\varphi_n|\varphi_n>= \sum a_n^2 = \frac{1}{19}+\frac{4}{19}+\frac{2}{19}+\frac{3}{19}+\frac{5}{19} = \frac{15}{19}$$

حيث إن المجموع لا يتساوى بالواحد لذلك، فإن الدالة غير عيارية.

ثانيا: احسب احتمال تواجد الجسيم في كل مستوى على حدة باستخدام الصورة:

$$P_i = \frac{|<\varphi_i|\psi>|^2}{<\psi|\psi>}$$

لتعطينا الآتي:

$$P_1 = \frac{|a_1|^2}{15/19} = \frac{1/19}{15/19} = \frac{1}{15}, \quad P_2 = \frac{4}{15}, \quad P_3 = \frac{2}{15}, \quad P_4 = \frac{3}{15}, \quad P_5 = \frac{5}{15}.$$

ثالثا: قيمة الطاقة المتوسطة تحسب كالآتي:

$$<E> = \sum_n P_n E_n = \frac{1}{15}(\varepsilon_o) + \frac{4}{15}(2\varepsilon_o) + \frac{2}{15}(3\varepsilon_o) + \frac{3}{15}(4\varepsilon_o) + \frac{5}{15}(5\varepsilon_o)$$
$$= \frac{52}{15}\varepsilon_o .$$

وبطريقة أخرى:

$$\bar{E} = \frac{<\psi|H|\psi>}{<\psi|\psi>} = \frac{\sum a_n^2 <\varphi_n|H|\varphi_n>}{15/19} = \frac{19}{15}\left(\frac{1}{19} + \frac{8}{19} + \frac{6}{19} + \frac{12}{19} + \frac{25}{19}\right)\varepsilon_o$$
$$= \frac{52}{15}\varepsilon_o$$

٦- المؤثر الهيرميتي

الفرض: يُعرف المؤثر " $\hat{O}$" بأنه مؤثر هيرميتي إذا تحقق الشرط التالي:

$$\int_{space} g^* \hat{O} f \, dx = \int_{space} \left(\hat{O} g\right)^* f \, dx \tag{١٣}$$

حيث f و g دالتان يحققان فروض ميكانيكا الكم.

ويظهر لنا هنا سؤال: ماهي فائدة المؤثر الهيرميتي؟ والإجابة هي أن: المؤثر الهيرميتي له خاصيتان مهمتان، ألا وهما:

أ- قيمته المميزة تكون دائماً حقيقية.

ب- دواله المميزة، التي تنتمي إلى قيم مميزة مختلفة، تكون متعامدة.

ولإثبات ذلك اعتبر المؤثر $\hat{A}$ مؤثراً هيرميتياً، ويؤثر على الدالتين $|\alpha\rangle$ و $\langle\beta|$ بمعنى:

$$\begin{aligned} \hat{A}|\alpha\rangle &= \alpha|\alpha\rangle \\ \Rightarrow \quad \langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle &= \alpha\langle\beta|\alpha\rangle \end{aligned} \tag{١٤}$$

$$\begin{aligned} \langle\beta|\hat{A}^\dagger &= \langle\beta|\beta^* \\ \Rightarrow \langle\beta|\hat{A}^\dagger|\alpha\rangle &= \beta^*\langle\beta|\alpha\rangle \end{aligned} \tag{١٥}$$

وبطرح المعادلتين (١٤) و(١٥) تنتج المعادلة:

$$(\alpha-\beta^*)\langle\beta|\alpha\rangle=0 \qquad (١٦)$$

وهنا يظهر احتمالان:

أ- إما أن تكون الدوال غير متعامدة، بمعنى أن $\langle\beta|\alpha\rangle\neq 0$، ومن ثم فإن $\alpha=\beta^*$ وهذا يعني أن القيم المميزة هي قيم حقيقية.

ب- إما أن تكون القيم المميزة غير متساوية، بمعنى أن $\alpha\neq\beta^*$، ومن ثم فإن الدوال المميزة المختلفة تحقق خاصية التعامد، $\langle\beta|\alpha\rangle=0$.

وهو المطلوب إثباته.

ونحن نعلم أن القيمة المتوسطة لأي كمية فيزيائية قياسية (وهي التي تقاس بالمعمل) يجب أن تكون قيماً حقيقية وموجبة، ولهذا فإن:

$$\langle\hat{A}\rangle=\langle\hat{A}\rangle^*$$

وهذا يعني أن:

$$<f\,|\hat{A}|\,g>=\int_{space} f^*\hat{A}\,g\,d\tau=\int_{space} g\left(\hat{A}f\right)^* d\tau$$
$$=\int_{space}\left(\hat{A}f\right)^* g\,d\tau=<\hat{A}f\,|\,g>;$$
$$<i\,|\hat{A}|\,j>=<j\,|\hat{A}|\,i>^* \quad\Rightarrow\quad A_{ij}=(A_{ji})^*$$

ومنها نعرف المرافق الهيرميتي $\hat{O}^\dagger$ لمؤثر $\hat{O}$ بالعلاقة:

$$<\varphi|\hat{O}\,|\psi>=<\hat{O}\varphi|\psi> \quad\Rightarrow \hat{O}^\dagger_{ij}=\hat{O}^*_{ji} \qquad (١٦)$$

وبالتكامل يعرف بالتالي:

$$\langle\varphi|\hat{O}\,|\psi\rangle=\int_{space}\varphi^*\hat{O}\,\psi dx=\int_{space}\varphi^*\hat{O}\,\psi dx=\int_{space}\left(\hat{O}\varphi\right)^*\psi dx \qquad (١٧)$$
$$=\langle\hat{O}\varphi|\psi\rangle$$

والقائمة التالية تحتوي بعض الخواص المهمة للمؤثر الهيرميتي وهي:

$$\left(a\hat{A}\right)^{\dagger} = a^{*}\hat{A}^{\dagger}$$
$$\left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}+\hat{D}\right)^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger}+\hat{B}^{\dagger}+\hat{C}^{\dagger}+\hat{D}^{\dagger} \qquad (١٨)$$
$$\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\right)^{\dagger} = \hat{D}^{\dagger}\hat{C}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$$

أمثلة لبعض المؤثرات الهيرميتية

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{A}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$$

$$\hat{D} = i\left(\hat{A}-\hat{A}^{\dagger}\right) \quad \Rightarrow \quad \hat{D}^{\dagger} = -i\left(\hat{A}^{\dagger}-\hat{A}\right) = \hat{D}$$

$$\hat{B} = \hat{A}+\hat{A}^{\dagger} \quad \Rightarrow \quad \hat{B}^{\dagger} = \left(\hat{A}+\hat{A}^{\dagger}\right)^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger}+\hat{A} = \hat{B}$$

أمثلة لبعض المؤثرات غير الهيرميتية:

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 2i & 0 \\ i & 0 & -5i \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{B}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & -2i & 0 \\ 3 & 0 & 5i \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{B}^{\dagger} \neq \hat{B}$$

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{C}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 5 & i & 1+i \\ 3-2i & -3i & 1 \\ -3i & 8 & 4 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{C}^{\dagger} \neq \hat{C}$$

$$\hat{C} = i\left(\hat{A}+\hat{A}^{\dagger}\right) \quad \Rightarrow \quad \hat{C}^{\dagger} = -i\left(\hat{A}+\hat{A}^{\dagger}\right) = -\hat{C}$$

مثال: أوجد المرافق الهيرميتي للمؤثر $D_x = \dfrac{d}{dx}$.

الحل:

إذا $\langle\varphi|D_x\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\frac{d}{dx}\psi dx = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi^* d\psi = \underbrace{\left[\varphi^*\psi\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{d}{dx}\varphi^* dx = \langle -D_x\varphi|\psi\rangle$

المرافق الهيرميتي للمؤثر $D_x = \dfrac{d}{dx}$ هو $D_x^\dagger = -\dfrac{d}{dx}$. ولقد أهمل الحد $\underbrace{\left[\varphi^*\psi\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0}$ حيث إن الدوال ψ و φ تنعدم عند $\pm\infty$، وذلك تبعاً لفروض ميكانيكا الكم.

مثال: أوجد المرافق الهيرميتي للمؤثر $-iD_x^3$.

الحل: باستخدام الخاصية $\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\right)^\dagger = \hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ نجد أن:

$$\left(-iD_x^3\right)^\dagger = \left(D_x^3\right)^\dagger(-i)^\dagger = \left(-D_x^3\right)i = \underline{-iD_x^3}.$$

مثال: أوجد المرافق الهيرميتي للمؤثر المركب $\hat{O} = a + ib$ حيث a, b ثوابت حقيقية.

الحل: من تعريف المرافق الهيرميتي:

$$<\varphi|\hat{O}\psi> = <\hat{O}^\dagger\varphi|\psi>$$

من السهل إثبات أن:

$$\langle\varphi|(a+ib)\psi\rangle = \langle(a-ib)\varphi|\psi\rangle = (a-ib)\langle\varphi|\psi\rangle$$

إذا المرافق الهيرميتي للمؤثر المركب $\hat{O} = a + ib$ هو المرافق المركب لهذا المؤثر $\hat{O}^\dagger = a - ib$.

٧- علاقات التبادل

يعرف قوس التبادل لمؤثرين $\hat{B}$ و $\hat{A}$ بالعلاقة:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (1)$$

ويعرف المؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ بأنهما متبادلان إذا كان $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. وللتحقق من تبادل المؤثرين فمن المهم جداً أن يتعامل المؤثران مع جميع الدوال. واختبار صحة العلاقة التبادلية يتطلب التأثير على دوال اختيارية مع الحيطة والحذر عند تطبيق القوانين الرياضية والحسابية المختلفة.

مثال: احسب التأثير الناتج من استخدام المؤثرات $\hat{B}\hat{A}$ و $\hat{A}\hat{B}$ على الدالة الاختيارية $\psi(x) = x^3$ حيث $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ هو المؤثر التفاضلي و $\hat{B} = \sqrt{\ }$.

الحل: أولاً المؤثر $\hat{B}\hat{A}$ يعطي:

$$\hat{B}\hat{A}\psi(x) = \hat{B}\left(\hat{A}\psi(x)\right) = \hat{B}\left(\frac{d}{dx}x^3\right) = \hat{B}\left(3x^2\right) = \sqrt{3x^2} = \underline{\sqrt{3}\,x}$$

ثانياً المؤثر $\hat{A}\hat{B}$ يعطي:

$$\hat{A}\hat{B}\psi(x) = \hat{A}\left(\hat{B}\psi(x)\right) = \hat{A}\left(\sqrt{x^3}\right) = \frac{d}{dx}\left(x^{3/2}\right) = \underline{\frac{3}{2}x^{1/2}}$$

نجد من هذا المثال أن تأثير $\hat{B}\hat{A}$ لا يتساوى مع تأثير $\hat{A}\hat{B}$ على نفس الدالة، إذاً فهما غير إبداليين.

وقبل أن نبدأ بالأمثلة، نتساءل عن أهمية المؤثرات المتبادلة؟ الجواب: إن المؤثرات ذات العلاقات المتبادلة يكون لها نفس الدالة المميزة ومن ثم يمكن قياس كمياتها الفيزيائية بدقة متناهية وفي آن واحد.

<u>نظرية</u>: الشرط اللازم والكافي لكي تكون الدالة مميزة للمؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ في آن واحد؛ هو أن ينعدم قوسهما التبادلي، بمعنى أن: $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$.

<u>الإثبات</u>: نفترض أن الدالة المميزة ψ_n هي دالة مميزة للمؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ ولهذا نجد:

$$\hat{A}\psi_n = a\psi_n \qquad (٢)$$

$$\hat{B}\psi_n = b\,\psi_n \qquad (٣)$$

بضرب (٢) بالمؤثر $\hat{B}$ من الشمال، وأيضاً بضرب (٣) بالمؤثر $\hat{A}$ من الشمال نجد

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = ba\psi_n \qquad \text{(a2)}$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n = ab\psi_n \qquad \text{(b2)}$$

بطرح (.a2) من (.b2) ينتج:

$$\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)\psi_n = \left[\hat{A},\hat{B}\right]\psi_n = 0$$

و بما أننا افترضنا أن $\psi_n \neq 0$ فإن $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$ وهو المطلوب إثباته.

مثال: أثبت أن $\left[5,\hat{D}_x\right] = 0$ حيث $\hat{D}_x = \frac{d}{dx}$ هو المؤثر التفاضلي.

الحل: لو فرضنا أن الدالة الاختيارية $f(x)$، نجد أن:

$$\begin{aligned}\left[5,\hat{D}_x\right]f(x) &= \left[5\hat{D}_x - \hat{D}_x 5\right]f(x) = 5\frac{d}{dx}\left[f(x)\right] - \frac{d}{dx}\left[5f(x)\right]\\ &= 5\frac{d}{dx}f(x) - 5\frac{d}{dx}f(x)\\ &= \underline{0}\end{aligned}$$

من ثم بالإمكان القول: إن المؤثر $\hat{D}_x$ والقيمة ٥ متبادلان مع بعضهما البعض.

القائمة التالية تحتوي بعض الخواص المهمة لأقواس التبادل، وهي:

$$\left[\hat{A},\hat{A}^n\right]=0,\quad n=1,2,3,\cdots$$
$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=-\left[\hat{B},\hat{A}\right]$$
$$\left[k\hat{A},\hat{B}\right]=\left[\hat{A},k\hat{B}\right]=k\left[\hat{A},\hat{B}\right]$$
$$\left[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right] \tag{٤}$$
$$\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}+\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]$$
$$\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}+\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]$$

مثال: أثبت أن $\left[\hat{x},\hat{D}_x\right]=-1$.

الحل: لو فرضنا أن الدالة الاختيارية $f(x)$، نجد أن:

$$\begin{aligned}\left[\hat{x},\hat{D}_x\right]f(x) &= x\frac{d}{dx}\left[f(x)\right]-\frac{d}{dx}\left[xf(x)\right]\\ &= x\frac{d}{dx}f(x)-\left(x\frac{d}{dx}f(x)+f(x)\frac{d}{dx}x\right)\\ &= -f(x)\\ \Rightarrow &\quad \boxed{\left[\hat{x},\hat{D}_x\right]=\underline{-1}}\end{aligned}$$

ومن ثم فإن المؤثرين $\hat{D}_x$ و $\hat{x}$ غير إبداليين مع بعضهما.

واجب منزلي: باستخدام خواص أقواس التبادل (٤) أثبت أن

$$\left[\hat{D}_x,\hat{x}\right]=-\left[\hat{x},\hat{D}_x\right]=1.$$

مثال: أثبت أن $\left[\hat{x}^2,\hat{D}_x\right]=-2x$.

الحل: لو فرضنا أن الدالة الاختيارية $f(x)$، نجد أن:

$$\left[\hat{x}^2,\hat{D}_x\right]f(x)=x^2\frac{d}{dx}\left[f(x)\right]-\frac{d}{dx}\left[x^2f(x)\right]$$
$$=x^2\frac{d}{dx}f(x)-\left(x^2\frac{d}{dx}f(x)+f(x)\frac{d}{dx}x^2\right)$$
$$=-2xf(x).$$
$$\Rightarrow\quad\boxed{\left[\hat{x}^2,\hat{D}_x\right]=\underline{-2x}}$$

وهو المطلوب إثباته. من هنا نجد أن المؤثرين $\hat{D}_x$ و $\hat{x}^2$ غير إبداليين مع بعضهما.

مثال: إذا كان $\hat{A}=\hat{A}^\dagger,\quad \hat{B}=\hat{B}^\dagger$ أثبت أن:

$\left[\hat{A},\hat{B}\right]^\dagger=-\left[\hat{A},\hat{B}\right]$.

الحل: باستخدام الخواص بالمعادلات (١٦) نجد أن:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]^\dagger=\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)^\dagger=\left(\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger-\hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger\right)=\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B}$$
$$=-\left[\hat{A},\hat{B}\right]$$

وهو المطلوب.

مثال: تأكد من حساب أقواس التبادل التالية:

(a) $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=\left[\hat{x},\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right]=\frac{\hbar}{i}\left[\hat{x},\frac{\partial}{\partial x}\right]=-\frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial x},\hat{x}\right]=-\frac{\hbar}{i}=i\hbar$ ،

(b) $\left[\hat{x},\hat{p}_x^2\right]=\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\hat{p}_x+\hat{p}_x\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}.i\hbar=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}=2i\hbar\hat{p}_x$

(c) $\left[\hat{x}^2,\hat{p}_x\right]=\left[\hat{x}\hat{x},\hat{p}_x\right]=\hat{x}\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]+\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\hat{x}=2i\hbar x$

واجب منزلي: أثبت أن: $\left[\hat{x}_j,\hat{p}_k\right]=i\hbar\delta_{jk}$ ، $\left[\hat{x}_j,\hat{x}_k\right]=\left[\hat{p}_j,\hat{p}_k\right]=0$.

مثال: احسب $\left[\hat{p}_x, \hat{V}\right]$ حيث $V(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots$.

الحل: باستخدام العلاقة $\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right]$ نجد أن:

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}^2\right] = \left[\hat{p}_x, \hat{x}\hat{x}\right] = \left[\hat{p}_x, \hat{x}\right]\hat{x} + \hat{x}\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar(2x) = -i\hbar\frac{d}{dx}(x^2)$$

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}^3\right] = \left[\hat{p}_x, \hat{x}^2\hat{x}\right] = \left[\hat{p}_x, \hat{x}\right]\hat{x}^2 + \hat{x}\left[\hat{p}_x, \hat{x}^2\right] = -i\hbar(3x^2) = -i\hbar\frac{d}{dx}(x^3)$$

ومنها نشتق العلاقة:

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}^n\right] = -i\hbar\frac{d}{dx}(x^n)$$

ومن ثم فإن:

$$\left[\hat{p}_x, \hat{V}\right] = -i\hbar\left\{a_1 + a_2\frac{dx^2}{dx} + a_3\frac{dx^3}{dx} + \cdots\right\} = -i\hbar\frac{d}{dx}V(x)$$

٨- مبدأ عدم الدقة لهيزنبرج

علمنا أن المؤثرات الهيرميتية، التي تحقق خاصية التبادل تكون لها دالة مميزة مشتركة. وذلك يعني أن الكميات الفيزيائية المقاسة عملياً والمرتبطة بهذه المؤثرات تكون معرفة بدالة حالة مميزة واحدة، ولها نفس كثافة الاحتمال، ومن ثم فإن الكمية الفيزيائية يمكن أن تقاس في آن واحد وتعطي القيمة المميزة لكل منهما بدون أي تأثير لإحداهما على الأخرى. ولكن ماذا يحدث إذا كان هناك مؤثرات لا يحققن خاصية التبادل؟ وللإجابة عن هذا السؤال، نفترض أننا عرفنا مؤثرين هيرميتيين وهما $\hat{B}$ و $\hat{A}$ يرتبطان بالعلاقة:

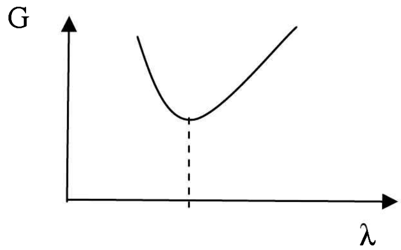
$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = iC$$

حيث C هو ثابت. ولكل مؤثر القيمة المتوقعة $<\hat{A}>$ و $<\hat{B}>$. دعونا نعرف مؤثرين هيرميتيين جديدين وهما:

$$\hat{P} = \Delta\hat{A} = \hat{A} - <\hat{A}>,$$
$$\hat{Q} = \Delta\hat{B} = \hat{B} - <\hat{B}> \qquad (١)$$

واجب منزلي: بمعرفة أن $\hat{A}, \hat{B}$ مؤثران هيرميتيان أثبت أن $\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}$ مؤثران هيرميتيان.

الآن نعد المتجه $\left(\hat{P} + i\lambda\hat{Q}\right)|\psi\rangle$ والمقياس له هو G ويُعطى بالعلاقة:



$$\begin{aligned} G &= \langle\psi|\left(\hat{P} + i\lambda\hat{Q}\right)^{\dagger}\left(\hat{P} + i\lambda\hat{Q}\right)|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|P^2 + i\lambda\underbrace{\left(\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P}\right)}_{iC} + \lambda^2 Q^2|\psi\rangle \\ &= <P^2> - \lambda <C> + \lambda^2 <Q^2> \geq 0 \end{aligned}$$

وعند شرط النهاية الصغرى $\dfrac{dG}{d\lambda} = 0$ للمقياس G نجد أن $\lambda = \dfrac{<C>}{2<Q^2>}$ ومن ثم:

$$G = <P^2> - \frac{1}{4}\frac{<C>^2}{<Q^2>} \geq 0$$

$$\Rightarrow \quad <P^2><Q^2> \geq \frac{<C>^2}{4}$$

ومنها نصل إلى مبدأ عدم الدقة لهيزنبرج في الصورة:

$$\boxed{\Delta A\ \Delta B \geq \frac{|<C>|}{2}} \qquad (٢)$$

حالات خاصة:

(1) $If \quad \Delta A = 0 \ \Rightarrow \ \Delta B \to \infty$

(2) $If \quad \Delta B = 0 \ \Rightarrow \ \Delta A \to \infty$

(3) $If \quad \hat{A} = \hat{x}, \ \hat{B} = \hat{p}_x \ \Rightarrow \ \Delta x\, \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2}$

(4) $If \quad \hat{A} = \hat{E}, \ \hat{B} = \hat{t} \ \Rightarrow \ \Delta E\, \Delta t \geq \dfrac{\hbar}{2}$

بالمثال التالي سوف نستعرض مثالاً مهماً لإحدى تطبيقات مبدأ عدم الدقة.

مثال: استخدم مبدأ عدم الدقة لحساب طاقة المستوى الأرضي لجسيم، كتلته m ، ويتحرك حركة خطية توافقية بسيطة طاقتها الكلية مقدارها:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

حيث ω هو التردد الزاوي للمتذبذب.

الحل: دعونا نفترض أن الجسيم محصور الحركة في مسافة مقدارها a. هذا يعني أن:

$$x \sim \Delta x \sim a$$

من هذا الفرض واستخدام مبدأ عدم الدقة، نجد أن:

$$p_x \sim \Delta p_x \sim \frac{\hbar}{2a}$$

والطاقة الكلية تصبح:

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 a^2$$

طاقة المستوى الأرضي (أدنى مستوى للطاقة) تحسب من أقل قيمة للمعادلة:

$$\frac{dE}{da} = 0$$

ومنها نجد أن:

$$\frac{dE}{da} = -\frac{\hbar^2}{4ma^3} + m\omega^2 a = 0 \quad \Rightarrow \quad a \approx \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2}$$

من ثم فإن أدنى قيمة للطاقة تعطى بالعلاقة:

$$E = \frac{\hbar^2}{8m} \cdot \frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} = \underline{\frac{1}{2}\hbar\omega}$$

وهي القيمة الحقيقية لجسيم، كتلته m ، ويتحرك حركة خطية توافقية بسيطة (انظر الباب الخامس). القيمة $\frac{1}{2}\hbar\omega$ تُعرف بأنها طاقة نقطة الصفر، وهي ناتجة من مبدأ عدم الدقة.

واجب منزلي: استخدم مبدأ عدم الدقة لحساب طاقة المستوى الأرضي لإلكترون، كتلته m وشحنته e ، بذرة الهيدروجين حيث طاقته الكلية هي:

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

حيث r هي المسافة بين الإلكترون والنواة.

ملخص: بالجدول التالي سوف نسترجع بعض التعريفات الخاصة بأقواس ديراك ومرادفاتها بالتعريفات القديمة:

Dirac notation تعريف ديراك	Original notation تعريف أصلي
$\vert n\rangle$	ψ_n
$\langle n\vert$	ψ_n^*
$\langle x\vert\psi\rangle$	$\psi(x)$
$\langle n\vert\psi\rangle$	c_n
$\langle\varphi\vert\psi\rangle$	$\int_{space} \varphi^*\psi\, d\tau$
$\langle i\vert j\rangle = \delta_{ij}$	$\int_{space} \psi_i^*\psi_j\, d\tau = \delta_{ij}$
$\overline{A} = \langle\varphi\vert A\psi\rangle = \langle\varphi\vert A\vert\psi\rangle$	$\int_{space} \varphi^* A\psi\, dx$

٩- تمارين عامة

١- ضع الدالة $\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a}$ في شكل أقواس ديراك.

الحل: استخدم التعريف $\psi(x) = \langle x\vert\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle x\vert n\rangle\langle n\vert\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle n\vert\psi\rangle\langle x\vert n\rangle,$

لنجد أن:

$$c_n = \langle n|\psi\rangle, \quad \langle x|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

٢- أثبت أن

$$(a) \quad \left[\hat{p}_x, \left[\hat{p}_x, x\right]\right] = 0 \qquad (b) \quad \left[\left[\hat{x}, \hat{p}_x^2\right], \hat{x}\right] = 2\hbar^2$$

$$(c) \quad \hat{B}^{-1}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{-1} = -\left[\hat{A}, \hat{B}^{-1}\right] \qquad (d) \quad [\hat{x}^3, \hat{p}_x] = 3i\hbar\hat{x}^2$$

$$(e) \qquad [\hat{H}, \hat{x}] = [\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x), \hat{x}] = \frac{-2i\hbar}{2m}\hat{p}_x$$

٣- اعتبر المؤثرات المعرفة بالمعادلات التالية:

$$\hat{O}_1\psi(x) = x^3\psi(x)$$

$$\hat{O}_2\psi(x) = x\,\frac{d\psi(x)}{dx}$$

أثبت أن $[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = -3\hat{O}_1$

٤- تحقق من عدم هيرميتية المؤثرات الآتية:

$$(a) \quad \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}N, \qquad (b) \quad \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{pmatrix},$$

$$(c) \quad i\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}N, \qquad (d) \quad i\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

٥- تحقق من هيرميتية المؤثرات الآتية:

$$(a) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}, \qquad (b) \quad \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \qquad (c) \quad \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

٦- بمعلومية

$$\hat{B} = \varepsilon\begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad |\psi> = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1-i \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

أثبت أن $<\psi|\hat{B}|\psi> = -\frac{\varepsilon}{5}$

٧- تحقق من المرافق لكل من المؤثرات التالية:

$$(1)\quad \left(\frac{d}{dx}\right)^{\dagger} = -\frac{d}{dx},$$

$$(2)\quad \left(\frac{d^2}{dx^2}\right)^{\dagger} = \frac{d^2}{dx^2},$$

$$(3)\quad (x)^{\dagger} = x$$

$$(4)\quad \left(ix\frac{d}{dx}\right)^{\dagger} = \left(\frac{d}{dx}\right)^{\dagger} x^{\dagger} i^* = i\frac{d}{dx}x,$$

$$(5)\quad \left(i\frac{d}{dx}\right)^{\dagger} = i\frac{d}{dx}$$

٨- بمعلومية الدوال:

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|1\rangle + e^{i\theta}|2\rangle\right\}, \quad |B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|1\rangle - e^{i\theta}|2\rangle\right\}$$

أثبت أن $\hat{N} = |A\rangle\langle A| + |B\rangle\langle B| = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|$

٩- لأي دالتين اختياريتين f و g اثبت متباينة شفارتز (Schwartz inequality)، التي توضح بالشكل:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} ff^*dx \int_{-\infty}^{+\infty} gg^*dx \geq \int_{-\infty}^{+\infty} fg^*dx \int_{-\infty}^{+\infty} gf^*dx}$$

ومنها أثبت أن:

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\left|\langle[A,B]\rangle\right|^2$$

الباب الخامس

المتذبذب التوافقي الخطي

The Linear Harmonic Oscillator

الباب الخامس

المتذبذب التوافقي الخطي

تعد مسألة المتذبذب التوافقي الخطي من أهم المسائل التي تم حلها في مملكتي ميكانيكا الكم والميكانيكا الكلاسيكية. وهي من الأمثلة الجيدة التي تستخدم لمعرفة الفرق بين النتائج بالمملكتين. وقد استخدمت مسألة المتذبذب التوافقي الخطي في حل وفهم ظواهر فيزيائية معقدة بمختلف فروع الفيزياء (كلاسيكية، ذرية، جزيئية، جسيمات أولية ونظرية الأوتار.. الخ)، وأثبتت صحة فروضها. وفي هذا الباب نستعرض أولاً: كيف تعاملت النظرية التقليدية مع معادلات الحركة الاهتزازية لجسم ما. بعدها نبدأ بالدخول ببساطة إلى طريقة تعامل ميكانيكا الكم مع المتذبذب، مع مقارنة بالنظرة التقليدية. وسنرجئ الحل الرياضي إلى الملاحق المرافقة، حتى لا نشتت القارئ بالصعوبات الرياضية لحل المعادلة التفاضلية للمتذبذب التوافقي.

١- النظرة التقليدية

نبدأ بالنظرة التقليدية للمسألة، حيث إنه عند دراسة الحركة الاهتزازية، التوافقية، لجسم (مثلاً جسم معلق بنابض، زنبرك، أو حركة جزيئات ثنائية الحركة) فإن أبسط الفروض هي:

أ- أن الجسم يخضع لقوة إرجاع (Restoring Force)(F_x) تشده أو تدفعه إلى موضع اتزانه.

ب- تتناسب قوة الإرجاع مع إزاحة الجسم عن موضع الاتزان x (للتبسيط سوف نفترض الحركة في اتجاه واحد فقط)، وتُعرف العلاقة بقانون هوك (Hook's Law) على الصورة:

$$F_x = -k\ x \qquad (١)$$

حيث F_x هي القوة باتجاه x والثابت k هو ثابت التناسب. باستخدام قانون نيوتن نحصل على:

$$F_x = ma_x = -k\ x$$
$$\Rightarrow \quad \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x = -\omega^2\ x \qquad (٢)$$

حيث $k = m\omega^2$ والمعادلة (٢) لها الحل العام:

$$x = A\sin(\omega t + \theta) \qquad (٣)$$

حيث A و θ ثابتان يعينان بالشروط الحدودية للمسألة. الثابت A يعبر عن سعة الحركة الاهتزازية، أي أنه يتساوى مع النهاية العظمى للإزاحة x. وتعبر المعادلة (٣) عن حركة توافقية خطية بسيطة لها تردد زاوي ω يُعطى بالعلاقة:

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T}$$

حيث ν هو التردد و T هو الزمن الدوري للمتذبذب.

ولحساب دالة الجهد V من المعادلة (١)، نستخدم علاقتها بالشغل W في المجال المحافظ بالشكل:

$$V = -W = -\int_0^x F_x\,dx = \frac{1}{2}kx^2, \qquad (٤)$$

المعادلة (٤) تمثل معادلة قطع مكافئ.

وطاقة الحركة "K" عند إزاحة x تحسب كالتالي:

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2}m\,\mathrm{v}^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2}mA^2\omega^2\cos^2(\omega t + \theta) \\ &= \frac{1}{2}mA^2\omega^2\left[1 - \sin^2(\omega t + \theta)\right] \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2\left(A^2 - x^2\right) \end{aligned}$$

وتبعاً للميكانيكا التقليدية نجد أن الطاقة الكلية "E" للمتذبذب هي:

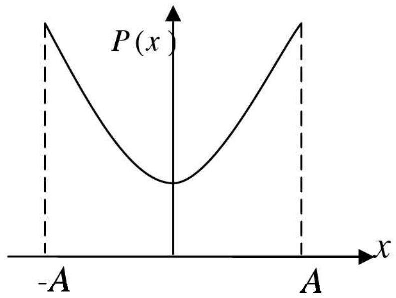
$$\begin{aligned} E &= K + V = \frac{1}{2}m\omega^2\left(A^2 - x^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2A^2 \qquad (5) \end{aligned}$$

المعادلة (٥) تخبرنا أن الطاقة الكلية لجسيم يهتز في حركة توافقية بسيطة تعتمد على قيمة السعة " $\pm A$" ومن ثم فإن قيمة الطاقة تأخذ قيماً تتزايد زيادة متصلة تبعاً لزيادة " $\pm A$". ولسهولة المقارنة مع ميكانيكا الكم سوف نعرف كثافة الاحتمال التقليدي" $P(x)\,dx$" لوجود المتذبذب بمسافة dx كالتالي: إذا مر جسيم، سرعته v خلال مسافة مقدارها dx في اتجاه واحد ذهاباً أو إياباً، في زمن مقداره dt، فإن احتمال تواجده في المسافة dx يحدد بالعلاقة:

$$P(x)\,dx = \frac{dt}{T/2} = \frac{2\frac{dx}{\mathrm{v}}}{T} = \frac{2}{T\,\mathrm{v}}dx = \frac{2}{T\sqrt{\omega^2\left(A^2 - x^2\right)}}dx$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}dx \qquad (6)$$

من ثم فإن كثافة الاحتمال تأخذ قيمة صغرى عند القيمة "$x = 0$" وتصل إلى قيمة عظمى عند الحدود "$x = \pm A$".



٢- نظرة ميكانيكا الكم

للتعامل مع المتذبذب التوافقي الخطي من خلال نظرية ميكانيكا الكم، نجد أن معادلة شرودنجر تأخذ الصورة:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0,$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0} \qquad (7)$$

حيث $\alpha = m\omega/\hbar, \quad \beta = 2mE/\hbar^2$.

بالإمكان تبسيط المعادلة (٧) وذلك باستخدام التعويض:

$$q = \sqrt{\alpha}\, x$$

واجب منزلي: باستخدام التعويض $q = \sqrt{\alpha}\, x$ تأكد من التفاضلات التالية:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dq}\frac{dq}{dx} = \sqrt{\alpha}\frac{d\psi}{dq}$$

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

وتتحول المعادلة (٧) إلى الصورة المبسطة:

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + (\lambda - q^2)\psi = 0 \qquad (٨)$$

حيث تم تعريف القيمة المميزة (عديمة الأبعاد) λ بالشكل:

$$\lambda = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (٩)$$

الحل العام للمعادلة (٨) ليس سهلاً، وسوف نكتفي هنا بعرض ما نحتاجه. الحل التفصيلي للمعادلة (٨) سوف يعرض في الملحق المرافق $(5.A)$.

المعادلة (٨) تتحقق فقط لقيم منفصلة للطاقة الكلية تعبر عنها المعادلة:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1,$$

$$\Rightarrow E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,\cdots \qquad (10)$$

ومن المعادلة (١٠) نستنتج الآتي:

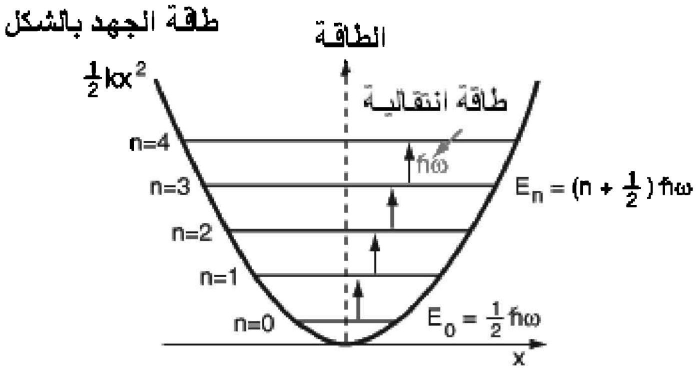
أ- طاقة المستويات هي طاقة مكماة، حيث إنها تعتمد على العدد الصحيح n. n تسمى عدد الكم الاهتزازي (Vibrational quantum number).

ب- الفروق، ΔE، بين طاقات المستويات المتتالية تكون متساوية، وتحسب كالتالي:

$$.\Delta E = E_{n\pm1} - E_n = \pm\hbar\omega$$

ج- للعدد $n=0$ فإن الطاقة E_o (طاقة المستوى الأرضي أو طاقة نقطة الصفر) لا تساوي صفراً، ولكن $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$، وهذا لا يتطابق مع نظرية بور. وعدم التطابق له دلالته الفيزيائية المهمة وهي: أن أقل طاقة اهتزازية (طاقة المستوى الأرضي) لأي نظام فيزيائي (مثال على ذلك الجزيئات متعددة الذرات أو الذرات بالجوامد) يوصف بجهد المتذبذب التوافقي لا يمكن أن تنعدم حتى عند درجة حرارة الصفر المطلق. لذلك فإن طاقة نقطة الصفر هذه كافية لمنع تجمد سائل الهليوم-٤ تحت الضغط الجوي، مهما قللنا من درجة حرارته. وهي مرتبطة بعلاقة هيزنبرج الاتعينية، فإذا كانت طاقة الجسيم معدومة، فإن الجسيم يسكن ومن ثم فإن إحداثيات الجسيم وكميته الحركية الخطية يمكن تعيينهما في آن واحد، وهذا يتعارض مع علاقة عدم التعيين. عملياً أمكن التأكد من أن الطاقة الاهتزازية الصفرية غير منعدمة بواسطة دراسة تشتت الضوء بواسطة البلورات عند تغير درجة الحرارة.

والشكل التالي يعبر عن مستويات الطاقة لجهد يعبر عنه بالمعادلة (٤).

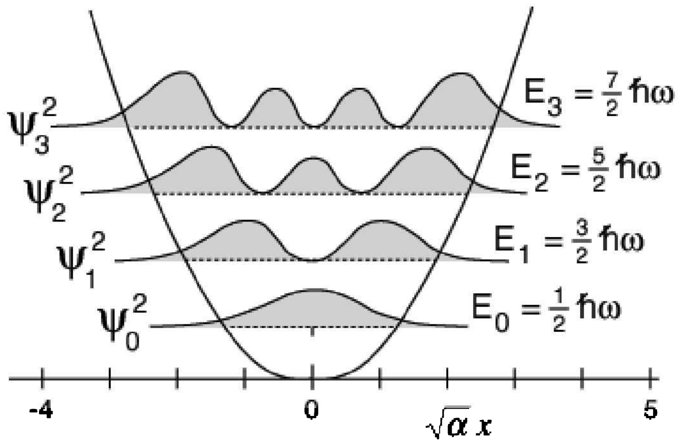


ولكل قيمة n يوجد لها دالة مميزة تعرف بالصورة:

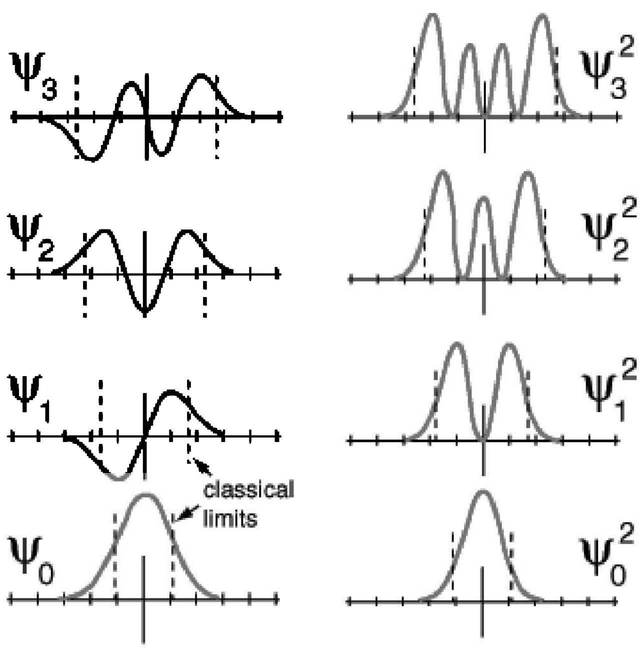
$$\psi_n(q) = N_n e^{-q^2/2} H_n(q), \qquad N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}} \tag{11}$$

حيث $H_n(q)$ تسمى دالة هرمت متعددة الحدود. انظر الملحق (5.A) لمراجعة تفاصيل حل دالة هرمت. الأربع دوال المميزة الأوائل موضحة بالجدول والشكل التاليين.

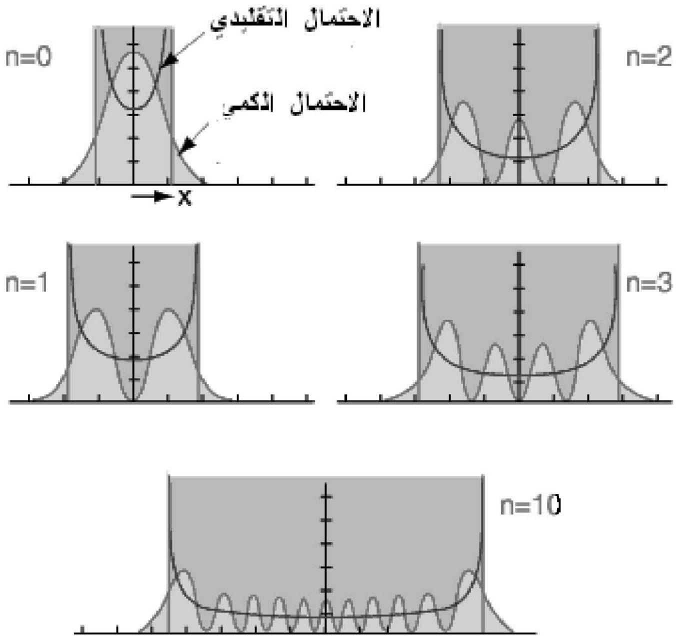
n	$\lambda = 2n+1$	E_n	$\psi_n(q)$
0	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	$\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-q^2/2}$
1	3	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$\sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\, q\, e^{-q^2/2}$
2	5	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\sqrt{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}}\,(2q^2-1)\, e^{-q^2/2}$
3	7	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	$\sqrt{\frac{1}{3\sqrt{\pi}}}\,(2q^2-3)\, q\, e^{-q^2/2}$



وأشكال الدوال ومربعاتها موضحة كالتالي، والخطوط المنقطة توضح المدى الكلاسيكي للدوال:



واجب منزلي: للأشكال التالية اشرح مدى مطابقة كثافة الاحتمال التقليدي مع كثافة الاحتمال بميكانيكا الكم.



مثال: افترض أن للمعادلة (٧) حلاً مميزاً يعطى بالصورة:

$$\psi = be^{-cx^2} \qquad (١٢)$$

احسب الثوابت b, c وعين القيمة المميزة لهذه الدالة.

الحل: لحساب الثابت c بالتعويض من المعادلة (١٢) في المعادلة (٧) نصل للمعادلة:

$$\left(4c^2 - \alpha^2\right)x^2 + \left(\beta - 2c\right) = 0 \quad \textbf{(13)}$$

بالمعادلة (١٣)، بمساواة معاملات x^2 بالصفر نحصل على:

$$\left(4c^2 - \alpha^2 = 0\right) \quad \Rightarrow \quad c = \pm\frac{\alpha}{2} = \pm\frac{m\omega}{2\hbar} \qquad \textbf{(14)}$$

وذلك باستخدام قيمة $\alpha = m\omega/\hbar$ من المعادلة (٧). القيمة السالبة سوف تهمل، حيث إنها تعطي دالة تزايدية بالمعادلة (١٢)، ويصبح الحل غير مناسب فيزيائياً. بمساواة معاملات x^0 في كلا الطرفين بالمعادلة (١٣) نحصل على:

$$\beta = 2c = \frac{m\omega}{\hbar} \qquad (١٥)$$

وباستخدام قيمة $\beta = 2mE / \hbar^2$ من المعادلة (٧) نجد أن:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (١٦)$$

وهي قيمة الطاقة الصفرية للمهتز التوافقي. من ثم فإن الدالة والقيمة المميزة لهذا المستوى تصبح:

$$\psi_o = be^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad \Leftrightarrow \quad E_o = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (١٧)$$

٣- تمارين عامة

١- للدالة $\psi_o = be^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ أثبت أن:

أ- $b = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$

ب-

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p}_x \rangle = 0, \quad \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \langle \hat{p}_x^2 \rangle = \frac{1}{2}m\hbar\omega, \quad \Delta p_x \Delta x = \frac{\hbar}{2}$$

٢- أثبت أن الدالة $\psi = A\, x\, e^{-cx^2}$ تحقق المعادلة:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0$$

وتحقق من النتائج التالية:

$$E = \frac{3}{2}\hbar\omega \;\text{و}\; A = \sqrt{2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \;\text{،}\quad c = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

وذلك باستخدام التكامل القياسي: $\int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2}\, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}}$.

٣- أثبت أن احتمالية وجود المستوي الأرضي، $n = 0$ ، للمتذبذب التوافقي البسيط خارج المنطقة الكلاسيكية هي 0.157.

٤- بمعلومية الدالة:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha}x) \text{ ،}$$

تحقق من النتائج التالية:

$$\hat{x}_{mn} = \langle\psi_m(x)|x|\psi_n(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) x \psi_n(x) dx = \begin{cases} 0\ , & \text{if} \quad m \neq n \pm 1 \\ \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n+1}{2}}, & \text{if} \quad m = n+1 \\ \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n}{2}}, & \text{if} \quad m = n-1 \end{cases}$$

$$\hat{x}^2_{nn} = \langle\psi_n(x)|x^2|\psi_n(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) x^2 \psi_n(x) dx = \frac{2n+1}{2\alpha},$$

$$\langle\hat{p}_x\rangle = \langle\psi_n(x)|-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\psi_n(x)\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi_n(x)\right)dx = 0,$$

$$\langle\hat{p}_x^2\rangle = \langle\psi_n(x)|-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}|\psi_n(x)\rangle = -\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_n(x)\right)dx = \hbar^2\alpha\left(\frac{2n+1}{2}\right),$$

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}_x^2\rangle = \frac{\omega\hbar}{2}(n+\frac{1}{2}),$$

$$\langle V\rangle = \frac{m\omega^2}{2}\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\omega\hbar}{2}(n+\frac{1}{2}),$$

$$\langle E\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

ملحق (5.A)

المتذبذب التوافقي الخطي (حل متعددة الحدود)

تم تعريف الهاملتونيان للمتذبذب التوافقي الخطي بالمعادلة:

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + (\lambda - q^2)\psi = 0 \tag{١}$$

حيث تم تعريف القيمة المميزة (العديمة الأبعاد) λ بالشكل:

$$\lambda = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{٢}$$

وقبل أن نستعرض الحل العام للمعادلة (١) دعونا نتوقف قليلاً لنبحث عن طبيعة الحل التقاربي للدالة ψ، أي عندما $q \to \pm\infty$. بوضع $q \to \pm\infty$ بالمعادلة (١) فإننا يمكننا إهمال المقدار λ وذلك بالمقارنة مع q^2. وعليه نحصل على المعادلة:

$$\frac{d^2\psi_\infty}{dq^2} - q^2\psi_\infty = 0 \tag{٣}$$

التي يمكن وضع حلها بالصورة:

$$\psi_\infty = e^{aq^2}$$

ولإيجاد القيمة a نفاضل الدالة مرتين فنجد:

$$\frac{d^2\psi_\infty}{dq^2} = (4a^2q^2 + 2a)e^{aq^2} \approx 4a^2q^2e^{aq^2}$$

ومنها ومن المعادلة (٣) نجد أن:

$$a^2 = \frac{1}{4} \qquad \Rightarrow \qquad a = \pm\frac{1}{2}$$

ومن ثم نستخلص أن:

$$\psi_\infty = ce^{-q^2/2} + de^{+q^2/2}$$

حيث c و d ثابتان اختياريان. الحل ($e^{+q^2/2}$) هو حل مرفوض لأن الشرط $\lim_{q\to\infty} e^{+q^2/2} = \infty$ لا يحقق شروط ميكانيكا الكم من حيث محدودية الدالة في اللانهاية. لذلك يمكننا وضع المعامل d مساوياً للصفر. وحيث إننا لم نتكلم عن معيارية الدالة فيمكننا وضع المعامل c مساوياً للواحد. من ثم فإن الحل التقاربي للدالة يصبح:

$$\psi_\infty = e^{-q^2/2} \tag{٤}$$

دعونا نرجع مرةً أخرى للحل العام للمعادلة (١)، الذي سوف نفترضه بالشكل التالي:

$$\psi = \psi_\infty H(q) = e^{-q^2/2} H(q) \tag{٥}$$

حيث $H(q)$ هي متسلسلة القوى للمتغير q (التي سنعرفها لاحقاً بدالة هرمت متعددة الحدود Hermit polynomial). وسوف نوقفها عند حد معين لا نتعداه حتى تحقق شروط ميكانيكا الكم بالنسبة لمحدودية الدالة في اللانهاية.

واجب منزلي: باستخدام $\psi = e^{-q^2/2}H(q)$ أثبت أن

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} = \left[\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q\frac{dH(q)}{dq} + (q^2-1)H(q)\right]e^{-q^2/2}$$

باستخدام المعادلة (٥) تصبح المعادلة (١) بالشكل:

$$\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q\frac{dH(q)}{dq} + (\lambda-1)H(q) = 0 \tag{٦}$$

المعادلة التفاضلية الخطية من الدرجة الثانية (٦) يمكن حلها حلاً كاملاً، حيث إنها مشابهة لمعادلة هرمت، التي تأخذ الشكل:

$$\frac{d^2H_n(q)}{dq^2} - 2q\frac{dH_n(q)}{dq} + 2n\,H_n(q) = 0, \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{٧}$$

وذلك بوضع $H(q) = H_n(q)$ و $\lambda - 1 = 2n$. ومنها نجد:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n+1,$$
$$E = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega = (n+\frac{1}{2})h\nu, \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{٨}$$

واجب منزلي: باستخدام المتسلسلات حل المعادلة التفاضلية (٦). انظر الحل بالملحق $(5.B)$.

وصلنا الآن إلى هدفنا الأساسي، ونستطيع هنا أن نميز دوال وطاقة المستويات بالرمز n ، الذي يدل على درجة دالة هرمت كثيرة الحدود. أخيراً:

$$\psi_n(q) = N_n e^{-q^2/2} H_n(q), \qquad N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}}$$
$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega = (n+\frac{1}{2})h\nu, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

ملحق (5.B)

حل معادلة هرمت متعددة الحدود

معادلة هرمت التفاضلية تُعرف بالشكل:

$$\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q\frac{dH(q)}{dq} + (\lambda - 1)H(q) = 0 \qquad (١)$$

وتُحل باستخدام متسلسلة القوى كالتالي:

١- نفترض الحل العام بصورة متسلسلة بالشكل:

$$H(q) = \sum_{k=0}^{\infty} e_k q^k = e_0 + e_1 q + e_2 q^2 + e_3 q^3 + \cdots$$

أ- بإجراء التفاضلات:

$$\frac{dH(q)}{dq} = \sum_{k=0}^{\infty} k e_k q^{k-1} = e_1 + 2e_2 q + 3e_3 q^2 + \cdots ;$$

$$\frac{d^2H(q)}{dq^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) e_k q^{k-2} = 2e_2 + 2\cdot 3e_3 q + 3\cdot 4e_4 q^2 + \cdots$$

ب- بالتعويض من القيم العليا بالمعادلة (١) ومساواة معاملات كل حد من q^m له نفس الدرجة بالصفر، نحصل على العلاقات التالية:

$$\begin{aligned} 2e_2 + (\lambda - 1)e_0 &= 0 \\ 2\cdot 3e_3 + (\lambda - 1 - 2)e_1 &= 0 \\ 3\cdot 4e_4 + (\lambda - 1 - 2\cdot 2)e_2 &= 0 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots&\cdots \end{aligned}$$

وعامةً نصل إلى الحد k نجد العلاقة:

$$(k+1)(k+2)e_{k+2} + (\lambda - 1 - 2k)e_k = 0$$

ومنها نحصل على:

$$e_{k+2} = \frac{\lambda - 1 - 2k}{(k+1)(k+2)} e_k \qquad (٢)$$

المعادلة (٢)، تدعي علاقة تكرارية (Recursion relation) ، وتوضح كيف نحصل على قيم المعاملات بمعلومية المعاملات e_0 و e_1. ويصبح المعاملان e_0 و e_1 ثابتين

اختياريين مطلوبين للحل العام للمعادلة (١). يمكننا الآن وضع الحل العام للمعادلة (١) كمجموع متسلسلتين، واحدة تحتوي الحدود الفردية وأخرى تحتوي الحدود الزوجية:

$$\begin{aligned} H(q) &= e_0\left(1+\frac{e_2}{e_0}q^2+\frac{e_4}{e_2}\frac{e_2}{e_0}q^4+\frac{e_6}{e_4}\frac{e_4}{e_2}\frac{e_2}{e_0}q^6+\cdots\right) \\ &+ e_1\left(q+\frac{e_3}{e_1}q^3+\frac{e_5}{e_3}\frac{e_3}{e_1}q^5+\frac{e_7}{e_5}\frac{e_5}{e_3}\frac{e_3}{e_1}q^7+\cdots\right) \end{aligned} \qquad (٣)$$

واجب منزلي:

أ- اختبر سلوك الدالة $H(q)$ مع زيادة الدرجة k، بمعني أن $k >> 1$، وأثبت أن النسبة

$$\frac{e_{k+2}}{e_k} \to \frac{2}{k}$$

ب- قارن سلوك الدالة $H(q)$ مع سلوك الدالة $e^{q^2} = 1+q^2+\frac{q^4}{2}+\cdots+\frac{q^{2k}}{k!}+\cdots$ لتثبت أن الدالة $H(q)$ يمكن تمثيلها بالشكل $H(q) \propto e^{q^2}$.

من الواجب المنزلي نجد أن

$$\psi \propto e^{-q^2/2}e^{q^2} \propto e^{q^2/2}$$

وهي دالة تزايدية وغير محددة عندما $q \to \pm\infty$. هذا يضطرنا إلى وقف المتسلسلات عند حد معين لا نتعداه حتى تحقق الدالة ψ شروط ميكانيكا الكم بالنسبة لمحدوديتها في ما لا نهاية.

العلاقة التكرارية (٢) تدلنا على أنه عندما نضع $k = n$، بحيث $\lambda = 2n+1$، فإن واحدة من المتسلسلات (٣) سوف تتوقف مع e_n، حيث إن جميع الحدود بدءاً من e_{n+2} سوف تنعدم (أي تتساوى بالصفر). بإمكاننا حذف المتسلسلة الأخرى بوضع $e_0 = 0$ في حالة كون n فردية، أو وضع $e_1 = 0$ في حالة كون n زوجية. ونتيجةً لتوقف المتسلسلات نحصل على قيم الطاقة المميزة بالمعادلة:

$$E = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega = (n+\frac{1}{2})h\nu, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

الباب السادس

كمية الحركة الزاوية المدارية لجسيم

Orbital Angular Momentum of a One Particle System

الباب السادس

كمية الحركة الزاوية المدارية لجسيم

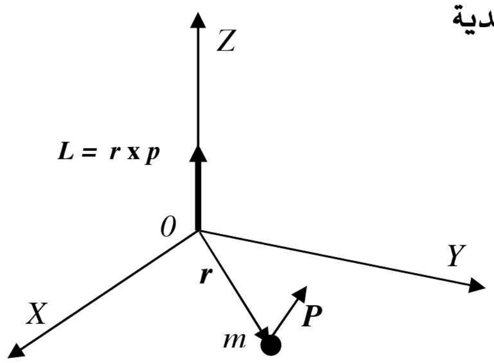
لعبت كمية الحركة الزاوية المدارية، "L"، دوراً رئيسياً في الفيزياء التقليدية، وخصوصاً عند دراسة حركة الكواكب والمجرات باستخدامها في قوانين كبلر ونيوتن. بالنسبة إلى النظام المعزول إذا كان شرط العزوم:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F} = \frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = 0$$

فإن L تكون ثابتة. وهذا يعني لنا أن كمية الحركة الزاوية المدارية تعد كمية محفوظة (Conservative). ولهذا فقد استخدمت كمية الحركة الزاوية لدراسة كل من الحركة الدورانية للكواكب حول الشمس، نظرية التشتت، الخ. وفي ميكانيكا الكم، تعد كمية الحركة الزاوية حجر الأساس في دراسة وتحليل الأطياف (نووية، ذرية، جزيئية).

في هذا الفصل سوف نستعرض أولاً التعريف العام لكمية الحركة الزاوية المدارية في الفيزياء التقليدية، وتليها كيفية تعريفها واستخدامها في ميكانيكا الكم. وسوف نرجئ دراسة كمية الحركة المغزلية للجسيم إلى فصل متأخر، لأنه لا يوجد لها تشابه في الفيزياء التقليدية.

١- كمية الحركة الزاوية في الفيزياء التقليدية



شكل (١) جسيم كتلته m وسرعته الخطية $\mathbf{v}$ وكمية حركته الخطية $p = m\,\mathbf{v}$ (يتحرك في المستوى XY وفي اتجاه مضاد لاتجاه عقارب الساعة)

للتبسيط، انظر: الشكل (١)، سوف نفترض جسيماً: كتلته m، وسرعته الخطية $\mathbf{v}$، وكمية حركته الخطية $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$، ويتحرك في المستوى XY، وفي اتجاه مضاد لاتجاه عقارب الساعة.

إذا اعتبرنا الإزاحة بين الجسيم ونقطة الأصل "0" هي $\boldsymbol{r}$؛ فإن الميكانيكا التقليدية تعرف كمية الحركة الزاوية المدارية $\boldsymbol{L}$ بالنسبة إلى نقطة الأصل بالمتجه:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_X & \boldsymbol{e}_Y & \boldsymbol{e}_Z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \qquad (١)$$

حيث $\boldsymbol{e}_X , \boldsymbol{e}_Y , \boldsymbol{e}_Z$ هي متجهات الوحدة في اتجاه X ,Y , Z بالترتيب. ويكون $\boldsymbol{L}$ عمودياً على المستوى الذي يحتوى $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}$ يتجه لأعلى تبعاً لقاعدة اليد اليمنى. وتعرف مركبات الحركة الزاوية المدارية في الاتجاهات X ,Y , Z بالترتيب كالتالي:

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y ; \\ L_y &= zp_x - xp_z ; \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \qquad (٢)$$

والآن سوف نعرف $\boldsymbol{L}$ من وجهة نظر ميكانيكا الكم وفي إحداثيات مختلفة.

٢- كمية الحركة الزاوية في الإحداثيات الكرتيزية

كما تعلمنا إننا إذا تعاملنا مع ميكانيكا الكم فإننا نستبدل كل متغير فيزيائي بنظيره المؤثر. وبمعلومية أن $\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial j}$ حيث $(j \equiv x , y , z)$ فإن $\boldsymbol{L}$ في الإحداثيات الكرتيزية تُكتب كالتالي:

Classical Mechanics	Quantum Mechanics
$L_x = yp_z - zp_y ;$	$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$
$L_y = zp_x - xp_z ;$	$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$ (٣)
$L_z = xp_y - yp_x ;$	$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$
$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 ;$	$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

مع ملاحظة أنه لا يوجد تعريف لكمية الحركة الزاوية المدارية في بعد واحد للإحداثيات الكرتيزية. ومن المعادلة (٣) فإنه من السهل اشتقاق علاقات التبادل (التلازم) بين الكميات المعرفة.

مثال: أثبت أن $\left(\hat{L}_x\right)^{\dagger} = \hat{L}_x$.

الحل: بأخذ المرافق للمؤثر $\hat{L}_x$ نجد أن:

$$\begin{aligned}
\left(\hat{L}_x\right)^{\dagger} &= \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)^{\dagger} \\
&= \left(\hat{y}\hat{p}_z\right)^{\dagger} - \left(\hat{z}\hat{p}_y\right)^{\dagger} \\
&= \hat{p}_z^{\dagger}\hat{y}^{\dagger} - \hat{p}_y^{\dagger}\hat{z}^{\dagger} \\
&= \hat{p}_z\hat{y} - \hat{p}_y\hat{z} \\
&= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\
&= \hat{L}_x
\end{aligned}$$

وقد استخدمنا العلاقات: $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger} + \hat{B}^{\dagger}, \left(\hat{A}\hat{B}\right)^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$

مثال: أثبت أن الدالة $(x \pm iy)^m$ هي دالة مميزة للمؤثر $\hat{L}_z$ ثم أوجد قيمها المميزة.

الحل: بتأثير $\hat{L}_z$ على الدالة المعرفة $(x \pm iy)^m$ نجد أن:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z (x \pm iy)^m &= \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)(x \pm iy)^m \\
&= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)(x \pm iy)^m \\
&= \pm\hbar mx(x \pm iy)^{m-1} + \hbar miy(x \pm iy)^{m-1} \\
&= \pm\hbar m(x \pm iy)(x \pm iy)^{m-1} \\
&= \pm\hbar m(x \pm iy)^m
\end{aligned}$$

هي معادلة مميزة لها الدالة المميزة $(x \pm iy)^m$ وقيمها المميزة هي $\pm\hbar m$.

مثال: أثبت أن

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z$$

الحل: باستخدام تعريفات المؤثرات المعطاة، نجد أن:

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right]$$

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] &= \left(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y\right)\left(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z\right)-\left(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z\right)\left(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y\right)\\ &= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x-\cancel{\hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z}-\cancel{\hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x}+\hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z\\ &\quad -\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z+\cancel{\hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y}+\cancel{\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z}-\hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y\\ &= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x+\hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z-\hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y\\ &= \hat{y}\hat{p}_x\left(\hat{p}_z\hat{z}-\hat{z}\hat{p}_z\right)+\hat{p}_y\hat{x}\left(\hat{z}\hat{p}_z-\hat{p}_z\hat{z}\right)\\ &= i\hbar\left(-\hat{y}\hat{p}_x+\hat{p}_y\hat{x}\right)\\ &= i\hbar\hat{L}_z\end{aligned}$$

وهو المطلوب إثباته.

وهناك طريقة أخرى، وذلك باستخدام قوانين التبادل نجد أن:

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] &= \left[\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\hat{L}_y\right]\\ &= \hat{y}\underbrace{\left[\hat{p}_z,\hat{L}_y\right]}_{I}+\underbrace{\left[\hat{y},\hat{L}_y\right]}_{=0}\hat{p}_z-\hat{z}\underbrace{\left[\hat{p}_y,\hat{L}_y\right]}_{=0}+\underbrace{\left[\hat{z},\hat{L}_y\right]}_{II}\hat{p}_y\end{aligned}$$

حيث:

$$\begin{aligned}I &= \left[\hat{p}_z,\hat{L}_y\right]=\left[\hat{p}_z,\left(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z\right)\right]\\ &= \left[\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x\right]-\left[\hat{p}_z,\hat{x}\hat{p}_z\right]\\ &= \hat{z}\underbrace{\left[\hat{p}_z,\hat{p}_x\right]}_{=0}+\underbrace{\left[\hat{p}_z,\hat{z}\right]}_{=-i\hbar}\hat{p}_x-\hat{x}\underbrace{\left[\hat{p}_z,\hat{p}_z\right]}_{=0}+\underbrace{\left[\hat{p}_z,\hat{x}\right]}_{=0}\hat{p}_z=-i\hbar\hat{p}_x,\end{aligned}$$

و

$$\begin{aligned}II &= \left[\hat{z},\hat{L}_y\right]=\left[\hat{z},\left(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z\right)\right]\\ &= \left[\hat{z},\hat{z}\hat{p}_x\right]-\left[\hat{z},\hat{x}\hat{p}_z\right]\\ &= \hat{z}\underbrace{\left[\hat{z},\hat{p}_x\right]}_{=0}+\underbrace{\left[\hat{z},\hat{z}\right]}_{=0}\hat{p}_x-\hat{x}\underbrace{\left[\hat{z},\hat{p}_z\right]}_{=-i\hbar}+\underbrace{\left[\hat{z},\hat{x}\right]}_{=0}\hat{p}_z=-i\hbar\hat{x}\end{aligned}$$

أخيراً نجد أن:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\hat{y}\left(-i\hbar\hat{p}_x\right)-\left(-i\hbar\hat{x}\right)\hat{p}_y=i\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x\right)=i\hbar\hat{L}_z$$

وهو المطلوب إثباته.

مثال: أثبت أن

$$\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]=\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=i\hbar\hat{L}_x$$

الحل:

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]&=\left[\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z,\hat{L}_z\right]\\&=\left[\hat{z}\hat{p}_x,\hat{L}_z\right]-\left[\hat{x}\hat{p}_z,\hat{L}_z\right]\\&=\hat{z}\underbrace{\left[\hat{p}_x,\hat{L}_z\right]}_{=-i\hbar\hat{p}_y}+\underbrace{\left[\hat{z},\hat{L}_z\right]}_{=0}\hat{p}_x-\hat{x}\underbrace{\left[\hat{p}_z,\hat{L}_z\right]}_{=0}-\underbrace{\left[\hat{x},\hat{L}_z\right]}_{-i\hbar\hat{y}}\hat{p}_z\\&=i\hbar\left(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y\right)=i\hbar\hat{L}_x\end{aligned}$$

وهو المطلوب إثباته.

واجب منزلي: أثبت أن: $\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]=\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z=i\hbar\hat{L}_y$

واجب منزلي: أثبت أن:

$$1-\quad\left[\hat{L}_z,\hat{L}_y\right]=-i\hbar\hat{L}_x,\ \left[\hat{L}_x,\hat{L}_z\right]=-i\hbar\hat{L}_y,\ \left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]=-i\hbar\hat{L}_z$$

$$2-\quad\left[\hat{x},\hat{L}_x\right]=0,\ \left[\hat{x},\hat{L}_y\right]=i\hbar\hat{z},\ \left[\hat{x},\hat{L}_z\right]=-i\hbar\hat{y}$$

تعليق: حيث إن المؤثرات $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ غير متبادلة بعضها مع بعض، لذلك لا نستطيع قياس قيمها المميزة بدقة متناهية في آن واحد. من ثم فإنه لا توجد دالة مميزة مشتركة بين أي اثنتين من هذه المركبات؛ لهذا سوف نبحث عن مؤثر يتبادل معها، على سبيل المثال المؤثر $\hat{L}^2$.

مثال: أثبت أن

$$\left[L^2,\hat{L}_x\right]=0$$

الحل:

$$\begin{aligned}
\left[L^2,\hat{L}_x\right] &= \left[L_x^2+L_y^2+L_z^2,\hat{L}_x\right]\\
&= \left[\hat{L}_x^2,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x\right]\\
&= 0+\hat{L}_y\left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]\hat{L}_y+\hat{L}_z\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]\hat{L}_z\\
&= \hat{L}_y\left(-i\hbar\hat{L}_z\right)+\left(-i\hbar\hat{L}_z\right)\hat{L}_y+\hat{L}_z\left(-i\hbar\hat{L}_y\right)+\left(-i\hbar\hat{L}_y\right)\hat{L}_z\\
&= i\hbar\left[\hat{L}_z,\hat{L}_y\right]+i\hbar\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]\\
&= i\hbar\left(-i\hbar\hat{L}_x\right)+i\hbar\left(i\hbar\hat{L}_x\right)\\
&= 0
\end{aligned}$$

واجب منزلي: أثبت أن

$$\left[L_x^2,\hat{L}_x\right]=\left[L^2,\hat{L}_y\right]=\left[L^2,\hat{L}_z\right]=0$$

مثال: اعتبر الدالة $f(|\boldsymbol{r}|)\equiv f(r)$ متماثلة كروياً للمتجه $\boldsymbol{r}$، حيث $|\boldsymbol{r}|=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$. احسب $\left[\hat{L}_z,f(r)\right]$ وفسر النتيجة.

الحل:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_z,f(r)\right]\psi &= \hat{L}_z f(r)\psi-f(r)\hat{L}_z\psi=\\
&= i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)f\psi-f\;i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi\\
&= i\hbar\psi\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)f+\cancel{f\;i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi}-\cancel{f\;i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi}\\
&= i\hbar\left(y\frac{\partial f}{\partial x}-x\frac{\partial f}{\partial y}\right)\psi\\
&= i\hbar\left(y\frac{x}{r}-x\frac{y}{r}\right)\psi=0
\end{aligned}$$

نجد أن $\hat{L}_z$ و $f(r)$ متبادلان، ولهذا فإنهما يشتركان في نفس الدالة المميزة.

في هذا المثال تم استخدام العلاقات التالية:

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{\partial f(r)}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x}=\frac{x}{r},\qquad \frac{\partial f}{\partial y}=\frac{\partial f(r)}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y}=\frac{y}{r}$$

٣- كمية الحركة الزاوية في الإحداثيات الكروية

باستخدام الإحداثيات الكروية (ملحق A.٦) وجدنا أن:

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
\hat{L}_y &= i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
\hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\\
\hat{L}^2 &= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]
\end{aligned}
\qquad (٤)
$$

نلاحظ هنا أن مؤثرات الحركة الزاوية تعتمد على إحداثيتين فقط، هما (θ,φ) بعد أن كانت تعتمد على ثلاث إحداثيات في الإحداثيات الكرتيزية.

واجب منزلي: أثبت أن المؤثر $-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ هو مؤثر هيرميتي.

والدالة الموجية في الإحداثيات الكروية تكتب على الصورة $|r,\theta,\varphi>$، وبإمكاننا كتابتها بالشكل:

$$
|r,\theta,\varphi\rangle = |r\rangle|\theta\rangle|\varphi\rangle = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)
$$

ومن ثم فإن شرط المعايرة يتطلب:

$$
\langle r,\theta,\varphi|r,\theta,\varphi\rangle = \int_0^\infty \langle r|r\rangle r^2 dr \int_0^\pi \langle\theta|\theta\rangle \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} \langle\varphi|\varphi\rangle d\varphi = 1 \qquad (٥)
$$

ملاحظات

أ- حيث إن المؤثر $\hat{L}^2$ يحقق خاصية التبادل مع كل مركبة من المركبات الثلاث $\hat{L}_x$، $\hat{L}_y$، $\hat{L}_z$ فإننا نستطيع أن نجد دالة مميزة آنية للمؤثر $\hat{L}^2$ وأي مركبة من المركبات الثلاث.

ب- حيث إن المركبات الثلاث $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ لا تحقق خاصية التبادل مع بعضها، فإننا نستطيع قياس القيم المتوقعة لكمية الحركة الزاوية الكلية $\hat{L}^2$ وإحدى المركبات فقط، ولنفترض أن هذه المركبة هي $\hat{L}_z$.

ج- اختيار المؤثر $\hat{L}_z$ ليس هو الاختيار الوحيد، وقد جرى العرف على اختياره لسهولة التعبير عن صورته في الإحداثيات الكروية.

---

i- الدوال المميزة والمشتركة للمؤثرين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$

حيث إن $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ يحققان خاصية التبادل، بمعنى أن $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right]=0$ ، فإنه يمكننا تعريف دالة مشتركة مميزة للمؤثرين. تعتمد هذه الدالة المشتركة على إحداثيتين فقط، هما (θ,φ) ، ولنفترضها $|\theta,\varphi\rangle$. بالطبع بالإمكان إضافة الإحداثية الثالثة r إلى الدالة لتصبح $|r,\theta,\varphi\rangle$ ، لكننا سوف نتغاضى عن إضافتها في شرحنا التالي. والآن يجب أن نفكر في إيجاد القيم المميزة للمعادلتين:

$$\hat{L}_z\,|\theta,\varphi\rangle = b\,|\theta,\varphi\rangle \tag{a6}$$

$$\hat{L}^2\,|\theta,\varphi\rangle = c\,|\theta,\varphi\rangle \tag{b6}$$

حيث إن $b,\ c$ هي القيم المميزة للمؤثرين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$.

---

ii- القيم المميزة للمؤثر $\hat{L}_z$

نبدأ بالمعادلة (a6) ونستخدم $\hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ لنحصل على

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}|\theta,\varphi\rangle = b\,|\theta,\varphi\rangle \tag{٧}$$

وباستخدام فصل المتغيرات $|\theta,\varphi\rangle=|\theta\rangle|\varphi\rangle$ نصل للمعادلة

$$\frac{d\,|\varphi\rangle}{|\varphi\rangle}=\frac{ib}{\hbar}d\varphi \tag{٨}$$

وحلها هو:

$$|\varphi\rangle = Ae^{ib\varphi/\hbar} \qquad (٩)$$

حيث A هو ثابت اختياري ويحسب بواسطة معايرة الدالة $|\varphi\rangle$.

ملاحظات:

أ- الدالة (٩) غير مناسبة للاستخدام؛ وذلك لأننا لو غيرنا الزاوية φ بمقدار 2π فإننا سنعود لنفس النقطة، وهذا يعني أن الدالة تكرارية القيم.

ب- لكي تصبح الدالة غير تكرارية القيم يجب أن نستخدم العلاقة:

$$|\varphi\rangle = |\varphi + 2\pi\rangle$$

لنحصرها في المدى $\varphi = \{0, 2\pi\}$ ومن ثم فإن الشرط:

$$Ae^{ib\varphi/\hbar} = Ae^{ib\varphi/\hbar}e^{ib2\pi/\hbar}$$

يعني أن $e^{ib2\pi/\hbar} = 1$. ولكي يتحقق هذا الشرط فإن:

$$2\pi(b/\hbar) = 2\pi m,$$
$$\Rightarrow b = m\hbar \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

وأخيراً نجد أن:

$$\boxed{|\varphi\rangle = Ae^{im\varphi}}, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots \qquad (١٠)$$

ج- من المعادلة (١٠) نلاحظ أن القيم المميزة m للمؤثر $\hat{L}_z$ هي قيم مكممة (قيم منفصلة)، ويسمى m بالعدد الكمي المغناطيسي.

د- لحساب قيم A ، نستخدم خواص المعايرة:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \int_0^{2\pi}\left(Ae^{im\varphi}\right)^*\left(Ae^{im\varphi}\right)d\varphi = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}}.$$

---

iii- القيم المميزة للمؤثر $\hat{L}^2$

نستخدم المؤثر $\hat{L}^2$ من المعادلة (٤) في الإحداثيات الكروية ليؤثر على الدالة $|\theta,\varphi\rangle$:

$$\hat{L}^2\left|\theta,\varphi\right\rangle=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\left|\theta,\varphi\right\rangle \qquad (١١)$$

وبفرض أن:

$$\hat{L}^2\left|\theta,\varphi\right\rangle=c\left|\theta,\varphi\right\rangle=\hbar^2 l(l+1)\left|\theta,\varphi\right\rangle \qquad (١٢)$$

وباستخدام $\left|\theta,\varphi\right\rangle=\left|\theta\right\rangle\left|\varphi\right\rangle$ حيث $\left|\varphi\right\rangle=\dfrac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ بالمعادلة (١١) نجد أن:

$$-\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\left|\theta\right\rangle e^{im\varphi}=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\sqrt{2\pi}}\left|\theta\right\rangle e^{im\varphi} \qquad (١٣)$$

وبحذف الدالة $\left|\varphi\right\rangle$ واستخدام قيمها المميزة من المعادلة $\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\left|\varphi\right\rangle=-m^2\left|\varphi\right\rangle$ نجد أن المعادلة (١٣) تؤول إلى:

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\right\}\left|\theta\right\rangle=0 \qquad (١٤)$$

المعادلة (١٤) هي معادلة ليجندر التفاضلية (انظر: الملحق B) وحلها يعطى بدلالة دالة ليجندر المترافقة $P_l^m(\cos\theta)$ بالشكل:

$$\left|\theta\right\rangle=C_{lm}P_l^m(\cos\theta) \qquad (١٥)$$

حيث إن

$$P_l^m(x)=\left(1-x^2\right)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x), \qquad P_l^{-m}(x)=P_l^m(x)$$

و

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l, \qquad P_l(-x)=(-)^l P_l(x)$$

واجب منزلي: أثبت أن

$$P_o(x)=1,\quad P_1(x)=x,\quad P_2(x)=\tfrac{1}{2}(3x^2-1),$$
$$P_1^1(x)=\sqrt{1-x^2},\quad P_2^1(x)=3x\sqrt{1-x^2},\quad P_2^2(x)=3(1-x^2)$$

وباستخدام علاقة المعايرة لدالة ليجندر في الصورة:

$$\int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta)P_{l'}^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'} \qquad (١٦)$$

بالإمكان حساب C_{lm} حيث إن

$$<\theta,\varphi|\theta,\varphi> = \frac{|C_{lm}|^2}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} |P_l^m(\cos\theta)|^2 \sin\theta d\theta = 1 \qquad (١٧)$$

ومن ثم فإن

$$C_{l,m} = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}, \qquad (١٨)$$

ولهذا فإن:

$$\begin{aligned} |\theta,\varphi\rangle &= (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \\ &\equiv Y_{l,m}(\theta,\varphi) \end{aligned} \qquad (١٩)$$

حيث $l \geq m$. وتعرف $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ بدوال التوافقيات الكروية العيارية، (انظر: الملحق B).

واجب منزلي: أثبت أن

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,$$

$$Y_{1\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

مثال: للدالة:

$$|l,m\rangle = (6-r)re^{-r/3}\cos\theta$$

حدد قيم كل من m و l.

الحل: للتبسيط سوف نضع الدالة المعطاة في الصورة:

$$\left|l,m\right\rangle = \underbrace{(6-r)re^{-r/3}}_{f(r)}\underbrace{\cos\theta}_{f(\theta)}$$
$$= f(r)f(\theta)$$

وبما أن الدالة المعطاة لا تعتمد على الزاوية φ لذاك فإن $m = 0$.

وكطريقة عامة، لإيجاد قيم m نستخدم العلاقة:

$$\hat{L}_z\psi = f(r)f(\theta)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}f(\varphi)\right] = 0$$
$$\Rightarrow \quad m = 0$$

ولإيجاد قيم l نستخدم العلاقة:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2\psi &= \hat{L}^2 f(r)\cos\theta \\ &= -\hbar^2 f(r)\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\cos\theta \\ &= \hbar^2 2f(r)\cos\theta\end{aligned}$$

ونقارنها بالصيغة العامة:

$$\hat{L}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi$$

لنجد أن $l = 1$.

مثال: احسب $<\hat{L}_z>$ و $<\hat{L}_z^2>$ للدالة الآتية:

$$\psi(r) = \sum_l a_{l,m_l}\left|l,m_l\right\rangle = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left[3\left|0,0\right\rangle + 2\left|1,1\right\rangle - \left|1,0\right\rangle + \sqrt{10}\left|1,-1\right\rangle\right]$$

الحل: من الدالة $\psi(r)$ نجد أن السعة a_{l,m_l} لكل مركبة هي:

$$a_{0,0} = \frac{3}{2\sqrt{6}}, \quad a_{1,1} = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad a_{1,0} = -\frac{1}{2\sqrt{6}}, \quad a_{1,-1} = \frac{\sqrt{10}}{2\sqrt{6}}$$

وهي دالة معيرة لأن:

$$\sum_l |a_{l,m_l}|^2 = 1$$

ومن ثم فإن:

$$\begin{aligned}\langle L_z \rangle &= \sum_l m_l \hbar |a_{l,m_l}|^2 \\ &= (0\,\hbar)|a_{0,0}|^2 + (0\,\hbar)|a_{1,0}|^2 + (\hbar)|a_{1,1}|^2 + (-\hbar)|a_{1,-1}|^2 \\ &= (0\,\hbar)\left(\frac{9}{24}+\frac{1}{24}\right) + (\hbar)\left(\frac{4}{24}\right) + (-\hbar)\left(\frac{10}{24}\right) \\ &= -\frac{1}{4}\hbar,\end{aligned}$$

و

$$\begin{aligned}\langle \hat{L}_z^2 \rangle &= \sum_l (m_l\hbar)^2 |a_{l,m_l}|^2 \\ &= (0\,\hbar)^2|a_{0,0}|^2 + (0\,\hbar)^2|a_{1,0}|^2 + (\hbar)^2|a_{1,1}|^2 + (-\hbar)^2|a_{1,-1}|^2 \\ &= (0\,\hbar^2)\left(\frac{9}{24}+\frac{1}{24}\right) + (\hbar^2)\left(\frac{4}{24}\right) + (\hbar^2)\left(\frac{10}{24}\right) \\ &= \frac{7}{12}\hbar^2\end{aligned}$$

مثال: لمستوى يوصف بالدالة الموجية المتصلة:

$$\psi(\varphi) = A\sin^2\varphi$$

١- تأكد من حساب الثابت A باستخدام معايرة الدالة كالتالي:

$$\int \psi^2(\varphi)d\varphi = A^2\int_0^{2\pi}\sin^4\varphi\, d\varphi = A^2\left(\frac{3\pi}{4}\right) = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}}$$

٢- استخدم مفكوك $\sin^2\varphi$ ومنها تأكد من حساب قيم m المختلفة كالآتي:

$$\sin^2\varphi = \left(\frac{e^{i\varphi}-e^{-i\varphi}}{2i}\right)^2 = \left(\frac{2}{4} - \frac{1}{4}e^{\overset{m=2}{\overbrace{2}}\, i\varphi} - \frac{1}{4}e^{\overset{m=-2}{\overbrace{-2}}\, i\varphi}\right)$$

ومن ثم فإن قيم m الثلاث هي $2, 0, -2$:

ومنها نجد أن السعات a_m لكل مركبة هي:

$$a_0 = \frac{2}{4}, \quad a_2 = -\frac{1}{4}, \quad a_{-2} = -\frac{1}{4}$$

٣- تأكد من أن احتمالية وجود الجسيم لقيم m المختلفة هي:

$$P(m = 0) = (2\pi)A^2 \times \frac{4}{16} = (2\pi)\left(\frac{4}{3\pi}\right)\times\frac{4}{16} = \frac{2}{3},$$

$$P(m = 2) = P(m = -2) = (2\pi)A^2 \times \frac{1}{16} = (2\pi)\left(\frac{4}{3\pi}\right)\times\frac{1}{16} = \frac{1}{6}$$

حيث 2π تعبر عن الدورة الكاملة.

٤- تأكد من قيم $< L_z >, < L^2_z >$ التالية:

$$\langle L_z \rangle = \sum_i m_i \hbar \,|\, a_{m_i} |^2 = (0\,\hbar)^2 |a_0|^2 + (+\hbar)|a_2|^2 + (-\hbar)|a_{-2}|^2$$
$$= (0\times\frac{2}{3} + 2\times\frac{1}{6} - 2\times\frac{1}{6})\hbar = 0,$$

و

$$\langle \hat{L}_z^2 \rangle = \sum_i (m_i\hbar)^2 \,|\, a_{m_i} |^2 = (0\,\hbar)^2 |a_0|^2 + (2\,\hbar)^2 |a_2|^2 + (-2\hbar)^2 |a_{-2}|^2$$
$$= (0^2 \times\frac{2}{3} + 2^2 \times\frac{1}{6} + 2^2 \times\frac{1}{6})\hbar = \frac{4}{3}\hbar^2$$

ملحوظة: يمكن التعامل مع هذه الدالة كدالة غير متصلة لنحصل على A من معايرة الدالة كالتالي:

$$\sum P_i = A^2\left(|a_0|^2 + |a_2|^2 + |a_{-2}|^2\right) = 1 \qquad \Rightarrow A^2\left(\frac{4}{16} + \frac{1}{16} + \frac{1}{16}\right) = 1$$
$$\Rightarrow A = 2\sqrt{\frac{2}{3}}$$

وتحسب احتمالية وجود الجسيم لقيم m المختلفة كالتالي:

$$P(m = 0) = A^2 \times |a_0|^2 = \frac{8}{3}\times\frac{4}{16} = \frac{4}{16} = \frac{2}{3},$$

$$P(m = 2) = P(m = -2) = A^2 \times |a_2|^2 = \frac{8}{3}\times\frac{1}{16} = \frac{1}{6}$$

مثال: الهملتونيان للجسم الجاسىء الدوراني (Rigid Rotator) يعطى بالعلاقة $\hat{H}=\dfrac{\hat{L}^2}{2I}$

حيث إن القيمة $|\hat{L}^2|$ تعطى بالعلاقة: $|\hat{L}^2|=\hbar^2 l(l+1)$ ويوصف بالدالة

$$|\theta,\varphi\rangle = N\left[\underbrace{1}_{a_{0,0}}Y_{0,0}+\underbrace{(1+3i)}_{a_{1,-1}}Y_{1,-1}+\underbrace{2}_{a_{2,-1}}Y_{2,-1}+\underbrace{1}_{a_{2,0}}Y_{2,0}\right]$$

تأكد من التالي:

١. حساب N باستخدام شرط المعايرة $N^2\sum\limits_{l,m}|a_{l,m}|^2=1$:

$$N^2\left[1+(1+3i)(1-3i)+4+1\right]=N^2\left[1+(1+9)+4+1\right]=1$$
$$\Rightarrow N=1/4$$

٢. حساب احتمال وجود الجسم في المستوى $l=0$

$$P(l=0)=N^2|a_{0,0}|^2$$
$$=\frac{1}{4^2}=\frac{1}{16}$$

٣. حساب احتمال وجود الجسم في المستوى $m=0$

$$P(m=0)=N^2\left[|a_{0,0}|^2+|a_{2,0}|^2\right]$$
$$=\frac{1+1}{4^2}=\frac{1}{8}$$

٤. حساب احتمال وجود الجسم في المستوى $L_z=-\hbar$

$$P(L_z=-\hbar)=N^2\left[|a_{1,-1}|^2+|a_{2,-1}|^2\right]$$
$$=\frac{10+4}{4^2}=\frac{7}{8}$$

٥. حساب احتمال وجود الجسم في المستوى $L^2=6\hbar^2$

$$P(L^2=6\hbar^2\Rightarrow l=2)=N^2\left[|a_{2,-1}|^2+|a_{2,0}|^2\right]$$
$$=\frac{4+1}{4^2}=\frac{5}{16}$$

٦. حساب احتمال وجود الجسم في المستوى $E=2\hbar^2/2I$

$$P(E = \frac{\hbar^2}{2I} 1(1+1) \Rightarrow l = 1) = N^2 \left[|a_{1,-1}|^2 \right]$$
$$= \frac{9+1}{4^2} = \frac{5}{8}$$

٧. حساب $<E>$

$$\langle E \rangle = \sum_{l,m} \frac{\langle \theta,\varphi | \hat{L}^2 | \theta,\varphi \rangle}{2I} = \frac{N^2}{2I} \sum_{l,m} |a_{l,m}|^2 \, l(l+1)\hbar^2$$
$$= \frac{N^2}{2I} \left[0(0+1)\hbar^2 + 10 \times 1(1+1)\hbar^2 + (4+1) \times 2(2+1)\hbar^2 \right]$$
$$= \frac{25}{16I} \hbar^2$$

٤- المؤثرات التصاعدية والتنازلية

لقد عَرفنا في الفصل السابق العلاقات الآتية

$$\hat{L}^2 |l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l,m\rangle$$

و

$$\hat{L}_z |l,m\rangle = m\hbar |l,m\rangle$$

للمؤثرين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ ولكننا لم نحدد ما هو الارتباط بين قيمهما. لكننا نعلم أيضاً من علاقات التبادل:

$$\left. \begin{array}{l} \left[\hat{L}_j, \hat{L}_k \right] = i\hbar \hat{L}_l \, , \\ \left[\hat{L}^2, \hat{L}_j \right] = 0 \end{array} \right\} \qquad (j,k,l \text{ cyclic})$$

إن قيم l و m يجب أن تكون قيماً حقيقية. ولإيجاد العلاقة بينهما سوف نُعرف المؤثرات التصاعدية والتنازلية كالتالي:

$$\hat{L}_+ \equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y \qquad (٢٠)$$

$$\hat{L}_- \equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y \qquad (٢١)$$

واجب منزلي: أثبت أن

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+ + \hat{L}_-\right), \quad \hat{L}_y = \frac{1}{2i}\left(\hat{L}_+ - \hat{L}_-\right)$$

مثال: أثبت أن: $\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$

الحل: باستخدام التعريفات السابقة لكل من $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ نجد أن:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+\hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \\
&= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i\left(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x\right) \\
&= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] \\
&= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hbar\hat{L}_z = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z
\end{aligned}$$

وهو المطلوب.

واجب منزلي: أثبت أن

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$$

واجب منزلي: أثبت أن

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{L}_\pm, \quad \left[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm\right] = 0, \quad \left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right] = 2\hbar\hat{L}_z, \quad \hat{L}_\pm^\dagger = \hat{L}_\mp$$

وبعد أن عرفنا $\hat{L}_-$ و $\hat{L}_+$، كيف نستفيد من تعريفهما؟ لنعرف إجابة السؤال دعونا نتبع الخطوات التالية:

أ- نؤثر على الدالة $|l,m>$ بالمؤثر $\hat{L}_+$ أولا وبعدها بالمؤثر $\hat{L}_z$ مع استخدامنا العلاقة $\left[\hat{L}_z, \hat{L}_+\right] = \hbar\hat{L}_+$، فنحصل على:

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\left(\hat{L}_+|l,m\rangle\right) &= \left\{\hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+\right\}|l,m\rangle \\ &= \left\{m\hbar\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_+\right\}|l,m\rangle \\ &= (m+1)\hbar\left(\hat{L}_+|l,m\rangle\right)\end{aligned} \qquad (٢٢)$$

المعادلة (٢٢) هي معادلة مميزة للمؤثر $\hat{L}_z$ حيث الدالة المميزة هي $\hat{L}_+|l,m\rangle$ والقيمة المميزة هي $(m+1)\hbar$. لاحظ هنا أن القيمة المميزة قد زادت بمقدار $\hbar$، ولهذا يسمى المؤثر $\hat{L}_+$ بالمؤثر التصاعدي (Raising Operator).

ب- نتبع نفس الخطوات السابقة ولكن بالمؤثر $\hat{L}_-$ أولا وبعدها بالمؤثر $\hat{L}_z$، ونستخدم العلاقة $\left[\hat{L}_z,\hat{L}_-\right] = -\hbar\hat{L}_-$ فنحصل على:

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\left(\hat{L}_-|l,m\rangle\right) &= \left\{\hat{L}_-\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_-\right\}|l,m\rangle \\ &= \left\{m\hbar\hat{L}_- - \hbar\hat{L}_-\right\}|l,m\rangle = (m-1)\hbar\left(\hat{L}_-|l,m\rangle\right)\end{aligned} \qquad (٢٣)$$

المعادلة (٢٣) هي معادلة مميزة للمؤثر $\hat{L}_z$ حيث الدالة المميزة هي $\left(\hat{L}_-|l,m\rangle\right)$، والقيمة المميزة هي $(m-1)\hbar$. مقدار القيمة المميزة قد نقص هنا بمقدار $\hbar$، ولهذا يسمى المؤثر $\hat{L}_-$ بالمؤثر التنازلي (Lowering Operators).

ج- ولنا هنا سؤال: ماذا يحدث لو أثرنا بالمؤثر $\hat{L}_+$ على الدالة $|l,m>$ تأثيراً متكرراً لا نهاية له؟ الجواب: إننا سنحصل على زيادة كبيرة جداً في قيمة m، مع افتراض ثبوت قيمة l الابتدائية، التي تجعل قيمة $\hat{L}^2-\hat{L}_z^2$ كمية سالبة. سؤال آخر: هل بالإمكان الحصول على قيمة سالبة للمؤثر $\hat{L}^2-\hat{L}_z^2$؟ الإجابة هي: هذا غير ممكن؛ لأننا نعلم أن $\hat{L}^2-\hat{L}_z^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2 \geq 0$. فما الحل إذن؟

الحل: هو أن نفترض قيمة عليا، نسميها $m_{\max}$، بحيث إن $\hat{L}_+|l,m_{\max}\rangle = 0$.

دعونا الآن نؤثر بالمؤثر $\hat{L}^2-\hat{L}_z^2$ على الدالة $|l,m_{\max}\rangle$:

$$\left\{\hat{L}^2-\hat{L}_z^2\right\}|l,m_{\max}\rangle = \left\{\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_z\right\}|l,m_{\max}\rangle \qquad (٢٣)$$

الطرف الأيمن يعطي:

$$\left\{\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_z\right\}|l,m_{\max}\rangle = 0 + m_{\max}\hbar^2|l,m_{\max}\rangle \qquad \text{(a24)}$$

الطرف الأيسر يعطي:

$$\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \left| l, m_{\max} \right\rangle = \hat{L}^2 \left| l, m_{\max} \right\rangle - m_{\max}^2 \hbar^2 \left| l, m_{\max} \right\rangle \qquad \text{(b24)}$$

بمساواة (a 24) و(b 24) نجد أن:

$$\hat{L}^2 \left| l, m_{\max} \right\rangle = m_{\max} \left(m_{\max} + 1 \right) \hbar^2 \left| l, m_{\max} \right\rangle \qquad (٢٦)$$

المعادلة (٢٦) معادلة مميزة للمؤثر $\hat{L}^2$ بالقيمة المميزة $m_{\max}\left(m_{\max}+1\right)\hbar^2$. وبالمقارنة بالقيمة المميزة $l\left(l+1\right)\hbar^2$ نستطيع أن نضع $m_{\max} = l$.

نكرر الأسئلة نفسها بالخطوة ج ولكن للمؤثر $\hat{L}_-$، ومنها سنفترض قيمة دنيا (أقل قيمة) هي $m_{\min}$ بحيث إن: $\hat{L}_- \left| l, m_{\min} \right\rangle = 0$. والآن نتبع الخطوات نفسها السابقة بالخطوة ٤:

$$\left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \right) \left| l, m_{\min} \right\rangle = \left(\hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar \hat{L}_z \right) \left| l, m_{\min} \right\rangle \qquad (٢٧)$$

لنجد أن:

$$\hat{L}^2 \left| l, m_{\min} \right\rangle - m_{\min}^2 \hbar^2 \left| l, m_{\min} \right\rangle = 0 - m_{\min} \hbar^2 \left| l, m_{\min} \right\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 \left| l, m_{\min} \right\rangle = m_{\min} \left(m_{\min} - 1 \right) \hbar^2 \left| l, m_{\min} \right\rangle \qquad (٢٨)$$

المعادلة (٢٨) هي معادلة مميزة للمؤثر $\hat{L}^2$ بالقيمة المميزة $m_{\min}\left(m_{\min} - 1\right)\hbar^2$. لكننا افترضنا سابقاً أن القيمة المميزة للمؤثر $\hat{L}^2$ هي $l\left(l+1\right)\hbar^2$، فما الحل؟ للإجابة عن هذا السؤال؛ دعونا نساوي بين $l\left(l+1\right)\hbar^2 = m_{\min}\left(m_{\min} - 1\right)\hbar^2$ لنحصل على معادلة من الدرجة الثانية وهي $l^2 + l - m_{\min}\left(m_{\min} - 1\right) = 0$ ولها الحل:

$$l = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4m_{\min}(m_{\min} - 1)}}{2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4m_{\min} + 4m_{\min}^2}}{2}$$
$$= \frac{-1 \pm \left(1 - 2m_{\min}\right)}{2}$$

ومنها نجد أن:

$$l = -m_{\min} \quad \text{or} \quad l = m_{\min} - 1 \qquad (٢٩)$$

لقد افترضنا سابقاً أن $m_{\min}$ هي القيمة الدنيا للقيم m ومن ثم فإن الحل $m_{\min} = -l$ يصبح هو المقبول والحل $l = m_{\min} - 1$ يصبح مرفوضاً.

بالخطوات السابقة عَينا العلاقات بين l, m والقيم المناظرة المميزة لكل من المؤثرين $\hat{L}_z$ و $\hat{L}^2$ ، ولكننا حتى الآن لا نعرف القيم المميزة "l" الحقيقية. والآن دعونا نُعينها: نحن نعلم أن قيم m حقيقية وصحيحة، بمعنى $(m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ ، والآن عرفنا أنها محددة من أعلى بالقيمة $l = m_{\max}$ ومن أسفل بالقيمة $m_{\min} = -l$. وبناءً على حسابات المؤثرات التصاعدية والتنازلية وجدنا أنها تتغير بقيم صحيحة، ومن ثم بالإمكان كتابة $m = -l, -l+1, \cdots, 0, \cdots, l-1, l$ وهذا يعنى:

$$
\begin{aligned}
m_{\max} = -m_{\min} + k \qquad & \Rightarrow \quad l = -l + k \\
& \Rightarrow \quad 2l = k
\end{aligned}
\tag{٣٠}
$$

حيث k قيم صحيحة (زوجية أو فردية). وهذه العلاقة تصبح صحيحة في حالتين: إما أن تأخذ l قيماً صحيحة أو تأخذ أنصاف قيم صحيحة فردية:

$$
l = \begin{cases} \text{Integer} \\ \dfrac{1}{2} \times \text{Odd Integer} \end{cases}
\tag{٣١}
$$

فأي الحلين نختار؟ **الحل:** هو الأخذ بقيم التجارب المعملية، وهي أن العزم الزاوي المداري للذرة هو عدد صحيح موجب، ومن ثم فإن l تأخذ قيماً صحيحة موجبة.

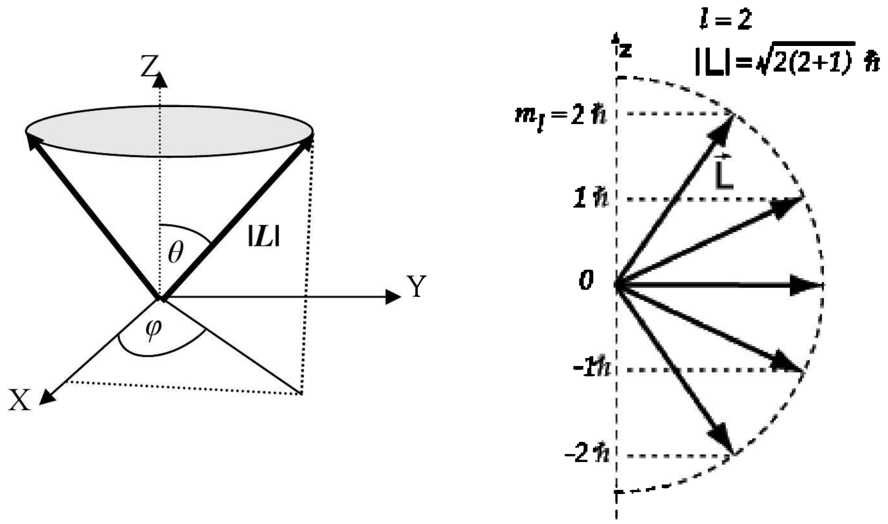
مثال: ماهى قيم $|\hat{L}|$ و $|\hat{L}_z|$ للحالة $l = 2$؟

الحل: قيم $|\hat{L}|$ و $|\hat{L}_z|$ للحالة $l = 2$ هي:

$$
\begin{aligned}
|\hat{L}| &= \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2(2+1)}\,\hbar = \sqrt{6}\,\hbar \\
|\hat{L}_z| &= m_l \hbar \equiv \{-2\hbar, -1\hbar, 0, 2\hbar, 1\hbar\}
\end{aligned}
$$

مثال: ارسم شكلا لقيم m_l المسموحة للحالة $l = 2$.

الحل:



(b) (a)

شكل (٣) تكميم العزم الزاوي للحالة $l = 2$ (a) العزم الزاوي بأخذ اتجاهات معينة فقط، تلك التي تكون مساقطة على المحور z (المركبة $|\hat{L}_z| = m_l\hbar = m\hbar$) عبارة عن مضاعفات صحيحة للعدد $\hbar$. (b) يدور $|\hat{L}|$ حول Z كمخروط نصف زاوية رأسه θ، $\cos\theta = \dfrac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$ مع ملاحظة أن اختيار المحور Z هو اختيار اعتباطي بحت، وذلك لسهولة التعامل مع المؤثر $\hat{L}_z$ والزاوية φ ليست لها علاقة باتجاه $|\hat{L}|$.

مثال : احسب مصفوفة كل من المؤثرات $\hat{L}_z$ و $\hat{L}^2$ للدالة $|l,m\rangle$ حيث $l = 1$.

الحل: حيث إن $l = 1$ لذلك فإن $m_l = 1,0,-1$ ومنها نحصل على مصفوفة 3×3.

من ثم فإن مصفوفة المؤثر $\hat{L}_z$ هي:

$$\left(\hat{L}_z\right) = <m'|\hat{L}_z|m> = m\hbar\underbrace{<m'|m>}_{\delta_{m'm}} = \hbar \begin{array}{cc} \begin{matrix} <11| & <10| & <1-1| \end{matrix} & \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{matrix} |11> \\ |10> \\ |1-1> \end{matrix} \end{array}$$

ومصفوفة المؤثر $\hat{L}^2$ هي:

$$\left(\hat{L}^2\right) = <l'|\hat{L}^2|l> = l(l+1)\hbar^2 \underbrace{<l'|l>}_{\delta_{l'l}} = 2\hbar^2 \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} <11| & <10| & <1-1| \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \\ |11> \\ |10> \\ |1-1> \end{array}$$

٥- نتائج مفصلة للمؤثرات التصاعدية والتنازلية

هنا نعطي إجابة عن السؤال التالي: ما الناتج من تأثير $\hat{L}_{\pm}$ على الدالة $|l, m>$؟

الإجابة: نبدأ بتأثير المؤثر التصاعدي $\hat{L}_+$ على الدالة $|l, m>$. وحيث إن $\hat{L}_+$ كان سبباً لزيادة m بمقدار الوحدة، فإننا يمكن كتابة

$$\hat{L}_+ \left| l,m \right\rangle = C_{m+1} \left| l,m+1 \right\rangle \qquad (32)$$

والمرافق له هو:

$$\left\langle l,m' \right| \hat{L}_- = C^*_{m+1} \left\langle l,m+1 \right| \qquad (٣٣)$$

لذلك فإن

$$\begin{aligned} \left\langle l',m' \right| \hat{L}_- \hat{L}_+ \left| l,m \right\rangle &= \left\langle l,m+1 \right| C^*_{m+1} C_{m+1} \left| l,m+1 \right\rangle \\ &= \left| C_{m+1} \right|^2 \underbrace{\left\langle l',m+1 \middle| l,m+1 \right\rangle}_{\delta_{ll}\delta_{m+1,m+1}=1} \end{aligned}$$

باستخدام العلاقة $\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z$ ، نجد أن:

$$\begin{aligned} \left| C_{m+1} \right|^2 &= \left\langle l,m \right| \hat{L}_- \hat{L}_+ \left| l,m \right\rangle = \left\langle l,m \right| \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \left| l,m \right\rangle \\ &= \left\langle l,m \right| l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - \hbar m \hbar \left| l,m \right\rangle \\ &= \hbar^2 \left(l(l+1) - m(m+1) \right) \underbrace{\left\langle l,m \middle| l,m \right\rangle}_{=1} \end{aligned}$$

ومنها نجد أن:

$$\left| C_{m+1} \right| = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \qquad (٣٣)$$

ومن ثم فإن:

$$\hat{L}_+\left|l,m\right\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\left|l,m+1\right\rangle \qquad (٣٤)$$

واجب منزلي: أثبت أن $\hat{L}_-\left|l,m\right\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\left|l,m-1\right\rangle$

مثال: أوجد المصفوفة التي تمثل المؤثر $\hat{L}_x$ للقيمة $l=1$.

الحل:

$$\hat{L}_x \mid l,m> = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)\mid l,m> = \frac{1}{2}\left[C_+ \mid l,m+1> + C_- \mid l,m-1>\right]$$

$$<l,m'\mid \hat{L}_x \mid l,m> = \frac{1}{2}\left[C_+ \underbrace{<l,m'\mid l,m+1>}_{\delta_{m',m+1}} + C_- \underbrace{<l,m'\mid l,m-1>}_{\delta_{m',m-1}}\right]$$

حيث:

$$C_+ = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)} = \sqrt{2},$$
$$C_- = \sqrt{l(l+1)-m(m-1)} = \sqrt{2}$$

ولذلك فإن:

$$\left(\hat{L}_x\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} <11\mid & <10\mid & <1-1\mid \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} + \frac{\hbar}{2}\begin{array}{cc} \begin{array}{ccc} <11\mid & <10\mid & <1-1\mid \end{array} & \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} & \begin{array}{c} \mid 11> \\ \mid 10> \\ \mid 1-1> \end{array} \end{array}$$

$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

مثال: احسب $\left\langle Y_{3,2}\middle|\hat{L}_x\middle|Y_{3,1}\right\rangle$

الحل:

أولاً: نستخدم العلاقة $\hat{L}_x = \left(\hat{L}_+ + \hat{L}_-\right)/2$ نجد

$$\left\langle Y_{3,2}\left|\hat{L}_x\right|Y_{3,1}\right\rangle = \frac{1}{2}\left(\left\langle Y_{3,2}\left|\hat{L}_+\right|Y_{3,1}\right\rangle + \left\langle Y_{3,2}\left|\hat{L}_-\right|Y_{3,1}\right\rangle\right)$$
$$= \frac{1}{2}\left(\left\langle Y_{3,2}\left|C_+\right|Y_{3,2}\right\rangle + \underbrace{\left\langle Y_{3,2}\left|C_-\right|Y_{3,0}\right\rangle}_{=C_-\delta_{3,3}\delta_{2,0}=0}\right) = \frac{C_+}{2}$$

ثانياً: باستخدام $l = 3, \quad m = 1$ نجد أن:

$$C_+ = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar\sqrt{3(4) - 1(2)}$$
$$= \hbar\sqrt{10}$$

لذلك فإن:

$$\left\langle Y_{3,2}\left|\hat{L}_x\right|Y_{3,1}\right\rangle = \hbar\frac{\sqrt{10}}{2}$$

مثال: احسب القيمة $< 2,0 | \hat{L}_-\hat{L}_+ | 2,0 >$.

الحل: الطريقة الأولى: نستخدم العلاقة $\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$ لنجد

$$< 2,0 | \hat{L}_-\hat{L}_+ | 2,0 > = < 2,0 | \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z | 2,0 >$$
$$= < 2,0 | 2(3)\hbar^2 - 0(1)\hbar^2 - 0\,\hbar^2 | 2,0 > = 6\hbar^2$$

الطريقة الثانية: نستخدم

$$< 2,0 | \hat{L}_-\hat{L}_+ | 2,0 > = < 2,0 | \hat{L}_- C_+ | 2,1 >$$
$$= C_+ < 2,0 | \hat{L}_- | 2,1 > = C_+ C_- = 6\hbar^2$$

حيث استخدمنا

$$C_+ = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar\sqrt{2(3) - 0(0+1)} = \hbar\sqrt{6},$$
$$C_- = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} = \hbar\sqrt{2(3) - 1(1-1)} = \hbar\sqrt{6}.$$

مثال: بمعرفة الدالة الموجية $|2,1> = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\, e^{i\varphi}$ احسب الدالة $|2,2>$.

الحل:

أولاً: نستخدم العلاقة

$$\hat{L}_+|2,1\rangle = C_+|2,2\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\,|2,2\rangle$$
$$= 2\hbar|2,2\rangle$$

ثانياً: نستخدم العلاقة

$$\hat{L}_+|2,1\rangle = \hbar e^{+i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}+i\,\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left(-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\, e^{i\varphi}\right)$$
$$= -\hbar\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\left(e^{i\varphi}\sin\theta\right)^2$$

بمساواة المعادلتين السابقتين في أولاً و ثانياً نجد أن:

$$|2,2\rangle = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\left(e^{i\varphi}\sin\theta\right)^2$$

مثال: بمعرفة الدالة الموجية $|1,0> = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$ احسب الدالة $|1,-1>$.

الحل:

أولاً: نستخدم العلاقة

$$\hat{L}_-|1,0\rangle = C_-|1,-1\rangle$$
$$= \hbar\sqrt{1(1+1)-0(0-1)}\,|1,-1\rangle = \sqrt{2}\hbar|1,-1\rangle$$

ثانياً: نستخدم العلاقة

$$\hat{L}_-|1,0\rangle = -\hbar e^{-i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}-i\,\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\right)$$
$$= \hbar\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$$

بمساواة المعادلتين السابقتين في أولاً و ثانياً نجد أن:

$$|1,-1\rangle = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}$$

٦- تمارين عامة

1- تحقق من العلاقات التالية:

$$a)\quad \sin\theta\cos\varphi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[-Y_{1,1}+Y_{1,-1}\right]$$

$$b)\quad \sin^2\theta\cos 2\varphi = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}\left[Y_{2,2}+Y_{2,-2}\right]$$

$$c)\quad xz = r^2\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left[-Y_{2,1}+Y_{2,-1}\right]$$

$$d)\quad x^2-y^2 = r^2\sqrt{\frac{8\pi}{15}}\left[Y_{2,2}+Y_{2,-2}\right]$$

$$e)\quad xy = \frac{r^2}{i}\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left[-Y_{2,2}+Y_{2,-2}\right]$$

$$f)\quad y = ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[Y_{2,2}-Y_{2,-2}\right]$$

٢- أثبت أن الدالة العيارية، $\psi(r) = -A(x+iy)e^{-r/2}$، بالإمكان وضعها على الصورة $\psi(r) = Ar\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1}e^{-r/2}$ و أثبت أن $A = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}$.

٣- أثبت أن:

$$\hat{L}_z\left(\cos^2\varphi-\sin^2\varphi+2i\cos\varphi\sin\varphi\right) = 2\hbar e^{2i\varphi}$$

٤- للدالة $|l,m\rangle$ حيث $l=1$. تأكد من حساب المصفوفات التالية:

$$\left(\hat{L}_x\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix};\quad \left(\hat{L}_y\right) = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$\left(\hat{L}_+\right)=\hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix};\quad \left(\hat{L}_-\right)=\hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$$

$$\left(\hat{L}_x\hat{L}_y\right)=\left(\hat{L}_x\right)\left(\hat{L}_y\right)\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}i&0&-i\\0&0&0\\i&0&-i\end{pmatrix};\qquad \left(\hat{L}_y\hat{L}_x\right)=\left(\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x\right)=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}-i&0&-i\\0&0&0\\i&0&i\end{pmatrix},$$

$$\left(\hat{L}_x\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_x\right)=i\hbar^2\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad \left(\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x\right)=i\hbar^2\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}=i\hbar\left(\hat{L}_z\right)$$

٥- للدالة $|l,m>$ تأكد من القيم:

$$\left\langle\hat{L}_x\right\rangle=\left\langle\hat{L}_y\right\rangle=0,\quad \left\langle\hat{L}_x^2\right\rangle=\left\langle\hat{L}_y^2\right\rangle=\frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1)-m^2\right]$$

$$\Delta\hat{L}_x\,\Delta\hat{L}_y\geq\frac{\hbar^2 m}{2},\ \text{where}\ \Delta\hat{L}_i=\sqrt{\left\langle\hat{L}_i^2\right\rangle-\left\langle\hat{L}_i\right\rangle^2}$$

٦- بمعرفة الدالة الموجية $|1,1>=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}$ أثبت أن $|1,0>=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$.

٧- أثبت أن

$$(a)\quad \left\langle Y_{3,2}\middle|\hat{L}_z\middle|Y_{3,2}\right\rangle=2\hbar,$$

$$(b)\quad \left\langle Y_{3,2}\middle|\hat{L}_x\middle|Y_{3,3}\right\rangle=\hbar\frac{\sqrt{6}}{2},$$

$$(c)\quad \left\langle Y_{3,2}\middle|\hat{L}_z\middle|Y_{3,1}\right\rangle=0$$

٨- أثبت العلاقة: $\boxed{\left(\Delta J_x\right)^2\left(\Delta J_y\right)^2\geq\frac{\hbar^2}{4}\left\langle J_z\right\rangle^2}$

٩- جسيم يوصف مستواه بالدالة المعايرة الآتية $|n,l,m_l>$:

$$|\psi>=\frac{1}{6}\left(4|1,0,0>+3|2,1,1>-i\,|2,1,0>+\sqrt{10}\,|2,1,-1>\right).$$

أثبت أن

$.<\hat{L}_z> = -\frac{1}{36}\hbar, <\hat{L}_z^2> = \frac{19}{36}\hbar^2, <\hat{L}^2> = \frac{10}{9}\hbar^2, <\hat{L}_y> = \hbar\frac{(2\sqrt{5}-3\sqrt{2})}{36}$

١٠- جسيم يوصف مستواه بالدالة المعايرة الآتية $|l, m_l>$:

$$\psi(r) = A\left[3|0,0\rangle + 2|1,1\rangle - |1,0\rangle + \sqrt{10}|1,-1\rangle\right]$$

أثبت أن $A = \frac{1}{2\sqrt{6}}$ ، $\langle \hat{L}^2 \rangle = 1.25\,\hbar^2$ ، $\langle \hat{L}_z \rangle = -0.25\,\hbar$ ، $\langle \hat{L}_z^2 \rangle = \frac{7}{12}\hbar^2$.

١١- تحقق من التالي:

$$a- \quad \sin\theta(\sin\varphi + \cos\theta\cos\varphi)$$
$$= -\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1} - \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,-1} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_{2,1} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_{2,-1}$$

وأثبت أنها دالة غير مميزة للمؤثرين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$.

$$b- \quad \sin\theta(1-\cos\theta)e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1} - \sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_{2,1}$$

وأثبت أنها دالة مميزة للمؤثر $\hat{L}_z$ فقط.

$$c- \quad \sqrt{\pi} - \sqrt{3\pi}\cos^2\theta = -\pi\sqrt{\frac{16}{5}}Y_{2,0}$$

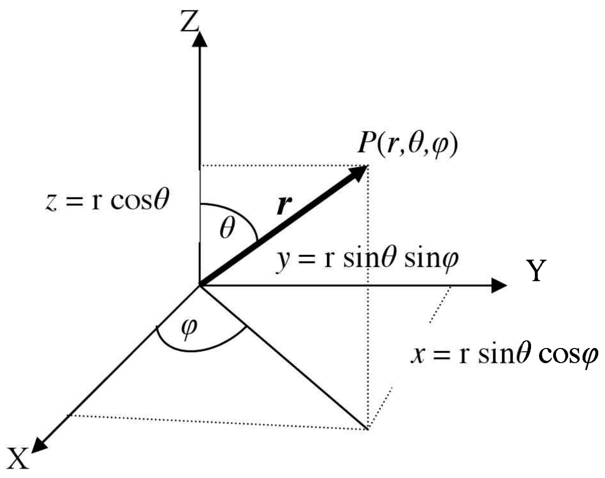
وأثبت أنها دالة مميزة للمؤثرين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$.

$$d- \quad \sin\theta\cos\varphi = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}Y_{1,1} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}Y_{1,-1}$$

وأثبت أنها دالة مميزة للمؤثر $\hat{L}^2$ فقط.

ملحق(6.A)

الإحداثيات القطبية الكروية



شكل (1) الإحداثيات القطبية الكروية

في الإحداثيات القطبية الكروية، تستخدم الزاويتان θ, φ في تحديد موقع النقطة P على سطح كرة نصف قطرها r (انظر شكل 1) بحيث إن: $|\boldsymbol{r}|=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$. من الشكل نجد أن θ زاوية السمت الرأسية (Zenith angle) تعرف بالعلاقة: $\cos\theta=\frac{z}{r}=\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$ وتتغير من 0 إلى π، وزاوية السمت φ (Azimuthal angle) تعرف بالعلاقة: $\tan\varphi=\frac{y}{x}$ وتتغير من 0 إلى 2π. يمكن ربط العلاقات الثلاث وعكسها في الإحداثيات القطبية الكروية والكرتيزية كالتالي:

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi, & |\boldsymbol{r}| &= \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi, & \theta &= \tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} \\ z &= r\cos\theta, & \varphi &= \tan^{-1}\frac{y}{x} \end{aligned}\right\} \qquad (١)$$

وعنصر الحجم هو $d\tau = r^2\, dr\, d\Omega$ حيث تأخذ r القيم من 0 إلى ∞ وتعرف بالزاوية المجسمة. $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$

واجب منزلي: من العلاقات (1) أثبت التفاضلات التالية:

$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi$	$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}$	$\frac{\partial x}{\partial \varphi} = -y$
$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\sin\varphi$	$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}$	$\frac{\partial y}{\partial \varphi} = x$
$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta$	$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial z}{\partial \varphi} = 0$

مثال: أثبت العلاقة:

$$\hat{L}_z \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

الحل: باستخدام التفاضلات من الجدول السابق نحصل على:

$$\begin{aligned} -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} &= -i\hbar\left(\underbrace{\frac{\partial x}{\partial\varphi}}_{-y}\frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{\frac{\partial y}{\partial\varphi}}_{x}\frac{\partial}{\partial y} + \underbrace{\frac{\partial z}{\partial\varphi}}_{0}\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ &= -i\hbar\left(-y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\right) = \hat{L}_z \end{aligned}$$

ينتج المطلوب.

واجب منزلي: تحقق من الحسابات التالية:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \underbrace{\frac{\partial r}{\partial x}}_{x/r}\frac{\partial}{\partial r} = \frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial r},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=\left(\frac{1}{r}-\frac{x^2}{r^3}\right)\frac{\partial}{\partial r}+\frac{x^2}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial r^2},$$

ومنها أثبت أن

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

واجب منزلي: أثبت العلاقات الآتية

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)=i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
\hat{L}_y &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)=i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\\
\hat{L}_\pm &\equiv \hat{L}_x\pm i\hat{L}_y=\pm\hbar e^{\pm i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\pm i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]
\end{aligned} \qquad (٢)$$

قيمة $\hat{L}^2$ بالمعادلة (٢) مهمة جداً وخصوصاً عند استخدامها بمعادلة شرودنجر:

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r), \qquad (٣)$$

حيث يأخذ المؤثر ∇^2 في الإحداثيات القطبية الكروية الشكل التالي:

$$\begin{aligned}
\nabla^2 &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\\
&= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}.
\end{aligned} \qquad (٤)$$

الباب السابع

ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة بالهيدروجين

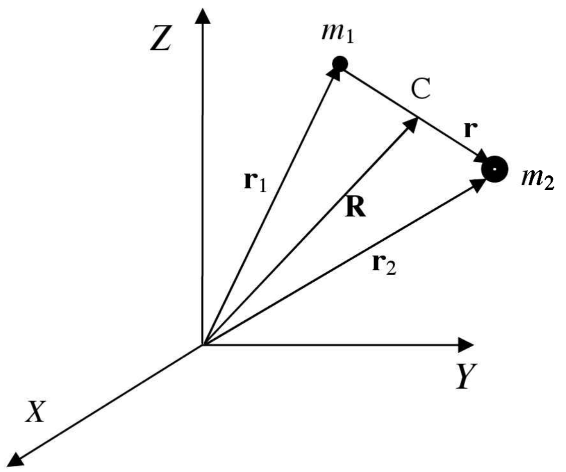
Hydrogen atom and Hydrogen-like atoms

الباب السابع

ذرة الهيدروجين والذرات الشبيهة

تعاملنا سابقاً مع ذرة الهيدروجين (والذرات الشبيهة بالهيدروجين) خلال نموذج بور (الباب الأول)، وهنا سوف نتعامل مع ذرة الهيدروجين باستخدام نظرية ميكانيكا الكم وحل معادلة شرودنجر، وقد تعاملنا سابقاً مع الأنظمة التي تحتوي على جسيم واحد فقط، وسنتعامل في هذا الباب مع نظام يحتوي على جسيمين. ولأنه من الصعب التعامل رياضياً مع جسيمين يتحركان ويؤثر كل منهما في الآخر، مما يؤدي إلى تضاعف الإحداثيات ودرجات الحرية، لذا سنبدأ بدراسة كيفية تبسيط مسألة ذات جسيمين إلى مسألة ذات جُسيم واحد، في هذا الجزء.

١- معادلة شرودنجر لنظام به جسيمان



شكل (١) **النظام العام لجسيمين.**

مقارنة بالميكانيكا التقليدية نفترض وجود جسيمين (انظر الشكل ١) كتلتهما m_1, m_2 .

والإحداثيات الكرتيزية للجسم m_1 هي: $\mathbf{r_1} \equiv (x_1, y_1, z_1)$ ،

والإحداثيات الكرتيزية للجسم m_2 هي: $\mathbf{r_2} \equiv (x_2, y_2, z_2),$

والمسافة بين الجسيمين هي: $\mathbf{r} = \mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}$

وإحداثيات مركز الثقل C هي: $\mathbf{R} = \dfrac{(m_1\mathbf{r_1} + m_2\mathbf{r_2})}{m_1 + m_2} = \dfrac{(m_1\mathbf{r_1} + m_2\mathbf{r_2})}{M}$

من تعريف المتغيرات $\mathbf{r}$ و $\mathbf{R}$ ، نجد أنه من السهل إثبات أن:

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{r}_1 &= \mathbf{R} - \frac{m_2}{M}\mathbf{r} \\ \mathbf{r}_2 &= \mathbf{R} + \frac{m_1}{M}\mathbf{r}\end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_1 &= \dot{\mathbf{R}} - \frac{m_2}{M}\dot{\mathbf{r}} \\ \dot{\mathbf{r}}_2 &= \dot{\mathbf{R}} + \frac{m_1}{M}\dot{\mathbf{r}}\end{aligned}$$ ،

وأن الطاقة الحركية الكلية هي:

$$T = \frac{m_1}{2}|\dot{\mathbf{r}}_1|^2 + \frac{m_2}{2}|\dot{\mathbf{r}}_2|^2 = \frac{M}{2}|\dot{\mathbf{R}}|^2 + \frac{\mu}{2}|\dot{\mathbf{r}}|^2 \text{ ،} \tag{١}$$

حيث $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$ تعرف بالكتلة المختزلة. بهذا فقد بسطنا كمية الحركة لجسيمين في إحداثيات (x_1, y_1, z_1) و (x_2, y_2, z_2) إلى كمية حركة لمركز الثقل وكمية الحركة للكتلة المختزلة. ومنها نجد أن الهاملتونيان:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(x, y, z) \tag{a2}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r) \tag{b2}$$

وعليه تكون معادلة شرودنجر بهذه الصورة:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R}) = E\,\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R}) \tag{٣}$$

باستخدام التعويض $E = E_r + E_R$ وفصل المتغيرات $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{R})$ حيث $\Psi(\mathbf{r})$ تمثل دالة الحركة النسبية و $\Psi(\mathbf{R})$ تمثل دالة حركة مركز الثقل فسوف نحصل على معادلتين:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\right]\Psi(\mathbf{R}) = E_R\Psi(\mathbf{R}) \tag{a4}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\Psi(\mathbf{r}) = E_r\Psi(\mathbf{r}) \tag{b4}$$

المعادلة (a4) تمثل معادلة موجة مستوية تصف حركة مركز الثقل كجسيم حر ($E_R \geq 0$) وحلها هو:

$$\Psi(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}.\mathbf{R}}, \qquad k^2 = \frac{2ME_R}{\hbar^2} \tag{٥}$$

المعادلة (b4) هي معادلة شرودنجر لجسيم مفترض، كتلته μ، ويقع في مجال جهد مركزي $V(\mathbf{r})$ وهي المعادلة الأساسية الرئيسة لذرة الهيدروجين والقيمة المميزة E_r هي القيمة التي نبحث عنها. ومن الآن سنستخدم E بدلاً من E_r للتبسيط.

٢- حركة جسيم تحت تأثير قوة مركزية جاذبة

القوة المركزية تشتق من دالة طاقة الوضع $V(\boldsymbol{r})$ التي لها تماثل كروي، بمعنى أنها دالة في المسافة بين الجسيم ونقطة الأصل. وهذا يعني أن $V \equiv V(r)$ والقوة الناشئة على الجسيم تعطي بالعلاقة $\mathbf{F} = -\dfrac{dV}{dr}\mathbf{e_r}$ حيث $\mathbf{e_r}$ هو متجه الوحدة في اتجاه زيادة القطر (انظر: الباب الأول، شكل ٣ b). والهملتونيان للجسيم في الإحداثيات الكروية هو:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \qquad (٦)$$

وقد استخدمنا العلاقات (انظر: ملحق **6.A**):

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r),$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2},$$

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

واجب منزلي: أثبت أن $\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{H}, \hat{L}^2\right] = 0$.

الخلاصة من هذا الواجب المنزلي: أن المؤثرات $\hat{H}, \hat{L}_z, \hat{L}^2$ لهن نفس الدالة المميزة $\psi = \psi_{nlm}$، بمعنى أن:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \qquad (a7)$$

$$\hat{L}_z\psi = m\hbar\psi, \quad m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l \tag{b7}$$

$$\hat{L}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi, \quad l = 0,1,2,\cdots \tag{c7}$$

وعليه تكون معادلة شرودنجر كالآتي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\Psi_{nlm} = E\Psi_{nlm} \tag{٨}$$

وباستخدام التعويض:

$$\Psi_{nlm} \equiv \Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \text{ ،}$$

فإن المعادلة (٨) تصبح:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R_{nl}(r) = ER_{nl}(r) \tag{٩}$$

وهذه هي المعادلة القطرية المطلوب إيجاد حلها العام.

وقبل أن نبدأ في حل المعادلة (٩) دعونا نستعرض بعض الملاحظات المهمة:

أ- شرط العيارية والتعامد للدالة $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ يتطلب:

$$\underbrace{\int_0^\infty R^*_{n',l'}(r)R_{n,l}(r)r^2dr}_{\delta_{n,n'}\delta_{l,l'}}\ \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l',m'}(\theta,\varphi)Y_{l,m}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi}_{\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}} = 1 \tag{١٠}$$

ب- لدراسة ذرة الهيدروجين (أو أي ذرة أخرى) فإننا نتعامل مع حلول لحالة مرتبطة، والحالة المرتبطة تعني أن الطاقة الكلية للنظام تكون سالبة، $(E < 0)$. مثال على ذلك ارتباط إلكترون (ذو شحنة سالبة) مع بروتون (ذو شحنة موجبة)، لتكوين حالة مرتبطة (وهي ذرة الهيدروجين)، وهذا يعني أننا يجب أن نبذل جهداً لفصلهما عن بعضهما.

ج- الدوال Ψ_{nlm} لا تكون فئة كاملة لاحتوائها على الحالات المرتبطة فقط بذات الطاقات السالبة $(E < 0)$، وعدم احتوائها على القيم الموجبة $(E > 0)$. الطاقات الموجبة تسمى طاقات التشتت (انظر: الباب الثامن عشر) أو طاقات الجسيم الحر.

د- الحالات المرتبطة يتميز النظام (الإلكترون) فيها بأنه محدد بمكان (Localized)، واحتمال وجوده عند مسافة بعيدة جداً عن مركز القوة الجاذبة يؤول إلى الصفر. لهذا يجب وضع الشرط الحدودي:

$$\lim_{r\to\infty} rR(r) = 0, \quad \Rightarrow \int_{all\ space} |rR(r)|^2\, dr < \infty \qquad (١١)$$

ه- هناك حد شرطي لازم آخر، وهو $\lim_{r\to 0} rR(r) = 0$ وذلك حتى ينعدم وجود الجسيم عند مركز القوة الجاذبة، وعندها لا يصبح عندنا أي نظام لدراسته.

و- حيث إن كل الحدود تتطلب $rR(r)$، فمن الممكن أن نستخدم التعويض $u(r) = rR(r)$ في حساب المعادلة (٩) لتصبح:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V_{eff}\right]u(r) = 0, \qquad (١٢)$$

مع والشروط الحدودية $\lim_{\substack{r\to 0\\ r\to\infty}} u(r) = 0$. $V_{eff} = -V(r) - \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ هو الجهد المؤثر.

خ- الجهد المؤثر V_{eff}، ناتج من جهدين: وهما: الأول: جهد إليكتروستاتيكي (Coulomb potential)، وهو جهد جاذب ناتج من اختلاف الشحنة، والثاني: جهد مركزي (Centrifugal potential) ناتج من قوى الطرد المركزي.

٣- حل المعادلة القطرية للذرات الشبيهة بالهيدروجين

نبدأ بالمعادلة القطرية (٩):

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R(r) = ER(r) \qquad (١٣)$$

بالنسبة لذرات الهيدروجين نستخدم جهد كولومب $V = -\dfrac{Ze^2}{r}$، حيث Ze تعبر عن شحنة النواة. بهذه الطريقة نستطيع أن نتعامل مع الذرات الشبيهة بالهيدروجين مثل $He^{+}, Li^{++}, Be^{+++}, \cdots$. باستخدام المتغير $\rho = \alpha r$ فإن المعادلة (١٣) تتحول إلى:

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial R(\rho)}{\partial r}\right)+\left[\underbrace{\frac{2\mu E}{\hbar^2\alpha^2}}_{=-\frac{1}{4}}+\underbrace{\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2\alpha\,\rho}}_{=\lambda/\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R(\rho)=0$$

أو إلى:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)R=0 \qquad (١٤)$$

حيث $\alpha=\sqrt{-8\mu E/\hbar^2}$, ولها وحدات المسافة، و $\lambda^2=\frac{2\mu Ze^2}{\alpha\hbar^2}=\frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{-2E}\right)^{1/2}$. ونحن هنا سنتعرض المستويات المرتبطة فقط، التي تعرف بالطاقة $E=-|E|$ ، ومن ثم تصبح α موجبة. اختيار القيمة $\frac{1}{4}$ هو اختيار لتبسيط الحل فقط.

معادلة (١٤) شبيهة بمعادلة مشهورة تدعى معادلة لاجير المرتبطة والمتعددة الحدود، (انظر: الملحق B)، وسوف نتعرض الآن لحلها بواسطة المتسلسلات. عند $(\rho\to\infty)$ فإن الحل التقاربي للمعادلة (١٤) يؤول إلى:

$$\frac{d^2R_\infty}{d\rho^2}+\frac{1}{4}R_\infty=0 \quad\Rightarrow\quad R_\infty\approx e^{\pm\rho/2} \qquad (١٥)$$

الحل ($e^{+\rho/2}$) هو حل مرفوض، لأن $\lim_{\rho\to\infty}e^{+\rho/2}=\infty$ لا يحقق شروط ميكانيكا الكم. ولحل (١٤) نفترض الحل الآتي:

$$R(\rho)=e^{-\rho/2}G(\rho) \qquad (١٦)$$

بالتعويض من (١٦) في (١٤) نحصل على

$$\frac{d^2G}{d\rho^2}-\left(1-\frac{2}{\rho}\right)\frac{dG}{d\rho}+\left[\frac{\lambda-1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]G=0 \qquad (١٧)$$

معادلة (١٧) متفردة عند النقطة $\rho=0$ (Singular point)، ولهذا يجب أن نتخلص من هذه النقطة، باستخدام التعويض.

$$G(\rho)=\rho^s\sum_\nu a_\nu\rho^\nu=\rho^sL(\rho), \qquad a_o\neq0, s\geq0 \qquad (١٨)$$

وبالتعويض في (١٧) نحصل على

$$\rho^2 \frac{d^2L}{d\rho^2} + \rho\left[2(s+1) - \rho\right]^2 \frac{dL}{d\rho} + \left[\rho(\lambda - s - 1) + s(s+1) - l(l+1)\right]L = 0 \quad (١٩)$$

والآن، عند وضع $\rho = 0$ بالمعادلة (١٩) نحصل على المعادلة:

$$s(s+1) - l(l+1) = 0 \quad \Rightarrow \quad (s-l)(s+l+1) = 0$$

ومنها نجد أن s تأخذ القيم $s = l$ و $s = -(l+1)$. ويؤهلنا الشرط $\lim\limits_{r \to 0} rR(r) = 0$ لحذف الحل $s = -(l+1)$. (لاحظ أيضاً الشرط الخاص بالقيمة s المعطى بالمعادلة (١٨)).

$$\frac{d^2L}{d\rho^2} + \left[\frac{2l+2}{\rho} - 1\right]\frac{dL}{d\rho} + \left[\frac{(\lambda - l - 1)}{\rho}\right]L = 0 \quad (٢٠)$$

باستخدام التعويض $L(\rho) = \sum\limits_{\nu} a_\nu \rho^\nu$ فإن (٢٠) تعطى:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}[\nu(\nu-1)a_\nu\rho^{\nu-2} + \nu(\frac{2l+2}{\rho} - 1)a_\nu\rho^{\nu-1} + (\lambda - l - 1)a_\nu\rho^{\nu-1}] = 0 \quad (٢١)$$

بالتعويض في الحد الأول بالقيمة $K = \nu - 1$ والحدين الآخرين بالقيمة $K = \nu$، فإن المعادلة (٢١) تأخذ الشكل المكافئ:

$$\sum_{K=0}^{\infty}\left\{(K+1)(K+2l+2)a_{K+1} + (\lambda - 1 - l - K)a_K\right\}\rho^{K-1} = 0 \quad (٢٢)$$

ومنها نجد العلاقة:

$$\frac{a_{K+1}}{a_K} = \frac{K + l + 1 - \lambda}{(K+1)(K+2l+2)} \underset{K\to\infty}{\approx} \frac{1}{K} \quad (٢٣)$$

ملحوظة مهمة جداً: نقارن المعادلة (٢٣) بالمتسلسلة $e^{+\rho}$ التي تعطي:

$$e^\rho = 1 + \rho + \frac{\rho^2}{2!} + \cdots + \frac{\rho^K}{K!} + \frac{\rho^{K+1}}{(K+1)!} \Rightarrow \frac{a_{K+1}}{a_K} = \frac{1}{(K+1)} \underset{K\to\infty}{\approx} \frac{1}{K} \quad (٢٤)$$

ومنها نجد أن

$$L(\rho) \approx e^\rho \quad \Rightarrow \quad R(\rho) \approx e^{\rho/2} \underset{\rho\to\infty}{\to} \infty \quad (٢٥)$$

الحل (٢٥) غير مقبول، لأنه لا يحقق شروط ميكانيكا الكم، فما الحل إذاً؟

الحل: هو أن نوقف المتسلسلة عند حد معين لا نتعداه، بمعنى أنه إذا كانت $a_K \neq 0$ في المعادلة (٢٣) فإن $a_{K+1} = 0$ لكل القيم المتبقية. ولتحقيق هذا الشرط نضع القيمة $K + l + 1 - \lambda = 0$ في المعادلة (٢٣) لنجد أن:

$$n = \lambda = n_r + l + 1, \qquad n_r \geq 0 \qquad (٢٦)$$

حيث $(n = 1,2,\cdots)$ يعرف بالعدد الكمي الأساسي، والعدد $(l = 0,1,2,\cdots,n-1)$ يعرف بالعدد الكمي المدارى، حيث $(n \geq l+1, \quad n_r \geq 0)$
وأخيراً فإن القيم المميزة للطاقة الكلية تعطى بالعلاقة المشهورة:

$$E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} \qquad (٢٧)$$

وهي شبيهة بمعادلة بوهر.

باستخدام القيم العددية:

$$\hbar = 1.054\times10^{-34}\text{Js}, \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx \text{m}_\text{e} = 9.109\times10^{-31}\text{kg},$$
$$\text{e} = 1.602\times10^{-19}\ \text{C}, \quad 1\text{J} = 6.242\times10^{18}\ \text{eV}$$ و

فبإمكاننا إيجاد الطاقة الكمية:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}\ \text{Ry}, \qquad 1\text{Ry} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = 13.6\ \text{eV}. \ (a27)$$

تعليقات على القيم المميزة (a27):

أ- لكل قيمة Z يوجد عدد لا نهائي من قيم الطاقة بداية من $n = 1$ وطاقتها $E_1 = -1\,\text{Ry}$ إلى $n = \infty$ وطاقتها $E_\infty = 0$. هذا وتقل القيم حيث إن الجهد الكولومبي يقل مع المسافة. وتقل أيضاً المسافة بين مستويات الطاقة مع زيادة n.

ب- لكل قيمة n يأخذ العدد الكمي المداري القيم $l = 0,1,\cdots,n-1$ وهو يعبر عن التحلل (أو الانتماء Degeneracy). بداية اعتبر هذا التحلل عرضياً، ولكن اتضح أن هذا التحلل نتيجة للتماثل في الجهد الكولومبي الهملتونى $(O_3\text{-group})$.

ج- هناك أيضاً تحلل لقيم العدد الكمي المدارى l ، حيث إن لكل قيمة l يأخذ العدد الكمي المغناطيسي القيم $m=-l,\cdots,l$ وهذا يعطينا قيماً متحللة عددها $d_l = \sum_{m=-l}^{l} 1 = (2l+1)$. ومن ثم فإن قيم التحلل لقيمة n هو:

$$d_n = \sum_{l=0}^{n-1} d_l = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = \sum_{l=0}^{n-1} 2l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2\frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \qquad (٢٨)$$

وإذا أضفنا الدوران المغزلي (Spin) للإلكترون تصبح القيمة $2n^2$ (انظر الباب التاسع).

د- أدى نجاح ميكانيكا الكم لحساب القيم المميزة للطاقة إلى تفسير الطيف الخطي لذرة الهيدروجين، إذ ظهرت بعض الفروق البسيطة بين القيم النظرية والعملية، نتيجة لإهمال بعض التأثيرات (التفاعلات)، التي تحتاج لمعالجة رياضية خاصة.

هـ- العدد الكمي n_r يقال عنه: إنه العدد الكمي القطري، ويدل على عدد العقد (الجذور أو الأصفار) بالدالة الموجبة (وسوف نتعرض له لاحقا). هذا العدد لا نهتم به كثيراً، لأننا نستطيع حسابه ببساطة إذا عرفنا قيم العدد الكمي الرئيس n .

n	المستوى	l	المدار	m	d_l	d_n	E_n(Ry)
1	K	0	s	0	1	1	-1
2	L	0	s	0	1	4	-1/4
		1	p	-1،0،1	3		
3	M	0	s	0	1	9	-1/9
		1	p	-1،0،1	3		
		2	d	-2،-1،0،1،2	5		
4	N	0	s	0	1	16	-1/16
		1	p	-1،0،1	3		
		2	d	-2،-1،0،1،2	5		
		3	f	-3،-2،-1،0،1،2،3	7		

جدول (١) : **مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين بقيم تحللها (انتمائها) بإهمال الدوران المغزلي للإلكترون.**

٤- الدالة الموجية القطرية للذرات الشبيهة بالهيدروجين

عرفنا بمعادلة (٢٠) الدالة $L(\rho)$ وهي دالة معروفة واسمها دالة لاجير المرتبطة والمتعددة الحدود (انظر الملحق B). لحساب هذه الدالة دعونا نعرف دالة لاجير المتعددة الحدود $L_q(x) = e^x \frac{d^q}{dx^q}(x^q e^{-x})$ ، وأيضاً دالة لاجير المرتبطة والمتعددة الحدود $L_q^p(x) = \frac{d^p}{dx^p} L_q(x)$.

واجب منزلي: أثبت أن

$$L_o(x) = 1, L_1(x) = 1 - x\,,\ \ L_2(x) = (x^2 - 4x + 2)/2,$$
$$L_1^1(x) = 2 - x\,,\ L_2^1(x) = (x^2 - 6x + 6)/2,\ L_1^2(x) = (3 - x)$$

ويصبح حل المعادلة (١٣) هو:

$$R_{nl}(\rho) = -e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \qquad (٢٩)$$

ولمعايرة هذه المعادلة نستخدم

$$\int_0^\infty \rho^2 d\rho e^{-\rho} \rho^{2l} \left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\right]^2 = \frac{2n\left[(n+l)!\right]^3}{(n-l-1)!} \qquad (٣٠)$$

لتصبح الدوال القطرية المعايرة للذرات الشبيهة بالهيدروجين هي:

$$R_{nl}(r) = -\left(\frac{2Z}{na_o}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+1)!\right]^3}}\, \rho^l e^{-Zr/na_o} L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \qquad (٣١)$$

وقد استخدمنا $\rho = \frac{2Zr}{na_o}$ و $a_o = \hbar^2/\mu e^2$ دلالة لنصف قطر ذرة بوهر.

n	l	المدار	R_{nl}
1	0	1s	$2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o}$
2	0	2s	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}(1-\frac{Zr}{2a_o})e^{-Zr/2a_o}$
2	1	2p	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a_o}$
3	0	3s	$\frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(1-\frac{2}{3}\frac{Zr}{a_o}+\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{3a_o}\right)^2\right)e^{-Zr/3a_o}$
3	1	3p	$\frac{8}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}-\frac{1}{6}\left(\frac{Zr}{a_o}\right)^2\right)e^{-Zr/3a_o}$
4	2	3d	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a_o}$

جدول (٢) **بعض الدوال القطرية للذرات الشبيهة بالهيدروجين**

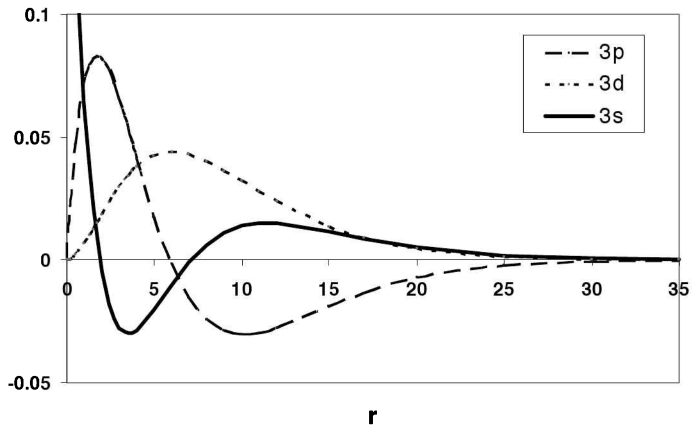
تعليقات مهمة على الدوال الموجية (٣١):

أ- الدوال Ψ_{nlm} تكون فئة متعامدة ومعايرة، لماذا؟ لأن

$$\underbrace{\int_0^\infty R^*_{n',l'}(r)R_{n,l}(r)r^2dr}_{\delta_{n,n'}\delta_{l,l'}}\underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}Y^*_{l',m'}(\theta,\varphi)Y_{l,m}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi}_{\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}}=1$$

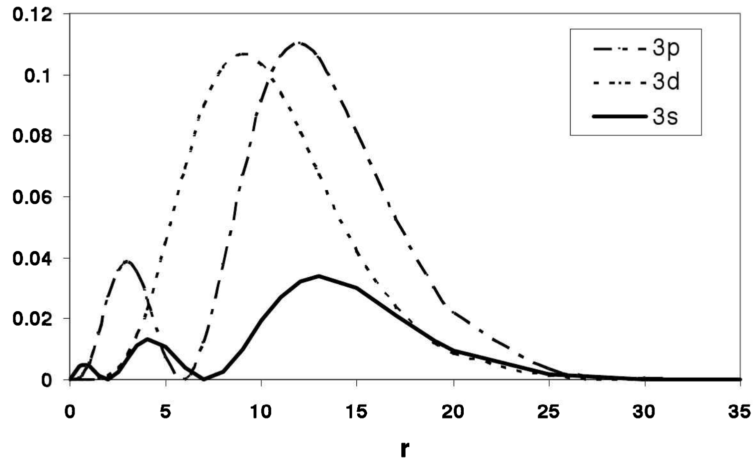
ب- الدالة القطرية (٥،٣١) تحتوي على المعامل r^l، ولذلك فكلها تنعدم عند نقطة الأصل $r=0$، ماعدا المستوى $l=0$ ، وهذا ناتج من وجود الجهد الطارد المركزي $l(l+1)\hbar^2$ وهو المسؤول عن عدم اقتراب الإلكترون من النواة.

ج- الدوال القطرية لها عدد $n_r=n-l-1$ من العُقد (الأصفار)، وهذا ناتج من جذور معادلة لاجير. من الشكل ٢ a نجد أن عدد العُقد هي ٢ للمستوى $3s$ و١ للمستوى $3p$ و٠ للمستوى $3d$. ذلك بإهمال العُقد عند البداية والنهاية، لأنها من الشروط الحدودية.



شكل (٢) a- الدوال القطرية $R_{nl}(r)$ كدالة في المسافة $r(a_0)$ للمستويات ، $3s$ $3d$ ، $3p$.

د- عندما نتكلم عن الدالة الاحتمالية للتوزيع القطري، فإننا نعرفها بالمعادلة $P_{nl}(r) = r^2 R_{nl}^2$ ولكل (nl) يوجد عدد $(n-l)$ من القيم العليا (المرتفعات). مثلاً، من الشكل ٥،٢ b نجد أن عدد المرتفعات هي ٣ للمستوى $3s$ و٢ للمستوى $3p$ و١ للمستوى $3d$. تعرف $P_{nl}(r)dr$ بأنها احتمالية وجود الإلكترون في المدى من r إلى $r+dr$.

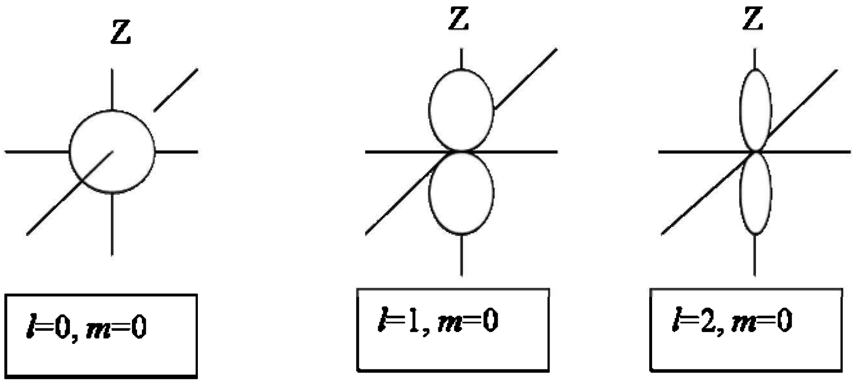


شكل (٢) b- الدوال الاحتمالية للتوزيع القطري $P_{nl}(r)$ كدالة في المسافة $r(a_0)$ للمستويات $3s$ ، $3d$ ، $3p$.

هـ- عندما نتكلم عن الدالة الاحتمالية للتوزيع الزاوي، فإننا نعرفها كالتالي:

$$|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \, d\Omega \propto |P_l^m(\cos\theta)|^2 \, d\Omega$$

وهي احتمالية وجود الإلكترون عند الزوايا (θ,φ) في العنصر $d\Omega$. والاحتمالية هنا لا تعتمد على φ لعدم اعتماد $V(r)$ على φ.



شكل(٣) الدالة الاحتمالية للتوزيع الزاوي لقيم مختلفة من l, m. لاحظ تغير العرض مع زيادة l.

و- عرض الدالة الاحتمالية للتوزيع الزاوي للقيم $|m|=l$ يقل بمعدل $1/\sqrt{l}$، بحيث يقل العرض بزيادة l بحيث يصبح المدار مستوياً (planar) عند قيم مرتفعة للعدد l، (انظر: الشكل ٣) كما هو متوقع مقارنةً بالفيزياء الكلاسيكية (التقليدية).

ز- تعرف الباريتى (التماثل الانعكاسي للإحداثيات) بأنها الخاصية الفيزيائية التي تحدد تماثل الدالة الموجية نتيجة الانعكاس المتلازم لإحداثياته الثلاث❖❖ خلال نقطة الأصل. عندما لا تتغير الدالة نتيجة الانعكاس تسمى دالة زوجية (even parity) أو ندية زوجية، وإذا تغيرت الدالة تسمى دالة فردية (odd parity) أو ندية فردية. في الإحداثيات الكروية تظهر هذه الخاصية من خلال الدالة Y_{lm} بحيث إن

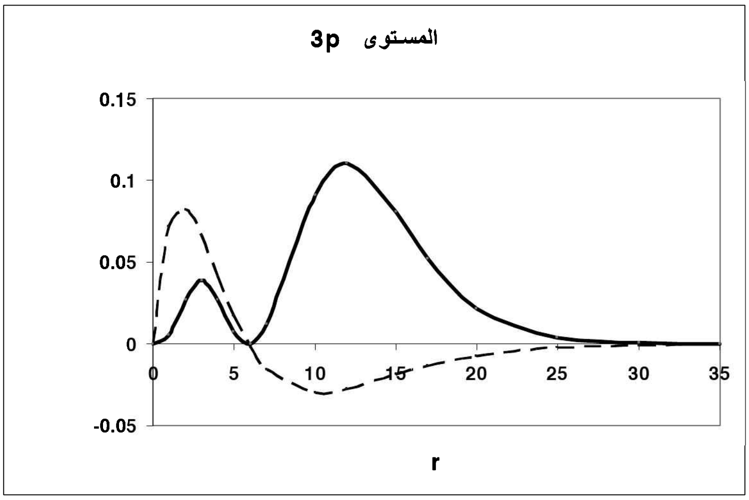
$$Y_{lm}(\pi-\theta,\varphi+\pi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi)\begin{cases} l=\text{even}\Rightarrow\text{even parity}\\ l=\text{odd}\Rightarrow\text{odd parity}\end{cases}$$

❖❖ في الإحداثيات الكرتيزية: $(x,y,z)\rightarrow(-x,-y,-z)$، وفي الإحداثيات الكروية: $(r,\theta,\varphi)\rightarrow(r,\pi-\theta,\varphi+\pi)$

مثال: إلكترون بذرة الهيدروجين في المستوى p٣ حيث إن:

$$R_{3p} = \frac{4}{81\sqrt{6}}(6-r)re^{-r/3}.$$

احسب المكان الذي يتواجد عنده أعلى احتمالية لتواجد الإلكترون في هذا المستوى.



شكل (٤) a الخط المنقط للدالة القطرية $R_{3p}(r)$ والخط المتصل للدالة الاحتمالية $P_{3p}(r)$

الحل: المطلوب هو حل المعادلة $\frac{\partial(r\psi)^2}{\partial r} = 0$ لإيجاد كل من القيم الصغرى والكبرى.

وحيث إننا نفاضل بالنسبة إلى r، فإن الجزء الذي يعتمد على الزاوية لن يؤثر، ولهذا نستخدم $\frac{\partial(rR_{nl})^2}{\partial r} = 0$. وحيث إننا نبحث عن القيم الكبيرة فقط، فمن الممكن استخدام الشرط $\frac{\partial(rR_{nl})}{\partial r} = 0$ وهذا للتبسيط.

$$\frac{\partial(rR_{3p})}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r}(6-r)r^2e^{-r/3} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{e^{-r/3}}{3}r\left(r^2 - 15r + 36\right) = 0$$

$$\Rightarrow r = \{0,3,\underbrace{12}_{\uparrow}\}$$

إذاً الحل هو ١٢. انظر: الشكل ٤ a للتحقق من النتائج، ولماذا اخترنا القيمة ١٢ فقط.

ملحوظة: باستخدام الشرط $\frac{\partial(rR_{nl})^2}{\partial r} = 0$ نحصل على معادلة من الدرجة السادسة، وحلولها هي ٠، ٠، ٠، ٣، ٦، ١٢ وفيها يوجد الرقم ٦، ويعطينا أقل احتمالية لوجود الإلكترون (انظر: الشكل ٤ b للتحقق من النتائج.)

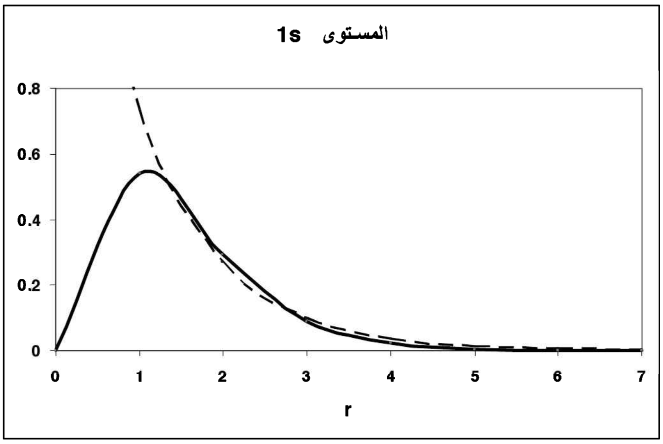
مثال: عدد العُقد في المستوى ٣p تحسب كالتالي:

$$n-l-1=3-1-1=1$$

مثال: عدد القمم في المستوى ٣p تحسب كالتالي:

$$n-l=3-1=2$$

مثال: إلكترون بذرة الهيدروجين في المستوى $\psi_{1s}=e^{-r}/\sqrt{\pi}$. احسب احتماليه تواجد الإلكترون بحيز نصف قطره أ- ٦ و ب- ١ من المركز.



شكل (٥) الخط المنقط للدالة القطرية للمستوى $1s$ والخط المتصل للدالة الاحتمالية للتوزيع القطري $P_{1s}(r)$.

الحل:

أ-احتمالية تواجد الإلكترون بحيز نصف قطره ٦ من المركز يحسب كالتالي:

$$a)\ P=\int|\psi_{1s}|^2d\tau=4\pi\int_0^6\left(\frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}}\right)^2r^2dr=-4e^{-2r}\left(\frac{1}{4}+\frac{r}{2}+\frac{r^2}{2}\right)_0^6$$
$$=0.999\approx1\Rightarrow100\%$$

ب- احتمالية تواجد الإلكترون بحيز نصف قطره ١ من المركز يحسب كالتالي:

$$b)\ P=\int|\psi_{1s}|^2d\tau=4\pi\int_0^1\left(\frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}}\right)^2r^2dr=0.323\Rightarrow32.3\%$$

ملحوظة: تعد القيمة ٦ كأنها ∞ لهذه الدالة. انظر: الشكل ٥ للتحقق من سلوك الدالة.

مثال: إلكترون بذرة الهيدروجين في المستوى $|2,1,1>$. احسب $<x^2>$، $<y^2>$، $<z^2>$، $<r^2>$.

الحل: باستخدام التعريفات $|2,1,1> = R_{21}Y_{1,1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}} r\,e^{-r/2} \sin\theta e^{i\varphi}$, و $x = r\sin\theta\cos\varphi$ نجد:

$$<x^2> = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left(-\frac{1}{8\sqrt{\pi}} re^{-r/2}\sin\theta\right)^2 (r\sin\theta\cos\varphi)^2$$
$$= \frac{1}{64}\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left(r^2 e^{-r/2}\sin^2\theta\right)^2$$
$$= \frac{1}{60}\int_0^\infty r^6 e^{-r} dr = \frac{720}{60} = 12$$

باستخدام $y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta$ من السهل إثبات أن

$$<y^2> = 12, \quad <z^2> = 6, \quad <r^2> = <x^2> + <y^2> + <z^2> = 30$$

وأيضاً:

$$<r^2> = \int_0^\infty r^4 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left(-\frac{1}{8\sqrt{\pi}} re^{-r/2}\sin\theta\right)^2 = 30$$

واجب منزلي: تحقق من النتيجة السابقة باستخدام القانون العام التالي:

$$<nl|r^2|nl> = \frac{n^2}{2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)],$$
$$<21|r^2|21> = \frac{2^2}{2}[5\times 2^2 + 1 - 3(1+1)] = 30$$

مثال: إلكترون بذرة الهيدروجين في المستوى $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$ أثبت أن:

$<r^2> = 3$، $<r> = 3/2,$ و $<x^2> = <y^2> = <z^2> = <\frac{1}{r}> = \frac{<r^2>}{3} = 1$.

الحل:

$$< r^2 >= \int_0^\infty r^4 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}\right)^2 = 4\int_0^\infty r^4 e^{-2r} dr = 4\left(\frac{3}{4}\right) = 3,$$

$$< r >= \int_0^\infty r^3 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}\right)^2 = 4\int_0^\infty r^3 e^{-2r} dr = 4\left(\frac{3}{8}\right) = \frac{3}{2},$$

$$< \frac{1}{r} >= \int_0^\infty r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}\right)^2 = 4\int_0^\infty r e^{-2r} dr = 4\left(\frac{1}{4}\right) = 1.$$

تحقق من النتائج السابقة باستخدام القوانين العامة التالية:

$$< nl \mid r \mid nl >= \frac{1}{2}[3n^2 - 3l(l+1)],$$

$$< nl \mid r^2 \mid nl >= \frac{n^2}{2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)],$$

$$< nl \mid \frac{1}{r} \mid nl >= \frac{1}{n^2}$$

واجب منزلي: لدالة ذرة الهيدروجين في المستوى $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$ أثبت أن

$$< x^2 > = < y^2 > = < z^2 > = 1$$

٥- تمارين عامة

١- إلكترون بذرة الهيدروجين يوصف مستواه بالدالة المعايرة الآتية:

$$\psi(r) = A\left[3|1,0,0\rangle + 2|2,1,1\rangle - |2,1,0\rangle + \sqrt{10}|3,1,-1\rangle\right],$$

٢- أثبت أن $A = \frac{1}{2\sqrt{6}}$ و $< E >= -6.44 \text{ eV}$ إذا كانت $E = -\frac{1}{n^2} \text{ Ry.}$.

٣- للدالة العيارية $\psi(r) = N(1+br)e^{-r/2}$ والمتعامدة مع الدالة $\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$

أثبت أن $N = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}, b = -1/2$.

٤- أثبت أن الدالة العيارية، $\psi(r) = -A(x+iy)e^{-r/2}$ ، بالإمكان وضعها على الصورة $\psi(r) = Ar\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1}\, e^{-r/2}$. ومنها أثبت أن $A = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}$ و $<r> = 5$ وأن أعلى قيمة لاحتمال وجود الجسيم هو عند المكان $r = 4$.

٥- إلكترون بذرة الهيدروجين في المستوى $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}$ أثبت أن:

$<p_r> = 0$ و $<p_r^2> = \hbar^2/a^2$ و $\Delta r\,\Delta p_r = \hbar\sqrt{\frac{5}{12}} \geq \frac{\hbar}{2}$.

(استخدم التعريفات $\hat{p}_r\psi = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi), \quad \hat{p}_r^2\psi = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi)$)

الباب الثامن

التطور الزمني للنظام الكمي

(Time evolution of the quantum system)

الباب الثامن

التطور الزمني للنظام الكمي

قبل أن نستعرض التصورات المختلفة للتطور الزمني لنظام ميكانيكا الكم، سوف نستعرض العلاقة بين الكميات الفيزيائية التقليدية، التي ترتبط بقوانين نيوتن للحركة، مع نظائرها في ميكانيكا الكم. لذلك سوف نبدأ بتصور شرودنجر للتطور الزمني للنظام وذلك من خلال حساب معدل التغير للقيمة المتوقعة لمؤثر، حيث إنها ستكون حجر الأساس لاشتقاق قوانين الحركة في ميكانيكا الكم.

١- تصور شرودنجر للتطور الزمني للنظام

تم سابقاً تعريف القيمة المتوقعة، أو المتوسطة، لكمية فيزيائية لها المؤثر $\hat{A}_s$ بالمعادلة:

$$< \hat{A}_s >_t = < \psi_s(t) | \hat{A}_s | \psi_s(t) > = \int_{\text{all space}} \psi_s^*(t) \hat{A}_s \psi_s(t)\, d\tau \qquad (1)$$

حيث الدليل السفلي s للدالة والمؤثر يعبر عن تمثيل شرودنجر، و ψ_s هي الدالة المميزة والمعيرة للمؤثر $\hat{A}_s$ ، و ψ_s^* هي المرافق للدالة ψ_s. وقبل أن نبدأ بإيجاد معدل التغير للقيمة المتوقعة للمؤثر $\hat{A}$ دعونا نسترجع معادلة شرودنجر الزمنية بالصورة:

$$\begin{aligned} \hat{H}_s \left|\psi_s(t)\right\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_s(t)\right\rangle \\ \Rightarrow \quad \frac{\hat{H}_s}{i\hbar}\left|\psi_s\right\rangle &= |\dot{\psi}_s > \end{aligned} \qquad (2a)$$

ومنها نجد المرافق:

$$-\frac{1}{i\hbar} < \psi_s | \hat{H}_s = < \dot{\psi}_s | \qquad (2b)$$

وقد استخدمنا الاختصار $\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_s\right\rangle = |\dot{\psi}_s >$ للتعريف بالمشتقة الأولى بالنسبة للزمن، والخاصية الهيرميتية للهاملتونيان $\hat{H}_s = \hat{H}_s^\dagger$.

بتفاضل المعادلة (1) واستخدام المعادلتين $(2a)$ و $(2b)$ نحصل على:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A}_s \right\rangle = \underbrace{\langle \dot{\psi}_s \,|}_{-\frac{1}{i\hbar}\langle \psi_s | \hat{H}_s} \hat{A}_s | \psi_s \rangle + \langle \psi_s | \hat{A}_s \underbrace{|\dot{\psi}_s >}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_s |\psi_s\rangle} + \langle \psi_s | \dot{\hat{A}} | \psi_s \rangle$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle \psi_s | \hat{H}_s \hat{A}_s | \psi_s \rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \psi_s | \hat{A}_s \hat{H}_s | \psi_s \rangle + \langle \psi_s | \dot{\hat{A}} | \psi_s \rangle \qquad (3)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\hat{H}_s, \hat{A}_s \right] \right\rangle + \left\langle \dot{\hat{A}} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{A}_s, \hat{H}_s \right] \right\rangle + \left\langle \dot{\hat{A}} \right\rangle$$

المعادلة (3) هي الصيغة النهائية لمعدل التغير للقيم المتوقعة، أو هي معادلة الحركة، للمؤثر $\hat{A}_s$. ونقف هنا لنُعطي بعض التعليقات المهمة:

أ- إذا كانت $\hat{A}_s$ لا تعتمد صراحةً على الزمن فإن

$$\left\langle \frac{\partial \hat{A}_s}{\partial t} \right\rangle = 0 \,.$$

ب- إذا كان $\hat{A}_s$ لا تعتمد صراحةً على الزمن وأيضاً متبادلة مع $\hat{H}_s$ ، بمعنى أن $\left[\hat{H}_s, \hat{A}_s \right] = 0$ ، فإن:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A}_s \right\rangle = 0$$

وهذا يعنى أن:

$$\left\langle \hat{A}_s \right\rangle = \text{ثابت}$$

ويصبح المؤثر $\hat{A}_s$ ثابت للحركة، ويتبع قانون حفظ الكمية (مثال على ذلك الطاقة الكلية، كمية الحركة الخطية، ...الخ)

ج- مقارنةً بالميكانيكا التقليدية نعلم أن:

$$\frac{dA_s}{dt} = \left\{ A_s, H_s \right\} + \frac{\partial A_s}{\partial t}$$

حيث H_s هو الهملتونيان و { } هي أقواس بواسون وتعطي بالمعادلة:

$$\left\{ A_s, H_s \right\} = \left(\sum_i \frac{\partial A_s}{\partial q_i}\frac{\partial H_s}{\partial p_i} - \frac{\partial A_s}{\partial p_i}\frac{\partial H_s}{\partial q_i} \right) \qquad (٤)$$

حيث p_i و q_i هما كميات قانونية بالميكانيكا التقليدية، وتسمى إحداثيات عامة. وبمقارنة المعادلة (٤) بالمعادلة (٣) نجد أن أقواس بواسون الكلاسيكية ترتبط بأقواس التبادل الكمية بالعلاقة:

$$.\{A_s, H_s\} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_s, \hat{H}_s\right] \tag{٥}$$

إلى الآن، ما تم مناقشته وشرحه هنا يسمى تصور شرودنجر للتطور الزمني للنظام. وقد تم افتراض اعتماد الدالة على الزمن واستقلالية المؤثر عن الزمن. وفي الفصلين التاليين i و ii سوف نستعرض قوانين الحركة في ميكانيكا الكم في تصور شرودنجر قبل أن نستعرض التصورات الأخرى. الدليل السفلي S للدالة والمؤثرات سوف نتغاضى عنه وذلك للتبسيط.

i- نظرية إيرنفست

نظرية إيرنفست سوف تخبرنا أنه بإمكاننا استخدام قوانين نيوتن التقليدية للحركة في ميكانيكا الكم إذا أبدلنا جميع المتغيرات التقليدية بالقيم المتوقعة لمؤثراتها. لإثبات ذلك، نعلم أن قوانين نيوتن تعرف بالعلاقات:

$$\boldsymbol{p} = m\,\mathbf{v} = m\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \quad \Rightarrow \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}p_x . \tag{٦}$$

$$\boldsymbol{F} = \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\nabla V \quad \Rightarrow \quad \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \tag{٧}$$

حيث $\boldsymbol{p}$ هي كمية الحركة الخطية، V هي طاقة الوضع و $\boldsymbol{F}$ هي القوة الخارجية المؤثرة. وللتبسيط سوف نتعامل مع المتغيرات في بعد واحد ولنفترضه X وسنستخدم متغيراً مثل الإزاحة x ومؤثره $\hat{x}$ والهملتونيان:

$$.\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + V(x) \tag{٨}$$

من المعادلة (٣) نجد أن معدل التغير للقيمة x ، التي لا تعتمد صراحة على الزمن، هو:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}<\hat{x}> &= \frac{i}{\hbar}<\left[\hat{H}, \hat{x}\right]> = \frac{i}{\hbar}<\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2, \hat{x}\right]> + \frac{i}{\hbar}<\underbrace{\left[\cancel{V(x)}, \hat{x}\right]}_{=0}> \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}<\left(\nabla_x^2\hat{x} - \hat{x}\nabla_x^2\right)>\end{aligned} \tag{٩}$$

وبمعلومية أن $\nabla_x^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ و $\nabla_x^2\hat{x} = \hat{x}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\frac{\partial}{\partial x}$ فإننا نجد أن:

$$\frac{d}{dt}<\hat{x}> = -\frac{i\hbar}{2m}<2\frac{\partial}{\partial x}> = \frac{1}{m}<\hat{p}_x> \tag{١٠}$$

حيث استخدمنا العلاقة $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. المعادلة (١٠) هي صيغة إيرنفست بميكانيكا الكم للمعادلة التقليدية (٦).

من المعادلة (٣) نجد أن معدل التغير للقيمة $\hat{p}_x$ هو:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} < \hat{p}_x > &= \frac{i}{\hbar} < \left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] > = < \left[V(x), \frac{\partial}{\partial x} \right] > \\ &= < V \frac{\partial}{\partial x} > - < \frac{\partial}{\partial x} V > = - < \frac{\partial V}{\partial x} > \end{aligned} \tag{١١}$$

حيث استخدمنا علاقة التبادل $\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x} \right] = 0$ والعلاقة $\frac{\partial}{\partial x}(V\psi) = \psi \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial \psi}{\partial x}$.

المعادلة (١١) هي صيغة إيرنفست بميكانيكا الكم للمعادلة التقليدية (٧).

---

ii- نظرية فيريال

نظرية فيريال سوف تعطينا علاقة بين القيم المتوقعة لطاقتي الحركة والجهد. ولاشتقاق هذه العلاقة نبدأ باستخدام المعادلة (٣) فنجد أن معدل التغير لحاصل ضرب المؤثرين $\hat{x}\,\hat{p}_x$ يعطى بالشكل:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{x}\,\hat{p}_x \right\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\hat{H}, \hat{x}\,\hat{p}_x \right] \right\rangle \tag{١٢}$$

باستخدام علاقات التبادل التالية:

$$\left[\hat{H}, \hat{x}\,\hat{p}_x \right] = \hat{x}\left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] + \left[\hat{H}, \hat{x} \right]\hat{p}_x ,$$

$$\left[\hat{H}, \hat{x} \right] = -i\hbar \frac{\hat{p}_x}{m}, \quad \left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] = i\hbar \frac{\partial \hat{V}}{\partial x}$$

نجد أن المعادلة (١٢) تؤول إلى:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left\langle \hat{x}\,\hat{p}_x \right\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\left\{ \frac{i\hbar}{m} \underbrace{\left\langle \hat{p}_x^2 \right\rangle}_{2m\left\langle \hat{T} \right\rangle} - i\hbar \left\langle \hat{x} \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \right\rangle \right\}, \\ &= 2\left\langle \hat{T} \right\rangle - \left\langle \hat{x} \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \right\rangle \end{aligned}$$

حيث $\frac{d}{dt}\langle \hat{x}\,\hat{p}_x \rangle = 0$ لأنها لا تعتمد صراحةً على الزمن، لذلك نجد أن:

$$\boxed{2\left\langle \hat{T} \right\rangle = \left\langle \hat{x}\,\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle} \qquad (١٣)$$

وهذه هي نظرية فيريال.

لهذه النظرية تطبيقاتها العديدة، ومنها تطبيقها على الدوال المتجانسة (انظر الملحق (A-٨)). حيث إنه بالنسبة لدالة جهد V من الدرجة n نجد أن:

$$\left\langle \hat{x}\,\frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \right\rangle = n\left\langle \hat{V} \right\rangle$$

ومنها نجد أن نظرية فيريال تبسط إلى الصورة:

$$2\left\langle \hat{T} \right\rangle = n\left\langle \hat{V} \right\rangle$$

وحيث إن

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \hat{T} \right\rangle + \left\langle \hat{V} \right\rangle = E$$

فإن

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle = \frac{2E}{n+2}, \qquad \left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{nE}{n+2}$$

وكتطبيق للنظرية:

أ- في حالة المتذبذب التوافقي، حيث الجهد يعرف بالعلاقة $V = \frac{1}{2}kx^2$، نجد أن $n = 2$ و

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \left\langle \hat{V} \right\rangle = \frac{2E}{2+2} = \frac{1}{2}E$$
$$= \frac{1}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

ب- في حالة الجهد الكولمي، حيث يعرف بالعلاقة $V = \frac{k}{r}$ ، نجد أن $n = -1$ و

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = -\frac{1}{2}\left\langle \hat{V} \right\rangle$$

كملخص لما سبق فقد وجدنا في تصور شرودنجر أنه لحساب القيمة المتوقعة لمؤثر بالصورة:

$$< \hat{A}_s >_t = < \psi_s(t) | \hat{A}_s | \psi_s(t) >$$

فإنه تم افتراض تغير الدالة $\psi_s(t)$ مع الزمن مع استقلالية المؤثر $\hat{A}_s$ عن الزمن.

واستخدمنا هنا الدليل السفلي t ليدل على أن القيمة المتوقعة تعتمد على الزمن.

والآن نسأل: هل من طرق أخرى لحساب القيمة المتوقعة؟ وهل هذه الطرق متكافئة من حيث النتائج النهائية؟

والجواب: يوجد طريقتان أخريان، وفيهما يكون:

١- المؤثر $\hat{A}$ يتغير مع الزمن وتظل الدالة $\psi(\vec{r})$ مستقلة عن الزمن، ويسمى هذا تصور هيزنبرج.

٢- المؤثر $\hat{A}$ والدالة $\psi(t)$ يتغيران مع الزمن، ويسمى هذا التصور التفاعلي أو تصور ديراك.

دعونا نوضح التصورات الأخرى على حدة، وبعضاً من تطبيقاتها.

٢- تصور هيزنبرج

وجدنا في تصور شرودنجر أن التطور الزمني للنظام الكمي يأتي من اعتماد الدالة فقط على الزمن، واستقلالية المؤثر أو الهملتونيان عن الزمن، وهذا يتأتى من معادلة شرودنجر الزمنية:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \psi_s(t) \right\rangle = \hat{H}_s \left| \psi_s(t) \right\rangle \qquad (١)$$

و التي لها الحل:

$$\left| \psi_s(t) \right\rangle = \underbrace{e^{-i\hat{H}_s(t-t_o)/\hbar}}_{U(t-t_o)} \left| \psi_s(t_o) \right\rangle = U\left(t - t_o\right) \left| \psi_H(t_o) \right\rangle \qquad (٢)$$

حيث $\psi_H = \psi_s(t_o)$ هي دالة هيزنبرج، أو المتجه، عند الزمن t_o. المعادلة (٢) يمكن منها تحديد دالة الحالة $\psi_s(t)$ عند تغير الزمن، وذلك إذا تم معرفة $\psi_s(t_o)$. المؤثر

$U(t)=e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}$ يسمى مؤثر التطور الزمني، بفرض أن $t_o=0$، ويمكن وضعه بالصورة التالية:

$$e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(-i\hat{H}_s t/\hbar\right)^n}{n!} \tag{٣}$$

والآن، حيث إن جميع التوقعات بميكانيكا الكم تأتي من الضرب الداخلي، فإننا نستطيع أن نغير طريقة التطور الزمني للنظام من اعتماد الدالة على الزمن إلى اعتماد المؤثر على الزمن، وذلك عن طريق إيجاد القيمة المتوقعة لمؤثر، $\hat{A}_s$ كالتالي:

$$\begin{aligned} <\hat{A}_s>_t &= \left\langle \psi_s(t)\middle|\hat{A}_s\middle|\psi_s(t)\right\rangle = \left\langle e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}\psi_s(0)\middle|\hat{A}_s\middle|e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}\psi_s(0)\right\rangle \\ &= \left\langle \psi_s(0)\middle|\underbrace{e^{i\hat{H}_s t/\hbar}}_{U^\dagger}\hat{A}_s\underbrace{e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}}_{U}\middle|\psi_s(0)\right\rangle \\ &= \left\langle \psi_s(0)\middle|\underbrace{U^\dagger\hat{A}_s U}_{A_H(t)}\middle|\psi_s(0)\right\rangle = \left\langle \hat{A}_H(t)\right\rangle_0 \end{aligned} \tag{4}$$

حيث استخدمنا الخاصية الهرميتية للمؤثر $\hat{H}_s$ بالشكل:

$$\left(e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}\right)^\dagger = e^{i\hat{H}_s^\dagger t/\hbar} = e^{i\hat{H}_s t/\hbar} \tag{٥}$$

وعرفنا مؤثر هيزنبرج $\hat{A}_H(t)$ بالصورة:

$$\hat{A}_H(t)=e^{i\hat{H}_s t/\hbar}\hat{A}_s e^{-i\hat{H}_s t/\hbar} \tag{٦}$$

هنا لنا أن نتساءَل عما تدل عليه المعادلة (٤)؟ الجواب طبعاً: تدل على أن القيم المتوقعة لمؤثر ما، التي تتكون من قيم حقيقية، لا تعتمد على نوعية التصور المستخدم، كما هو متوقع.

من السهل اشتقاق معادلة الحركة في تصور هيزنبرج وهي:

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H,\hat{H}_H\right] \tag{٧}$$

وقد تم إهمال الحد $\langle \psi_H | \dot{\hat{A}}_H | \psi_H \rangle$ حيث إن المؤثر $\hat{A}_H$ لا يعتمد صراحةً على الزمن.

واجب منزلي: أثبت العلاقة (٧).

هناك نقطة يجب أن تؤخذ في الاعتبار ألا وهي أن علاقات التبادل يجب أن تكون محفوظةً، وذلك عند انتقالنا من استخدام تصور معين إلى استخدام تصور آخر. بمعنى أنه إذا كان علاقة التبادل:

$$\left[\hat{B}_S\,,\hat{A}_S\right] = C_S$$

تتحقق في تصور شرودنجر فإن علاقة التبادل:

$$\left[\hat{B}_H\,,\hat{A}_H\right] = C_H$$

يجب أن تتحقق أيضاً في تصور هيزنبرج. من ثم إذا كانت العلاقة $\left[\hat{H}_S\,,\hat{A}_S\right] = 0$ محققة، فإن $\left[\hat{H}_H\,,\hat{A}_H\right] = 0$ يجب أيضاً أن تتحقق، ويصبح $\hat{A}_H(t)$ ثابتاً أيضاً للحركة. الفرق الأساسي بين هذين التصورين؛ هو أن تطور النظام مع الزمن يظهر من خلال الدالة $\psi_S(t)$ في تصور شرودنجر، ومن خلال المؤثر $\hat{A}_H(t)$ ، والذي يمثل الكميات الفيزيائية، في تصور هيزنبرج.

مثال: أوجد معادلات المسار للمتغيرات التقليدية $x(t)$ و $p(t)$ المرتبطة بالهملتونيان:

$$\hat{H}_H(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}_H^2(t) + mg\hat{x}_H(t)$$

ملحوظة: يمكن استخدام تصور هيزنبرج بالصورة: $\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_H\,,\hat{A}_H\right]$.

الحل: باستخدام تصور هيزنبرج للمؤثرات المناظرة للمتغيرات التقليدية نجد أن معدل التغير للمؤثر $\hat{x}(t)$ يُعطي:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{x}_H(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_H(t),\hat{x}_H(t)\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2m}\hat{p}_H^2(t),\hat{x}_H(t)\right] \\ &= \frac{\hat{p}_H(t)}{m},\end{aligned} \tag{1}$$

وللمؤثر $\hat{p}_H(t)$ نجد أن:

$$\frac{d\hat{p}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_H(t), \hat{p}_H(t)\right] = \frac{i}{\hbar}\left[mg\hat{x}_H(t), \hat{p}_H(t)\right] \quad (٢)$$
$$= -mg$$

بتكامل المعادلة (٢) بالنسبة للزمن، واعتبار الشرط الحدودي $p_H(0) = p_o$ ، نحصل على:

$$\boxed{p_H(t) = p_o - mgt} \quad (3)$$

بالتعويض من المعادلة (٣) بالمعادلة (١) وإجراء التكامل بالنسبة للزمن، واعتبار الشرط الحدودي $x_H(0) = x_o$ ، نجد أن:

$$\frac{dx_H(t)}{dt} = \frac{p_H(t)}{m} = \frac{1}{m}\left(p_o - mgt\right)$$
$$\Rightarrow \quad \boxed{x_H(t) = x_o + \frac{1}{m}\left(p_o t - \frac{1}{2}mgt^2\right)} \quad (٤)$$

المعادلتان (٣) و(٤) هما معادلتا المسار.

بالطبع، باستخدام تصور هيزنبرج سوف نجد أن علاقات التبادل بين مؤثرات محسوبة عند أزمنة مختلفة سوف تأخذ صوراً مختلفة عن صورها بتصور شرودنجر. هذا ناتج من اعتماد مؤثرات تصور هيزنبرج على الزمن.

على سبيل المثال، دعونا نعتبر المؤثرات $x(t_1), x(t_2),$ و $p(t_1), p(t_2)$. بالطبع تطور هذه المؤثرات مع الزمن يعتمد على صيغة الهاملتونيان المستخدم. دعونا نستخدم الهاملتونيان للمتذبذب التوافقي في بعد أُحادي بالصورة:

$$H_H(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}_H^2(t) + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}_H^2(t)$$

تصور مؤثر المكان وكمية الحركة الخطية تحققان:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{x}_H(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}(t),\hat{x}_H(t)\right]\\ &= \frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2m}\hat{p}_H^2(t),\hat{x}_H(t)\right]\\ &= \frac{\hat{p}_H(t)}{m},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{p}_H(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}(t),\hat{p}_H(t)\right]\\ &= -m\omega^2\hat{x}_H\end{aligned}$$

بتفاضل المعادلتين السابقتين بالنسبة للزمن مع الشروط الحدودية واعتبارها:

$$\dot{p}_H(0) = -m\omega^2 x_o$$

$$\dot{x}_H(0) = \frac{p_o}{m}$$

نصل للحلول:

$$\boxed{\begin{aligned}x_H(t) &= x_o\cos(\omega t) + \frac{p_o}{m\omega}\sin(\omega t),\\ p_H(t) &= p_o\cos(\omega t) - m\omega x_o\sin(\omega t)\end{aligned}}$$

والآن نستطيع حساب أقواس التبادل بالصورة:

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\hat{x}_H(t_1),\hat{x}_H(t_2)\right] &= \frac{1}{m\omega}\left[p,x\right]\cos(\omega t_2)\cos\left(\omega t_1\right)\\ &+\frac{1}{m\omega}\left[x,p\right]\sin(\omega t_2)\sin\left(\omega t_1\right)\\ &= \frac{i\hbar}{m\omega}\sin(\omega t_2-\omega t_1).\end{aligned}}$$

٣- التصور التفاعلي

تظهر أهمية التصور التفاعلي عند التعامل مع هملتونيان للنظام يكون جزء صغير منه (نستطيع فصله) يعتمد على الزمن. عندما نجد أن المؤثر الهاملتوني الأصلي $\hat{H}_s$ نستطيع تقسيمه إلى حدين: الحد الأول، وهو الأساسي، دعونا نسميه $\hat{H}_{os}$ ،

والحد الثاني V_I فرعي، ويمثل اضطراباً صغيراً بالنسبة إلى $\hat{H}_{os}$ بحيث إن $\hat{H}_{os} >> V_I$، ويعتمد على الزمن. من هذا الوصف نضع:

$$\hat{H}_s = \hat{H}_{os} + V_I$$

$$\psi_I(t) = e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\psi_s(t)$$

$$\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\hat{A}_s e^{-i\hat{H}_{os}t/\hbar}$$

وبحساب القيمة المتوقعة لمؤثر شرودنجر نجد أن:

$$\begin{aligned} <\hat{A}_s>_t &= \left\langle \psi_s(t) \middle| \hat{A}_s \middle| \psi_s(t) \right\rangle \\ &= \left\langle e^{-i\hat{H}_{os}t/\hbar}\psi_I(t) \middle| \hat{A}_s \middle| e^{-i\hat{H}_{os}t/\hbar}\psi_I(t) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_I(t) \middle| e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\hat{A}_s e^{-i\hat{H}_{os}t/\hbar} \middle| \psi_I(t) \right\rangle = \left\langle \hat{A}_I(t) \right\rangle_t \end{aligned} \qquad (4)$$

وهذا يدل، كما توقعنا، أن القيم المتوقعة لمؤثر ما، التي تتكون من أرقام حقيقية، يجب أن تظل كما هي بدون تغيير، ومستقلة عن نوعية التصور المستخدم.

مثال: للدالة $\psi_I(t) = e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\psi_s$ أثبت أن معادلة الحركة هي:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi_I(t)}{\partial t} = V_I(t)\psi_I(t)}$$

الحل: بتفاضل الدالة $\psi_I(t)$ بالنسبة للزمن نجد:

$$\frac{\partial\psi_I(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_{os}e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\psi_s + e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\frac{\partial\psi_s}{\partial t}$$

باستخدام معادلة شرودنجر بالصورة:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_s}{\partial t} = H_s\psi_s = (H_{os} + V_I)\psi_s$$

نجد أن:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi_I(t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar}\cancel{\hat{H}_{os}}e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\psi_s + e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\frac{1}{i\hbar}(\cancel{H_{os}} + V_I)\psi_s \\ &= \frac{1}{i\hbar}e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}V_I\psi_s = \frac{1}{i\hbar}V_I\psi_I \end{aligned}$$

وهو المطلوب إثباته.

الجدول التالي: يلخص تطور نظام ميكانيكا الكم مع الزمن في التصورات الثلاث.

	شرودنجر	هيزنبرج	التفاعل
الدالة ψ_i	تتغير مع الزمن $\psi_s(t) = e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}\psi_s(0)$	لا تتغير مع الزمن $\psi_H = e^{i\hat{H}_s t/\hbar}\psi_s(t) = \psi_s(0)$	تتغير مع الزمن $\psi_I(t) = e^{i\hat{H}_{os} t/\hbar}\psi_s(0)$
المؤثر	ثابت $\hat{A}_s$	يتغير مع الزمن $\hat{A}_H = e^{i\hat{H}_s t/\hbar}\hat{A}_s e^{-i\hat{H}_s t/\hbar}$	يتغير مع الزمن $\hat{A}_I = e^{i\hat{H}_{os} t/\hbar}\hat{A}_s e^{-i\hat{H}_{os} t/\hbar}$
معادلة الحركة	$i\hbar\frac{d\lvert\psi_s(t)\rangle}{dt} = H_s\lvert\psi_s(t)\rangle;$ $\frac{dA_s}{dt} = 0$	$\frac{d\lvert\psi_H\rangle}{dt} = 0;$ $\frac{dA_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H]$	$i\hbar\frac{d\lvert\psi_I(t)\rangle}{dt} = V_I\lvert\psi_I(t)\rangle$ $H_I' = e^{iH_{os}t/\hbar}V_I e^{-iH_{os}t/\hbar};$ $\frac{dA_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I, H_{os}]$ $H_I(t) = H_{os} + V_I$

٤- تمارين عامة

١- استخدم نظرية إيرنفست لحساب الطاقة الحركية لإلكترون بالمستوى الثالث لذرة الهيدروجين.

٢- أثبت أنه في حالة تحقق العلاقة $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C}$ في تصور شرودنجر فإنها تتحقق أيضاً في تصور هيزنبرج.

٣- أثبت أن $\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A}_I(t)\right\rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_I(t), \hat{H}_{oS}\right]\right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}_I(t)}{\partial t}\right\rangle$

٤- تحقق من العلاقات التالية:

$$\left[\hat{p}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)\right] = i\hbar m\omega \sin(\omega t_2 - \omega t_1),$$
$$\left[\hat{x}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)\right] = i\hbar \cos(\omega t_2 - \omega t_1)$$

مع ملاحظة أنه عند تحقق الشرط $t_1 = t_2$ نستطيع الحصول على العلاقات المشهورة للتبادل القانوني في تصور شرودنجر.

٥- للمؤثر $\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_{os}t/\hbar}\hat{A}_s e^{-i\hat{H}_{os}t/\hbar}$ أثبت أن معادلة الحركة هي:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial \hat{A}_I(t)}{\partial t} = \left[\hat{A}_I(t), \hat{H}_{oS}\right]}$$

ملحق (8.A)

الدوال المتجانسة

تعرف الدالة المتجانسة من الدرجة n بالشكل:

$$f(sx_1, sx_2, \cdots, sx_j) = s^n f(x_1, x_2, \cdots, x_j)$$

كمثال نفترض الدالة

$$g = \frac{1}{x^3} + \frac{1}{y^3} + \frac{1}{z^3} + \frac{x}{y^2 z^2}$$

باستخدام التعويضات $x' = sx, y' = sy, z' = sz$ نجد أن الدالة تؤول للشكل:

$$g = s^{-3}\left(\frac{1}{x'^3} + \frac{1}{y'^3} + \frac{1}{z'^3} + \frac{x'}{y'^2 z'^2}\right)$$

وهي تحقق شرط الدالة المتجانسة من الدرجة $n = -3$.

نظرية اويلر: إذا كانت $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ دالة متجانسة من الدرجة n فإن:

$$\sum_{k=1}^{j} x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} = nf$$

مثال: أوجد $\sum_{k=1}^{j} x_k \frac{\partial f}{\partial x_k}$ للدالة المتجانسة من الدرجة الثانية:

$$g(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$$

الحل: بتفاضل الدالة $g(x, y, z)$ نجد:

$$\sum_{k=1}^{j} x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} = x \times (2x) + y \times (2y) + z \times (2z) = 2f$$

ملحوظة: إذا حدث أن كان الجهد "V" دالة متجانسة من الدرجة n في الإحداثيات الكرتيزية، مثلاً، فإن نظرية اويلر تعطينا النتيجة:

$$\sum_{i=1} q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} = nV$$

الباب التاسع

المتذبذب التوافقي الخطي باستخدام نظرية المؤثرات

Linear Harmonic Oscillator Using Operator Theory Approach

الباب التاسع

المتذبذب التوافقي الخطي باستخدام نظرية المؤثرات

لقد تمت دراسة المتذبذب التوافقي الخطي بالباب الخامس، وذلك باستخدام المتسلسلات (دالة هيرميت)، ووجد أن الحل يتطلب خبرة رياضية مكثفة بالمعادلات التفاضلية. ولكننا هنا سوف نتعامل مع المسألة باستخدام طريقة أخرى، وهي طريقة نظرية المؤثرات.

ولكن لماذا هذه الطريقة؟ ذلك لأننا نستطيع من خلالها حساب القيم المميزة والمتوسطة للكميات الفيزيائية مثل المسافة وكمية الحركة الخطية بدون معرفة مسبقة للدالة المميزة، وهذا يعد إنجازاً كبيراً، حيث إننا أُعلمنا سابقاً أننا لا نستطيع حساب القيم المميزة والمتوسطة للكميات الفيزيائية إلا من خلال معلومية الدالة المميزة، ولهذا تم استخدام المعادلات التفاضلية لإيجادها.

١- المؤثر العددي

دعونا نبدأ بالهملتونيان الخاص بالمتذبذب التوافقي الخطي بالشكل:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \qquad (1)$$

وقد وجدنا سابقاً أن الهملتونيان (١) يحقق معادلة شرودنجر:

$$\begin{aligned} &\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \\ &E_n = \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}), \qquad n = 0,1,2,\cdots \end{aligned} \qquad (2)$$

حيث E_n و ψ_n هما القيم والدوال المميزة للهملتونيان (١) بالترتيب. ومن الآن فصاعداً سوف نستخدم تعريف ديراك للدالة وهو $\psi_n \equiv |n\rangle$ حيث خاصيتا المعايرة والتعامد للدوال تحكمهما العلاقة:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad m = n \\ 0 & \text{for} \quad m \neq n \end{cases}$$

حيث $\delta_{m,n}$ هي دالة كرونكر. ولإتمام مهمتنا؛ دعونا نبدأ أولاً بتعريف المؤثرات الجديدة:

$$\begin{aligned} \hat{a} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} + i\hat{p}\right) \\ \hat{a}^\dagger &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} - i\hat{p}\right) \end{aligned} \qquad (3)$$

لاحظ هنا أن هذه المؤثرات عُرفت بدلالة مؤثرات لكميات قياسية (وهما المكان x وكمية الحركة الخطية p وتربطهما العلاقة $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$).

واجب منزلي: باستخدام العلاقة $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ ، أثبت علاقة التبادل التالية:

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \qquad (4)$$

واجب منزلي: من المعادلة (٣) أثبت أن:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right), \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right) \end{aligned} \qquad (5)$$

مثال: بدلالة المؤثرات الجديدة أثبت أن:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \qquad (6)$$

الحل: من المعادلة (٥) نجد أن:

$$\begin{aligned} \hat{x}^2 &= \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\right]^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left\{\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\right\} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right\}, \end{aligned}$$

$$\hat{p}^2 = \left[i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)\right]^2 = -\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)\left\{\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)\right\}$$
$$= -\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)\left\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\right\}$$

و من المعادلتين (١) و(٤) نجد:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{1}{2m}\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)\left\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\right\}$$
$$+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right\}$$
$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1\right) = \underline{\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)}$$

سنتوقف هنا قليلاً للتحدث عن المعادلة (٦) التي ظهر فيها مؤثر جديد وهو $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ ، ويدعي "المؤثر العددي" الذي له الخواص التالية:

١- $\hat{N}$ مؤثر هيرميتي نظراً لأن:

$$\hat{N}^\dagger = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)^\dagger = \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N}.$$

٢- لأن المؤثر $\hat{H}$ مرتبط مع $\hat{N}$ بعلاقة خطية فهما متلازمان، بمعنى أن:

$$\left[\hat{N}, \hat{H}\right] = 0.$$

٣- ونتيجةً للخاصية رقم ٢ فإن $\hat{H}$ و $\hat{N}$ يكون لهما نفس الدالة المميزة $|n\rangle$، وبمقارنة المعادلتين (٢) و(٦) نجد أن:

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \qquad (7)$$

نظرية: إذا كانت الدالة المميزة $|n\rangle$ للمؤثر $\hat{N}$ لها القيمة المميزة n فإن $n \geq 0$.

الإثبات: بضرب المعادلة $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ من اليسار بالمتجه $\langle m|$ ينتج:

$$\langle m|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n\langle m|n\rangle = n\delta_{mn}.$$

وحيث إن الطرف الأيسر هو المعيار (Norm) فهو قيمة موجبة ومن ثم فإن $n \geq 0$.

واجب منزلي: **أثبت** أن:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\,\hat{a}^{\dagger} - \frac{1}{2}\right) \tag{8}$$

٢- المؤثرات الدرجية

دعونا ندرس الآن تأثير كل من $\hat{a}^{\dagger}$ و $\hat{a}$ على الدالة المميزة للمتذبذب التوافقي الخطي $|n\rangle$. بتأثير $\hat{a}$ سوف ينتج لنا متجه جديد، وهو $\hat{a}|n\rangle$. وبتأثير $\hat{H}$ على المتجه الجديد ينتج التالي، (وذلك باستخدام المعادلة (٨)):

$$\hat{H}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = \left\{\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - \frac{1}{2}\right)\right\}\left(\hat{a}|n\rangle\right) \tag{9}$$

وبتفكيك الطرف الأيمن للمعادلة (٩) نجد:

$$\hat{H}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}\underbrace{\hat{a}^{\dagger}\hat{a}}_{\hat{N}}\right)|n\rangle - \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{a}|n\rangle \tag{10}$$

وباستخدام المعادلتين (٦) و (٧) نصل إلى:

$$\hat{H}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = \hbar\omega\hat{a}\underbrace{\hat{N}\,|n\rangle}_{n|n\rangle} - \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{a}|n\rangle = \left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(\hat{a}|n\rangle\right) \tag{11}$$

وباسترجاع المعادلة $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ينتج:

$$\hat{H}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = \left(E_n - \hbar\omega\right)\left(\hat{a}|n\rangle\right) \tag{12}$$

واجب منزلي: بطريقة مماثلة للخطوات السابقة أثبت أن:

$$\hat{H}\left(\hat{a}^{\dagger}|n\rangle\right) = \left(E_n + \hbar\omega\right)\left(\hat{a}^{\dagger}|n\rangle\right) \tag{13}$$

ماذا نستنتج من المعادلتين السابقتين؟ بالنظر أولاً إلى المعادلة (١٢) نجد أنها معادلة قيم مميزة؛ للهملتونيان $\hat{H}$ ولكن لها الدالة المميزة $\hat{a}|n\rangle$ والقيمة المميزة $(E_n - \hbar\omega)$. ومعنى هذا: أن تأثير $\hat{a}$ على الدالة المميزة الأصلية $\langle n|$، التي لها القيم المميزة E_n، أنتج لنا دالة مميزة جديدة هي $\hat{a}|n\rangle$. هذه الدالة الجديدة جعلت للهملتونيان $\hat{H}$ قيماً مميزةً جديدة، وهي $(E_n - \hbar\omega)$. وحيث إن القيمة المميزة الجديدة للطاقة أقل من القيمة الأصلية E_n، بمقدار وحدة طاقة $(\hbar\omega)$، فإن المؤثر الجديد $\hat{a}$ يدعى المؤثر (الدرجي) السُلمي أو مؤثر الإفناء (annihilation operator) أو المؤثر التنازلي (lowering operator).

بتطبيق نفس التحليل السابق على المعادلة (١٣) نجد أن تأثير $\hat{a}^\dagger$ على الدالة المميزة الأصلية $\langle n|$، أنتج لنا دالة مميزة جديدة هي $\hat{a}^\dagger|n\rangle$. هذه الدالة الجديدة جعلت للهملتونيان $\hat{H}$ قيماً مميزةً جديدة، وهي $(E_n + \hbar\omega)$. وحيث إن القيمة المميزة الجديدة للطاقة أعلى من القيمة الأصلية E_n، بمقدار وحدة طاقة $(\hbar\omega)$، فإن المؤثر الجديد $\hat{a}^\dagger$ يدعى مؤثر التخليق (creation operator) أو المؤثر التصاعدي (raising operator).

مثال: استخدم مؤثر الفناء $\hat{a}$ لحساب طاقة المستوى الأرضي E_0 للمتذبذب التوافقي الخطي.

الحل: نعلم من دراستنا السابقة: أن الطاقة الكلية للمتذبذب التوافقي الخطي كمية موجبة دائماً. ومن ثم إذا استخدمنا مؤثر الفناء $\hat{a}$ على دالة المستوى الأرضي $\langle 0|$ فإننا لن نحصل على كمية سالبة، ولكن نحصل على صفر، وتمثل رياضياً بالمعادلة:

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{14}$$

وهذا الشرط يُسهل لنا الحصول على طاقة أقل مستوى، وذلك بدراسة تأثير $\hat{H}$ على الدالة $\langle 0|$ واستخدام المعادلة (٦) نجد:

$$\begin{aligned}\hat{H}|0\rangle &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \tfrac{1}{2}\right)|0\rangle \\ &= \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle + \tfrac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle\end{aligned}$$

لاحظ أنه باستخدام المعادلة (١٤) فإن الحد الأول بالمعادلة السابقة سوف يؤول للصفر، ويتبقى الحد الثاني وهو:

$$\hat{H}\,|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \tag{15}$$

من ثم طاقة المستوى الأرضي للمتذبذب التوافقي الخطي تساوى القيمة:

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega} \tag{16}$$

من نتيجة المثال السابق نستطيع أن نحسب القيم المميزة العليا باستخدام المؤثر التصاعدي. على سبيل **المثال**: بالتأثير على الدالة المميزة $\langle 0|$ بالمؤثر $\hat{a}^\dagger$ ثم بالمؤثر $\hat{H}$ ينتج (بعد استخدامنا للمعادلة (١٣) مع وضع $n=0$) المعادلة التالية:

$$\begin{aligned}\hat{H}\,|1\rangle &= \hat{H}\left(\hat{a}^\dagger\,|0\rangle\right) = \left(E_0 + \hbar\omega\right)\left(\hat{a}^\dagger\,|0\rangle\right)\\ &= \frac{3}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\,|0\rangle\right) = \frac{3}{2}\hbar\omega|1\rangle\end{aligned} \tag{17}$$

ومنها نجد أننا حصلنا على معادلة مميزة لها القيمة المميزة $\frac{3}{2}\hbar\omega$. بتكرار العملية السابقة عدد n من المرات نصل إلى القيمة المميزة العامة (انظر المعادلة (٢))

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,\ldots \tag{18}$$

مثال: إذا فرضنا أن المؤثر التصاعدي $\hat{a}^\dagger$ يؤثر على الدالة المميزة $\langle n|$ ويعطينا المعادلة المميزة:

$$\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = c_{n+1}\,|n+1\rangle \tag{19}$$

احسب الثابت c_{n+1}.

الحل: لحساب الثابت c_{n+1} دعونا نتعامل مع الضرب القياسي التالي:

$$\begin{aligned}\langle n\,|\hat{a}\hat{a}^\dagger\,|n\rangle &= \left(\langle n\,|\hat{a}\right)\left(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle\right) = \left(\langle\hat{a}^\dagger n\,|\right)\left(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle\right)\\ &= (c^*_{n+1})(c_{n+1})\underbrace{\langle n+1|n+1\rangle}_{=1}\\ &= |c_{n+1}|^2\end{aligned} \tag{20}$$

حيث استخدمنا $\left\langle \hat{a}^{\dagger}n\right| = c_{n+1}^{*}\left\langle n+1\right|$ وذلك من المعادلة (١٩). وباستخدام العلاقة $\hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}+1$ بالطرف الأيسر من (٢٠) نجد أن:

$$\begin{aligned} \left|c_{n+1}\right|^2 &= \left\langle n\left|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+1\right|n\right\rangle = \left\langle n\left|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right|n\right\rangle + \left\langle n|n\right\rangle \\ &= \left\langle n\left|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right|n\right\rangle + 1 = n+1 \end{aligned} \tag{21}$$

وذلك تم باستخدام المعادلة (٧). ومن (٢١) نجد أن:

$$c_{n+1} = \sqrt{n+1} \tag{22}$$

وهو المطلوب إثباته.

من ثم فإن:

$$\boxed{\hat{a}^{\dagger}\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle} \tag{23}$$

مثال: استخدم المعادلة (٢٣) لحساب $\hat{a}^{\dagger 3}\left|n\right\rangle$.

الحل: باستخدام المعادلة (٢٣) ثلاث مرات متتالية ينتج:

$$\begin{aligned} \hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\left(\hat{a}^{\dagger}\left|n\right\rangle\right) &= \hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\left(\sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle\right) \\ &= \sqrt{n+1}\,\hat{a}^{\dagger}\left(\hat{a}^{\dagger}\left|n+1\right\rangle\right) \\ &= \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\left(\hat{a}^{\dagger}\left|n+2\right\rangle\right) \\ &= \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}\left|n+3\right\rangle \end{aligned}$$

مثال: استخدم تعريف القيمة المتوسطة $\hat{A}_{m,n} = \left\langle m\,|\,\hat{A}\,|\,n\right\rangle$ لكتابة التمثيل المصفوفي للمؤثر $\hat{a}^{\dagger}$.

الحل: بضرب المعادلة (٢٣) من الجهة اليسرى بالمتجه $\left\langle m\right|$ ينتج:

$$\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle \equiv \hat{a}^\dagger_{m,n} = \sqrt{n+1}\langle m | n+1 \rangle$$
$$= \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} = \sqrt{n+1} \times \begin{cases} 1 & \text{for} \quad m = n+1 \\ 0 & \text{for} \quad m \neq n+1 \end{cases}$$

ونجد التمثيل المصفوفي للمؤثر $\hat{a}^\dagger$ ويعطي بالشكل $\left(\hat{a}^\dagger\right)$ حيث:

$$\left(\hat{a}^\dagger\right) = \begin{array}{c} \\ \langle 0| \\ \langle 1| \\ \langle 2| \\ \vdots \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |0\rangle & |1\rangle & |2\rangle & \cdots \end{array} \\ \begin{pmatrix} \hat{a}^\dagger_{0,0} & \hat{a}^\dagger_{0,1} & \hat{a}^\dagger_{0,2} & 0 & \cdots \\ \hat{a}^\dagger_{1,0} & \hat{a}^\dagger_{1,1} & \hat{a}^\dagger_{1,2} & 0 & \cdots \\ \hat{a}^\dagger_{2,0} & \hat{a}^\dagger_{2,1} & \hat{a}^\dagger_{2,2} & 0 & \cdots \\ \hat{a}^\dagger_{3,0} & \hat{a}^\dagger_{3,1} & \hat{a}^\dagger_{3,2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \end{array} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

واجب منزلي: إذا افترضنا أن المؤثر التنازلي $\hat{a}$ يؤثر على الدالة المميزة $|n\rangle$ ويعطينا المعادلة المميزة الآتية:

$$\hat{a}|n\rangle = c_{n-1}|n-1\rangle \tag{24}$$

أثبت أن $c_{n-1} = \sqrt{n}$.

مثال: استخدم المعادلة (٢٤) لحساب $\hat{a}^3|n\rangle$.

الحل: باستخدام المعادلة (٢٤) ثلاث مرات متتالية ينتج:

$$\hat{a}\hat{a}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = \hat{a}\hat{a}\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle\right) = \sqrt{n}\,\hat{a}\left(\hat{a}|n-1\rangle\right)$$
$$= \sqrt{n}\sqrt{n-1}\left(\hat{a}|n-2\rangle\right)$$
$$= \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}\,|n-3\rangle$$

مع وجوب الشرط $n \geq 3$.

مثال: استخدم المعادلتين (٢٣) و (٢٤) لحساب $\langle m|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle$.

الحل: نبدأ أولاً بحساب:

$$\hat{a}\left(\hat{a}^{\dagger}\left|n\right\rangle\right)=\sqrt{n+1}\,\hat{a}\left|n+1\right\rangle=\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\left|n\right\rangle$$

وبضرب المعادلة السابقة من اليسار بالمتجه $\langle m|$ نجد:

$$\left\langle m\left|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\right|n\right\rangle=\left(n+1\right)\left\langle m\left|n\right.\right\rangle=\left(n+1\right)\delta_{m,n}$$
$$=\left(n+1\right)\times\begin{cases}1 & \text{for}\quad m=n\\ 0 & \text{for}\quad m\neq m\end{cases}$$

واجب منزلي: استخدم المعادلتين (٢٣) و (٢٤) لإثبات أن

$$\left\langle m\left|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right|n\right\rangle=n\times\begin{cases}1 & \text{for}\quad m=n\\ 0 & \text{for}\quad m\neq m\end{cases}.$$

ملخص: لقد وجدنا في هذا الباب الحقائق التالية:

أ- أوجدنا الطاقة الكمية للمتذبذب التوافقي الخطي بالمعادلة (١٨).

ب- أوجدنا كيف يؤثر المؤثر التصاعدي والتنازلي على دالة الطاقة المميزة بالمعادلتين (٢٣) و (٢٤). هاتان المعادلتان مهمتان لحساب القيم المتوسطة للكميات الفيزيائية (مثل المسافة وكمية الحركة الزاوية إلخ).

ج- تم التعامل مع جميع الحسابات بدون اللجوء إلى الصيغة العامة للدالة المميزة أو معرفتها، وهذا هو المهم بهذا الموضوع.

٣- أمثلة محلولة

١- استخدم المعادلات الآتية:

$$\boxed{\begin{aligned}&\hat{a}^{\dagger}\left|m\right\rangle=\sqrt{m+1}\left|m+1\right\rangle\quad\Rightarrow\quad\left\langle n\left|\hat{a}^{\dagger}\right|m\right\rangle=\sqrt{m+1}\underbrace{\left\langle n\left|m+1\right.\right\rangle}_{\delta_{n,m+1}};\\&\hat{a}\left|m\right\rangle=\sqrt{m}\left|m-1\right\rangle\qquad\ \ \Rightarrow\quad\left\langle n\left|\hat{a}\right|m\right\rangle=\sqrt{m}\underbrace{\left\langle n\left|m-1\right.\right\rangle}_{\delta_{n,m-1}};\end{aligned}}$$

والعلاقة $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$ ، للتأكد من صحة الحسابات التالية:

$$\begin{aligned}\langle l\,|\,\hat{x}\,|\,n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big[\langle l\,|\,a^\dagger\,|\,n\rangle + \langle l\,|\,a\,|\,n\rangle\Big]\\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big[\sqrt{n+1}\;\delta_{l,n+1} + \sqrt{n}\;\delta_{l,n-1}\Big]\end{aligned}$$

ومنه تحقق من أن:

$$\langle l\,|\,\hat{x}\,|\,n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \times \begin{cases}\sqrt{n+1} & \text{for} \quad l = n+1\\ \sqrt{n} & \text{for} \quad l = n-1\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$$

و

$$\begin{aligned}\langle l\,|\,\hat{x}^2\,|\,n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big\langle\big(a + a^\dagger\big)^2\Big\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\Big\{\Big\langle l\,|\,\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\big|n\Big\rangle\Big\}\\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big[\langle l\,|\,a^\dagger a^\dagger\,|\,n\rangle + \langle l\,|\,a^\dagger a\,|\,n\rangle + \langle l\,|\,aa^\dagger\,|\,n\rangle + \langle l\,|\,aa\,|\,n\rangle\Big]\\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\Big[\sqrt{(n+1)(n+2)}\;\delta_{l,n+2} + (2n+1)\;\delta_{l,n} + \sqrt{n(n-1)}\;\delta_{l,n-2}\Big]\end{aligned}$$

ومنه تحقق من أن:

$$\langle l\,|\,\hat{x}^2\,|\,n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \times \begin{cases}\sqrt{(n+1)(n+2)} & \text{for} \quad l = n+2\\ (2n+1) & \text{for} \quad l = n\\ \sqrt{n(n-1)} & \text{for} \quad l = n-2\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$$

٢- استخدم التعريف $\hat{A}_{n,n} = \langle n\,|\,\hat{A}\,|\,n\rangle$ لحساب كل من القيم: $\langle\hat{x}\rangle$ ، $\langle\hat{x}^2\rangle$ ، $\langle\hat{p}\rangle$ و $\langle\hat{p}^2\rangle$.

الحل: باستخدام المعادلات بالمثال السابق (وأيضاً المعادلة (٤)) نجد أن:

$$\langle\hat{x}\rangle = 0;$$

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle \left(a + a^\dagger\right)^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{ \left\langle n \,|\, \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \middle| n \right\rangle \right\}$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{ \left\langle n \,|\, \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \middle| n \right\rangle \right\} = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{ \left\langle n \,|\, 2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 1 \middle| n \right\rangle \right\}$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{ \left\langle n \,|\, 2\hat{N} + 1 \middle| n \right\rangle \right\} = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(2n+1\right)$$
$$= \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

وبالمثل:

$$\left\langle \hat{p} \right\rangle = 0;$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\langle \left(a - a^\dagger\right)^2 \right\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{ \left\langle n \,|\, \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \middle| n \right\rangle \right\}$$
$$= \frac{m\hbar\omega}{2}\left\{ \left\langle n \,|\, \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \middle| n \right\rangle \right\} = \frac{m\hbar\omega}{2} \times 2 \times \left\{ \left\langle n \,|\, \hat{N} + \tfrac{1}{2} \middle| n \right\rangle \right\}$$
$$= m\hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

٣- استخدم التعريف $(\hat{A}) = \hat{A}_{m,n} = \left\langle m \,|\, \hat{A} \,|\, n \right\rangle$ لكتابة المصفوفات التي تمثل كلاً من المؤثرات التالية: $\hat{a}$ ، $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ ، $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ ، $\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}$.

الحل:

$$(\hat{a}) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}; \qquad (\hat{a}^\dagger\hat{a}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix};$$

$$\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}; \quad \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

٤- استخدم مؤثر الفناء $\hat{a}$ لحساب دالة المستوى الأرضي ψ_0 للمتذبذب التوافقي الخطي.

الحل: علمنا سابقاً أن:

$$\hat{a}\left|\psi_0\right\rangle = 0$$

وباستخدام $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} + i\hat{p}\right)$ حيث $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ بالمعادلة السابقة نجد:

$$\left(i(-i\hbar\frac{d}{dx}) + m\omega x\right)\psi_o(x) = 0$$

$$\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_o(x) = 0$$

ومع بعض الترتيبات نجد:

$$\hbar\frac{d\psi_o(x)}{dx} = -m\,\omega x\,\psi_o$$

$$\frac{d\psi_o(x)}{\psi_o} = -\frac{m\,\omega}{\hbar}x\,dx$$

وبإجراء التكامل لكلا الطرفين، نجد:

$$\psi_o(x) = Ne^{-\alpha x^2}, \qquad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

حيث N هو ثابت التكامل. من شرط المعايرة $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_o^2(x)\,dx = 1$ نجد أن $N^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$.

وقد استخدمنا التكامل القياسي $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$.

٥- أثبت أن:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

الحل: باستخدام العلاقة $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ نجد أن

$$\hat{a}^\dagger|0\rangle = \sqrt{1}|1\rangle; \quad \hat{a}^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle; \quad \hat{a}^\dagger|2\rangle = \sqrt{3}|3\rangle$$

من ثم فإن:

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3\times 2}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^2|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3\times 2\times 1}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^3|0\rangle$$

ولهذا فإن الحالة العامة تحكمها العلاقة: $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$.

٦- جسيم كتلة m واقع تحت تأثير جهد متذبذب توافقي خطي بدأ عند الزمن $t=0$ من المستوى $\left|\psi(t=0)\right\rangle = N\left(\sqrt{2}|0\rangle + |3\rangle\right)$.

أ- تحقق من ثابت العيارية.

$$1=\langle\psi,0|\psi,0\rangle = N^2\left[2\langle 0|0\rangle - \sqrt{2}\langle 0|3\rangle - \sqrt{2}\langle 3|0\rangle + \langle 3|3\rangle\right]$$
$$= N^2[2-0-0+1] = 3N^2$$
$$\Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

ب- تحقق من أن المستوى للجسيم عند الزمن t يعطي بالعلاقة:

$$|\psi,t\rangle = N\left[\sqrt{2}e^{-iE_o t/\hbar}|0\rangle - e^{-iE_3 t/\hbar}|3\rangle\right]; \qquad E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$
$$=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}e^{-i\omega t/2}|0\rangle - e^{-i7\omega t/2}|3\rangle\right]$$

ج- تحقق من القيمة المتوقعة التالية:

$$\langle\psi,t|\hat{H}|\psi,t\rangle = \langle\psi,0|\hat{H}|\psi,0\rangle$$
$$=|N|^2\left[2E_o + (-1)^2E_3\right] = \tfrac{2}{3}E_o + \tfrac{1}{3}E_3$$
$$=\frac{3}{2}\hbar\omega$$

حيث استخدمنا الهاملتونيان $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$.

د- تحقق من القيمة المتوقعة التالية:

$$\langle\psi,t|\hat{V}|\psi,t\rangle = \langle\psi,0|\tfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2|\psi,0\rangle$$
$$=\frac{1}{4}\hbar\omega|N|^2\left[2\langle 0|2\hat{a}^\dagger\hat{a}+1|0\rangle + \langle 3|2\hat{a}^\dagger\hat{a}+1|3\rangle\right]$$
$$=\frac{1}{12}\hbar\omega[2(0+1)+(6+1)] = \frac{3}{4}\hbar\omega$$

وذلك باستخدام

$$\hat{V} = \tfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \tfrac{1}{2}m\omega^2\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)\right]^2$$
$$=\tfrac{1}{4}\hbar\omega\left(\hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^{\dagger 2}\right)$$
$$=\tfrac{1}{4}\hbar\omega\left(\hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 + \hat{a}^{\dagger 2}\right)$$

والعلاقات:

$$\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1,\ \hat{a}^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}|m+1\rangle,\ \hat{a}|m\rangle = \sqrt{m}|m-1\rangle,$$

$\langle 0|\hat{a}^2|3\rangle = \langle 0|\hat{a}^2|0\rangle = 0,$ الخ.

٤- تمارين عامة

١- للمتذبذب التوافقي الخطي استخدم التعريف $\langle \hat{A} \rangle = \langle n | \hat{A} | n \rangle$ لإثبات أن

$\langle \hat{a} \rangle$	0	$\langle \hat{x} \rangle$	0
$\langle \hat{a}^\dagger \rangle$	0	$\langle \hat{p} \rangle$	0
$\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger \rangle$	$n+1$	$\langle \hat{x}^2 \rangle$	$\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)$
$\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$	n	$\langle \hat{p}^2 \rangle$	$m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

٢- احسب القيم:

$$\Delta\hat{x} = \sqrt{<\hat{x}^2> - <\hat{x}>^2} \quad \text{و} \quad \Delta\hat{p} = \sqrt{<\hat{p}^2> - <\hat{p}>^2}$$

و أثبت أن $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = (n+\frac{1}{2})\hbar$.

٣- أثبت العلاقات التالية:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right);$$
$$\left[\hat{a}, H\right] = \hbar\omega\hat{a};$$
$$\left[\hat{a}^\dagger, H\right] = -\hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

٤- استخدم مؤثر الفناء $\hat{a}$ لحساب دالة المستوى $\langle 1|$ للمتذبذب التوافقي الخطي.

٥- اعتبر الهملتونيان للمتذبذب التوافقي الخطي باتجاهي المحور السيني والصادي للإحداثيات الكرتيزية يُعطى بالشكل:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{k}{2}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \qquad k = m\omega^2$$

أثبت أن

$$\hat{H} = \left(\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y + 1\right)\hbar\omega,$$
$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = i\hbar(\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y)$$
$$\left[\hat{L}_z, \hat{H}\right] = 0$$

حيث

$$\hat{p}_x = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}_x^{\dagger} - \hat{a}_x\right), \qquad \hat{p}_y = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}_y^{\dagger} - \hat{a}_y\right)$$

ملحوظة: استخدم علاقات التبادل التالية:

$$\left[\hat{x},\hat{y}\right] = \left[\hat{x},\hat{p}_y\right] = \left[\hat{y},\hat{p}_x\right] = \left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right] = 0,$$
$$\left[\hat{a}_x,\hat{a}_y\right] = \left[\hat{a}_x,\hat{a}_y^{\dagger}\right] = \left[\hat{a}_x^{\dagger},\hat{a}_y\right] = \left[\hat{a}_x^{\dagger},\hat{a}_y^{\dagger}\right] = 0.$$

٦- باستخدام الهملتونيان:

$$\hat{H} = \left(\hat{a}_x^{\dagger}\hat{a}_x + \hat{a}_y^{\dagger}\hat{a}_y + 1\right)\hbar\omega$$

والدالة

$$\left|n_x, n_y\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|1,0\right\rangle + \left|0,1\right\rangle\right],$$

أثبت أن

$$\left\langle n_x, n_y\right|\hat{H}\left|n_x, n_y\right\rangle = 2\hbar\omega$$

٧- أثبت أن

$$\langle l|\hat{x}^3|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \times \begin{cases} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} & \text{for } l = n+3 \\ 3(n+1)\sqrt{n+1} & \text{for } l = n+1 \\ 3n\sqrt{n} & \text{for } l = n-1 \\ \sqrt{n(n-1)(n-2)} & \text{for } l = n-3 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

و

$$\langle l|\hat{x}^4|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2} \times \begin{cases} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} & \text{for } l = n+4 \\ (4n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)} & \text{for } l = n+2 \\ 6n^2+6n+3 & \text{for } l = n \\ (4n-2)\sqrt{n(n-1)} & \text{for } l = n-2 \\ \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} & \text{for } l = n-4 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

٨-جسيم بدأ من المستوى $\left|\psi(t=0)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|0\right\rangle + \left|1\right\rangle\right)$ عند الزمن $t = 0$.

أ- تحقق من أن المستوى للجسيم عند الزمن t يُعطى بالعلاقة:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_o t/\hbar}\left|0\right\rangle + e^{-iE_1 t/\hbar}\left|1\right\rangle\right),$$
$$E_o = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

ب- أثبت أن:

$$\left\langle x(0)\right\rangle = \left\langle\psi(0)\right|x\left|\psi(0)\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}},$$
$$\left\langle p(0)\right\rangle = \left\langle\psi(0)\right|p\left|\psi(0)\right\rangle = 0,$$
$$\left\langle x(t)\right\rangle = \left\langle\psi(t)\right|x\left|\psi(t)\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos(\omega t),$$
$$\left\langle p(t)\right\rangle = \left\langle\psi(t)\right|p\left|\psi(t)\right\rangle = -\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\sin(\omega t)$$

ج- باستخدام نظرية إيرنفست أثبت أن:

$$\left\langle \dot{x}(t)\right\rangle = \frac{\left\langle p(t)\right\rangle}{m},$$
$$\left\langle \dot{p}(t)\right\rangle = -m\omega^2\left\langle x(t)\right\rangle$$

د- حل المعادلات التفاضلية السابقة وتأكد من الحل:

$$\left\langle x(t)\right\rangle = \left\langle x(0)\right\rangle\cos(\omega t) + \frac{\left\langle p(0)\right\rangle}{m}\sin(\omega t),$$
$$\left\langle p(t)\right\rangle = \left\langle p(0)\right\rangle\sin(\omega t) - m\omega^2\left\langle x(0)\right\rangle\cos(\omega t)$$

الباب العاشر

كمية الحركة الزاوية المغزلية

(Spin Angular Momentum)

الباب العاشر

كمية الحركة الزاوية المغزلية

لكي تتضح الصورة بالنسبة لكمية الحركة الزاوية المغزلية لجسيم غير مرئي (إلكترون مثلاً)؛ دعونا نتكلم أولاً عن حركة جسم مرئي، كالأرض مثلاً. فهي بالإضافة إلى حركتها المدارية حول الشمس، يوجد لها أيضاً حركة دورانية (مغزلية) حول محور مار بمركز ثقلها. ومن ثم فإن كمية الحركة الزاوية الكلية ما هي إلا محصلة الجمع المتجه لكمية الحركة الزاوية الدورانية، وكمية الحركة الزاوية المغزلية.

قياساً على ذلك فإننا نستطيع أن نخمن (نفترض) أن إلكترون الذرة يمتلك هذه الخاصية الذاتية المغزلية. لكن، نتيجة عدم معرفتنا بالتركيبة الداخلية للإلكترون فإننا لا نستطيع وصف كنه الإلكترون على أنه جسيم كروي، ونتيجة لهذا فإننا لا نستطيع حساب كمية الحركة الزاوية المغزلية للإلكترون بنفس طريقة حساب كمية الحركة الزاوية المغزلية للأرض بدلالة نصف قطرها وسرعتها الزاوية. هذا التخمين (الافتراض) لم يأتِ من فراغ، بل جاء نتيجة تجارب معملية مكثفة، في بداية القرن الماضي، لأطياف لبعض العناصر الذرية. أهم هذه التجارب هي:

أ- تجربة شتيرن-جيرلاخ (Stern-Gerlach Experiment)، وتم فيها دراسة تأثير مجال مغناطيسي غير متجانس (Inhomogeneous magnetic field) على إلكترون المستوى الأرضي للذرات الشبيهة بالهيدروجين. وفيها تم انقسام (Split) حزمة من ذرات الفضة إلى حزمتين.

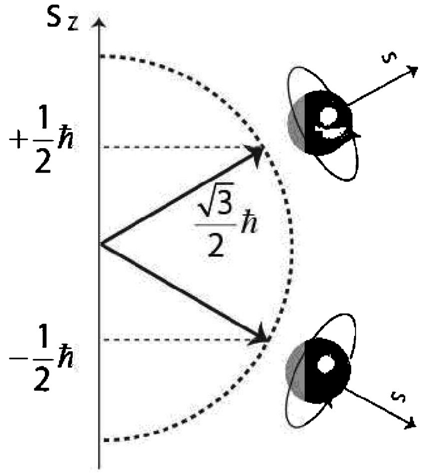
ب- تأثير زيمان (Zeeman effect)، وتم فيها انقسام مستويات الطاقة بالذرات (من ثم الأطياف المصاحبة لها) نتيجة تأثير مجال مغناطيسي.

ج- التركيب الدقيق للمستويات الذرية (Fine structure of atomic levels)، وتم فيها ملاحظة انقسام مستويات الطاقة بالذرات (من ثم الأطياف المصاحبة لها) نتيجة تأثير مجالات داخلية.

١- كمية الحركة الزاوية المغزلية لجسيم

نتيجة لنتائج التجارب المعملية السابقة وجد أن أعداد الكم الأساسية (n, l, m_l) غير كافية لشرح الانتقالات الطيفية بالذرات؛ ولهذا تم إضافة العدد الجديد (s, m_s) حيث s ترمز لعدد الكم المغزلي، ويرمز العدد m_s إلى مسقط المؤثر $\hat{S}_z$ على المحور Z. ومن علمنا بأن درجة الانتماء تحكمها المعادلة $d_s = 2s+1$ ، ومن نتائج تجربة شتيرن-جيرلاخ أن $d_s = 2$ وهذا يعطينا $s = \frac{1}{2}$ ومنها $m_s = \pm\frac{1}{2}$. من ثم نجد (وذلك مقارنةً بكمية الحركة الزاوية الدورانية) أن:

$$\begin{aligned}
&\hat{S}^2 \left|s, m_s\right\rangle = s(s+1)\hbar^2 \left|s, m_s\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \left|s, m_s\right\rangle; \\
&\hat{S}_z \left|s, m_s\right\rangle = m_s\hbar \left|s, m_s\right\rangle \\
&\hat{S}_z^2 \left|s, m_s\right\rangle = m_s^2\hbar \left|s, m_s\right\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2 \left|s, m_s\right\rangle
\end{aligned} \tag{1}$$



شكل (1) الحركة المغزلية لإلكترون يدور حول محوره المار بمركز ثقله، والاتجاهان المحتملان لمتجه كمية الحركة الزاوية المغزلية الذاتية S_z.

القيمتان المميزتان $m_s = \pm\frac{1}{2}$ تشيران إلى الاتجاهين المسموح بهما للدوران المغزلي، انظر شكل (١). وللاختصار فإن $m_s = \frac{1}{2}$ تصف اتجاه الحركة المغزلية نحو الأعلى (spin up (↑)) و $m_s = -\frac{1}{2}$ تصف اتجاه الحركة المغزلية نحو الأسفل (spin down (↓)) هذا بالرغم من أن الحركة المغزلية أصلاً لا تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z ولا حتى الاتجاه السالب.

وتُمثل الدالة المميزة لكمية الحركة الزاوية المغزلية أنماطًا عدة، منها مايلي:

$$\chi_{\pm} = |s, m_s> \equiv \begin{cases} \text{spin up } (\uparrow) \quad \equiv \chi_{+} \equiv \alpha \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}> \quad \equiv |+> \\ \text{spin down } (\downarrow) \equiv \chi_{-} \equiv \beta \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}> \equiv |-> \end{cases} \qquad (٢)$$

ومن أهم خواص هذه الدوال: المعيارية والتعامد. لهذا فإن حاصل الضرب الداخلي بينهما هو:

$$\begin{aligned} \langle + | + \rangle &= \langle - | - \rangle = 1, \\ \langle + | - \rangle &= \langle - | + \rangle = 0 \end{aligned} \qquad (٣)$$

بالرغم من تعدد أوجه الشبه بين كمية الحركة الزاوية المغزلية للإلكترون وبين كمية الحركة الزاوية المدارية، فإنهما يختلفان بشكل جوهري في الآتي:

أ- مؤثر كمية الحركة الزاوية المغزلية هو مؤثر كمي ولا يوجد له مثيل في الفيزياء الكلاسيكية، ومن ثم لا يمكن التعبير عنه بدلالة مؤثرات كلاسيكية ميكانيكية مثل مؤثرات المكان و كمية الحركة الخطية (linear momentum). وقد ظهر هذا الافتراض طبيعياً فقط عندما تعامل العالم ديراك نظرياً مع معادلة شرودنجر باستخدام النظرية النسبية (Theory of relativity).

ب- ونتيجةً للحقيقة الأولى فإن القيم المميزة لكمية الحركة الزاوية المغزلية s غير مقيدة بقيم صحيحة فقط (مثل كمية الحركة الزاوية المدارية l)، ولكنها تأخذ قيماً موجبة (صحيحة وأيضاً أنصاف قيم صحيحة).

ولنتوقف هنا لحظة لنتعرف على مدى أهمية الحركة المغزلية في دراستنا.

تظهر أهمية الحركة المغزلية بحالتين:

١- عندما نتعامل مع دالة شرودنجر الكلية. ولقد تعاملنا مع دالة شرودنجر لذرة الهيدروجين في الإحداثيات الكروية وكتبناها بالصورة:

$$\Psi \equiv \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) = |n,l,m_l\rangle$$

وبإدماج دالة الحركة المغزلية بدالة شرودنجر نجد أن الدالة الكلية تعرف بالتالي:

$$\Psi_{total} \equiv \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\chi_{\pm} = R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\chi_{\pm} = |n,l,m_l,s,m_s\rangle = |n,l,m_l\rangle |s,m_s\rangle \qquad (٤)$$

وتصبح الحالة التي فيها الأعداد الكمية الثلاثة $|n,l,m_l\rangle$ ماهي إلا حالة خاصة من الحالة العامة بعد أن زادت الأعداد الكمية إلى خمسة $|n,l,m_l,s,m_s\rangle$.

٢- عندما نتعامل مع جهد التفاعل (interaction potential) حيث يظهر تفاعل الحركتين المغزلية والدورانية بالإضافة إلى التفاعلات الأخرى الداخلية (مثل التفاعل الكولومي) والخارجية (مثل المجال الكهربي أو المغناطيسي).

وبكلتا الحالتين سنضطر لاستخدام طرق تقريبية لحل معادلة شرودنجر.

وكما ذُكر سابقاً، ونظراً لوجود أوجه الشبه بين كمية الحركة الزاوية الدورانية للإلكترون، وكمية الحركة المغزلية فإننا نستطيع كتابة علاقات التبادل كالتالي:

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}_x,\hat{S}_y\right] &= i\hbar\hat{S}_z, \\ \left[\hat{S}_y,\hat{S}_z\right] &= i\hbar\hat{S}_x, \\ \left[\hat{S}_z,\hat{S}_x\right] &= i\hbar\hat{S}_y \end{aligned} \qquad (٥)$$

وباستخدام التعريف العام للمؤثر التصاعدي $\hat{S}_+$ و التنازلي $\hat{S}_-$ بالصورة:

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \qquad (٦)$$

حيث

$$\hat{S}_{\pm} \,|\, s,m_s> = \hbar\sqrt{s(s+1)-m_s(m_s\pm 1)} \;|\, s,m_s \pm 1> \qquad (٧)$$

وكمثال نجد أن تأثيرهما على المستويين α و β يصبح:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_+\alpha &= \hat{S}_+\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{(3/4)-(1/2)(3/2)}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = 0 \\
\hat{S}_+\beta &= \hat{S}_+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{(3/4)-(-1/2)(1/2)}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\alpha \\
\hat{S}_-\alpha &= \hat{S}_-\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{(3/4)-(1/2)(-1/2)}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\beta \\
\hat{S}_-\beta &= \hat{S}_-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{(3/4)-(-1/2)(-3/2)}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = 0
\end{aligned} \qquad (٨)$$

ولتفسير العلاقات بالمعادلة (٨)، فإننا نعلم أنه لا يوجد غير دالتين مميزتين فقط؛ الأولى هي الدالة المميزة α ، التي لها أعلى قيمة مميزة $m_s = \frac{1}{2}$ ولا يوجد قيمة أعلى منها، ولذلك فإن تأثير $\hat{S}_+$ على α سوف يفنيها، بمعنى أن $\hat{S}_+\alpha = 0$. بالنسبة للدالة المميزة β التي لها أقل قيمة مميزة $m_s = -\frac{1}{2}$ فإنه لا يوجد قيمة أقل منها، ولذلك فإن تأثير $\hat{S}_-$ على β سوف يفنيها، بمعنى أن $\hat{S}_-\beta = 0$.

والجدول التالي يعطينا ملخصاً لبعض نتائج المؤثرات (وقد استخدمنا الوحدات الذرية $\hbar = 1$):

	α	β		α	β
$\hat{S}^2$	$\frac{3}{4}\alpha$	$\frac{3}{4}\beta$	$\hat{S}_y$	$\frac{i}{2}\beta$	$-\frac{i}{2}\alpha$
$\hat{S}_z$	$\frac{1}{2}\alpha$	$-\frac{1}{2}\beta$	$\hat{S}_+$	0	α
$\hat{S}_x$	$\frac{1}{2}\beta$	$\frac{1}{2}\alpha$	$\hat{S}_-$	β	0

واجب منزلي: تحقق من نتائج الجدول السابق.

مثال: أوجد مستويات الطاقة لجسيم له القيمة $s = \frac{1}{2}$ والهملتونين:

$$\hat{H} = a(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - 2\hat{S}_z^2) + b\hat{S}_z$$

حيث a و b ثوابت، وذلك باستخدام الوحدات الذرية.

الحل: بإعادة كتابة الهملتونين بالشكل التالي (مع استخدام $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$):

$$\begin{aligned}\hat{H} &= a(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 - 3\hat{S}_z^2) + b\hat{S}_z \\ &= a\hat{S}^2 - 3a\hat{S}_z^2 + b\hat{S}_z\end{aligned}$$

نجد أن:

$$\begin{aligned}\hat{H}\left|s,m_s\right\rangle &= \left\{a\hat{S}^2 - 3a\hat{S}_z^2 + b\hat{S}_z\right\}\left|s,m_s\right\rangle \\ &= \left\{as(s+1) - 3am_s^2 + bm_s\right\}\left|s,m_s\right\rangle \\ &= \left\{\frac{3}{4}a - 3\frac{1}{4}a + bm_s\right\}\left|s,m_s\right\rangle = bm_s\left|s,m_s\right\rangle\end{aligned}$$

وبضرب المعادلة السابقة من اليسار بالمتجه $\left\langle s,m_s\right|$ واستخدام الخاصية المعيارية نحصل على:

$$\left\langle s,m_s\right|\hat{H}\left|s,m_s\right\rangle = bm_s\left\langle s,m_s|s,m_s\right\rangle = bm_s$$

وحيث إن $m_s = \pm\frac{1}{2}$ فإن مستويات الطاقة للجسيم تكون ثنائية الانتماء (Two-fold degenrate).

٢- التمثيل المصفوفي لكمية الحركة الزاوية المغزلية:

حيث إنه لا يوجد غير دالتين لكمية الحركة الزاوية المغزلية، وهما α و β، لذلك نستطيع تمثيلهما بمصفوفة ثنائية الأبعاد كالتالي:

$$\alpha = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right> = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \beta = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right> = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{٩}$$

وكما أن (x, y, z) هي الأساس لأي متجه r في الإحداثيات الكرتيزية، بالمثل فإن α و β يكونان الأساس لأي مغزل S (Spinor) في الفراغ المغزلي.

مثال: تحقق من النتائج التالية:

$$\alpha^{\dagger}\alpha = <\frac{1}{2},\frac{1}{2}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}> \quad = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 1 = \beta^{\dagger}\beta;$$

$$\beta^{\dagger}\alpha = <\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}> = \begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0 = \alpha^{\dagger}\beta$$

مثال: أثبت أن: $\sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{m_s=\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle\left\langle\frac{1}{2},m_s\right| = \mathbf{1}$ حيث $\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \mathbf{1}$ هي مصفوفة الوحدة الثنائية.

الحل: لاحظ هنا أن التجميع سوف يستخدم حيث إنها دوال منفصلة (discrete functions) وليست دوال متصلة (continuous functions) :

$$\sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{m_s=\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle\left\langle\frac{1}{2},m_s\right| = \beta\beta^{\dagger} + \alpha\alpha^{\dagger}$$

$$= \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \mathbf{1}$$

مثال: أثبت أن التمثيل المصفوفي للمؤثر $\hat{S}_z$ هو:

$$\left(\hat{S}_z\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

الحل: التمثيل المصفوفي للمؤثر $\hat{S}_z$ يأتي من استخدام:

$$\left(\hat{S}_z\right) = \begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{S}_z|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{S}_z|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{S}_z|\beta\rangle\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\langle\alpha|\alpha\rangle & -\frac{\hbar}{2}\langle\alpha|\beta\rangle\\ \frac{\hbar}{2}\langle\beta|\alpha\rangle & -\frac{\hbar}{2}\langle\beta|\beta\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\times 1 & -\frac{\hbar}{2}\times 0\\ \frac{\hbar}{2}\times 0 & -\frac{\hbar}{2}\times 1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

مثال: أوجد التمثيل المصفوي للمؤثر $\hat{S}_+$.

الحل: التمثيل المصفوي للمؤثر $\hat{S}_+$ يأتي من استخدام:

$$\left(\hat{S}_+\right)=\begin{pmatrix}\langle +|\hat{S}_+|+\rangle & \langle +|\hat{S}_+|-\rangle \\ \langle -|\hat{S}_+|+\rangle & \langle -|\hat{S}_+|-\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -\hbar\langle +|+\rangle \\ 0 & -\hbar\langle -|+\rangle\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

واجب منزلي: تحقق من التمثيل المصفوي للمؤثرات التالية:

$$\left(\hat{S}_-\right)=\begin{pmatrix}\langle +|\hat{S}_-|+\rangle & \langle +|\hat{S}_-|-\rangle \\ \langle -|\hat{S}_-|+\rangle & \langle -|\hat{S}_-|-\rangle\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

$$\left(\hat{S}_x\right)=\frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

$$\left(\hat{S}_y\right)=\frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

مثال: احسب القيم والدوال المميزة للمؤثر $\hat{S}_x$

الحل: معادلة القيم المميزة تعرف بالمعادلة:

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}\quad\Rightarrow\quad\begin{pmatrix}-2\lambda/\hbar & 1\\ 1 & -2\lambda/\hbar\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=0$$

في الحقيقة هذه صيغة مختصرة لمعادلتين متجانستين في المجهولين a و b (وبالتأكيد λ أيضاً). لحساب λ يجب أن نحل معادلة المحدد العام الصفرية وهي:

$$\begin{vmatrix}-2\lambda/\hbar & 1\\ 1 & -2\lambda/\hbar\end{vmatrix}=0$$

ومنها نحصل على المعادلة التي تحدد القيم المميزة:

$$(2\lambda/\hbar)^2 - 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$$

ولحساب الدوال المميزة a و b لكل قيمة مميزة: نستخدم القيمة المميزة الأولى $\lambda = \frac{\hbar}{2}$ نجد المعادلة $\begin{pmatrix} -2\lambda/\hbar & 1 \\ 1 & -2\lambda/\hbar \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$ تعطي $a = b$. وباستخدام شرط المعايرة $a^2 + b^2 = 1$ نجد أن $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$. للقيمة المميزة الثانية $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$ نجد المعادلة $\begin{pmatrix} -2\lambda/\hbar & 1 \\ 1 & -2\lambda/\hbar \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$ تعطي $a = -b$. وباستخدام شرط المعايرة $a^2 + b^2 = 1$ نجد أن $a = -b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$. الجدول التالي يحتوى على ملخص للمستويات والقيم المميزة:

$(\hat{S}_x) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	القيم المميزة	الرمز	المستويات المميزة
	$\frac{\hbar}{2}$	$\lvert +_x \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha + \beta\}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$\lvert -_x \rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha - \beta\}$

واجب منزلي: احسب القيم والدوال المميزة للمؤثرات $\hat{S}_y, \hat{S}_z$ وتأكد من الجدولين التاليين:

المستويات المميزة	الرمز	القيم المميزة	$\left(\hat{S}_z\right)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$	$\lvert+\rangle$	$\frac{\hbar}{2}$	
$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$	$\lvert-\rangle$	$-\frac{\hbar}{2}$	

المستويات المميزة	الرمز	القيم المميزة	$\left(\hat{S}_y\right)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+i\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha+i\beta\}$	$\lvert+_y\rangle$	$\frac{\hbar}{2}$	
$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}-i\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha-i\beta\}$	$\lvert-_y\rangle$	$-\frac{\hbar}{2}$	

من المهم هنا أن نوضح الآتي: أنه إذا تواجد الإلكترون في الحالة المغزلية نحو الأعلى ((↑) spin up) دائماً أو الحالة المغزلية نحو الأسفل ((↓) spin down) دائماً فإن القيم المتوقعة

$$<\hat{S}_x> = <\hat{S}_y> = 0$$

ولكن

$$<\hat{S}_x^2> = <\hat{S}_y^2> = \frac{\hbar^2}{4}.$$

وهذا معناه أنه مهما يكن حالة الإلكترون سواء بالمستوى α أو β فإن مُركبتيه $<\hat{S}_x^2>$ و $<\hat{S}_y^2>$ لا تؤولان للصفر أبداً.

٣- مصفوفات باولي

سيتم هنا تعريف المؤثر في الفراغ المغزلي ذي الثلاثة أبعاد كالتالي:

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}\right) \quad (١٠)$$

حيث تعرف $\boldsymbol{\sigma}$ بمصفوفات باولي كالتالي:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (١١)$$

والتي لها الخواص التالية:

$$\begin{aligned}
&\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1}, \\
&Tr(\sigma_i) = 0, \\
&\det|\sigma_i| = -1, \\
&\left\{\sigma_i, \sigma_j\right\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}, \qquad (i, j) = (x, y, z)
\end{aligned} \quad (١٢)$$

ملحوظة: لهذا النوع من المصفوفات أهمية خاصة، وذلك لاستخداماتها المتعددة في الفيزياء المتقدمة، وحديثاً في فرع الحاسوب الكمي (Quantum computing).

واجب منزلي: تحقق من التالي:

$$\begin{aligned}
\sigma_z |+\rangle &= |+\rangle, \\
\sigma_z |-\rangle &= -|-\rangle
\end{aligned}$$

بالإمكان تعريف المؤثرات التصاعدية والتنازلية لمصفوفات باولي كالتالي:

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}\left(\sigma_x \pm \sigma_y\right)$$

واجب منزلي: تحقق من التالي:

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\sigma_+ \left|+\right\rangle = 0,$$
$$\sigma_+ \left|-\right\rangle = \left|+\right\rangle,$$
$$\sigma_- \left|+\right\rangle = \left|-\right\rangle,$$
$$\sigma_- \left|-\right\rangle = 0$$

٤- الحركة المغزلية لإلكترونين

باقتراض وجود حركتين مغزليتين منفصلتين تماماً، نجد أن:

$$\begin{aligned} \hat{s}_{iz} \left|s_i m_i\right\rangle &= m_i \hbar \left|s_i m_i\right\rangle \\ \hat{s}_i^2 \left|s_i m_i\right\rangle &= s_i (s_i + 1)\hbar^2 \left|s_i m_i\right\rangle \end{aligned} \qquad \text{(I)}$$

حيث $i = 1,2$.

سوف نفترض حاصل ضرب الممتدات (Tensor product) يأخذ صورة التمثيل المنفصل

$$\left|s_1 m_1 s_2 m_2\right\rangle \equiv \left|s_1 m_1\right\rangle \left|s_2 m_2\right\rangle \qquad \text{(II)}$$

حيث $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ فنجد أن تأثير المؤثرين $\hat{s}_{iz}$ و $\hat{s}_i^2$ على الحركة مغزلية لحاصل الضرب يُعطى بالعلاقة:

$$\begin{aligned}
\hat{s}_{1z}\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle &= m_1\hbar\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle \\
\hat{s}_1^2\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle &= s_1(s_1+1)\hbar^2\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle \\
\hat{s}_{2z}\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle &= m_2\hbar\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle \\
\hat{s}_2^2\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle &= s_2(s_2+1)\hbar^2\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle
\end{aligned} \qquad \text{(III)}$$

مع ملاحظة أن $\hat{s}_{iz}$ و $\hat{s}_{iz}$ يؤثران على الجسيم i فقط.

من (III) نجد :

$$\begin{aligned}
\hat{s}_z\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle &= \left(\hat{s}_{1z}+\hat{s}_{2z}\right)\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle \\
&= \left(\hat{s}_{1z}\left|s_1m_1\right\rangle\right)\left|s_2m_2\right\rangle + \left(\hat{s}_{2z}\left|s_2m_2\right\rangle\right)\left|s_1m_1\right\rangle \\
&= \hbar\left[\left(m_1\left|s_1m_1\right\rangle\right)\left|s_2m_2\right\rangle + \left(m_2\left|s_2m_2\right\rangle\right)\left|s_1m_1\right\rangle\right] \\
&= \left(m_1+m_2\right)\hbar\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle \\
&= m\hbar\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle
\end{aligned} \qquad \text{(IV)}$$

حيث:

$$m = m_1 + m_2 \qquad \text{(V)}$$

المعادلة (IV) توضح أن الدالة $\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle$ هي دالة مميزة للمؤثر $\hat{s}_z$. وحيث إن المؤثر $\hat{s}_z$ يحقق العلاقة التبادلية مع المؤثر $\hat{s}^2$، **حيث إن:**

$$\hat{s}^2 = \left(\hat{s}_1+\hat{s}_2\right)^2$$

$$\hat{s}^2 = \left(\hat{s}_{1x}+\hat{s}_{2x}\right)^2 + \left(\hat{s}_{1y}+\hat{s}_{2y}\right)^2 + \left(\hat{s}_{1z}+\hat{s}_{2z}\right)^2$$

لذلك فنحن بصدد البحث عن دالة تكون مميزة لكل من $\hat{s}_z$ و $\hat{s}^2$. للأسف فإن الدالة $\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle$ ليست دالة مميزة للمؤثر $\hat{s}^2$، ولكن، بالإمكان تكوين تركيبة خطية من الدوال $\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle$، بالشكل $\left|s_1, s_2; S, M_S\right\rangle$، لتصبح دالة مميزة لكل من $\hat{s}_z$ و $\hat{s}^2$، وهذا هو ما نهدف لتكوينه. الدالة $\left|s_1, s_2; S, M_S\right\rangle$ يقال عنها: إنها دالة في التمثيل الاقتراني (Coupled representation) والدالة $\left|s_1m_1s_2m_2\right\rangle$ يقال عنها: إنها دالة في التمثيل المنفصل (Uncoupled representation).

مثال: افترض الحركة المغزلية لإلكترونين، لهما القيم $s_1 = \frac{1}{2}$ و $s_2 = \frac{1}{2}$ بالمستوى $l = 0$.
اشرح، بدون حسابات مطولة، كيف تتكون الدوال المقترنة $|s_1, s_2; S, M_S\rangle$ المسموح بها، التي تُعطى بدلالة التمثيل المنفصل $|s_1 m_1 s_2 m_2\rangle \equiv |m_1\rangle|m_2\rangle$.

الحل: للتبسيط سوف نستخدم الاختصار $|SM_S\rangle$ بدلاً $|s_1, s_2; S, M_S\rangle$ حيث إن قيم s_1 و s_2 ثابتة ولن تتغير.

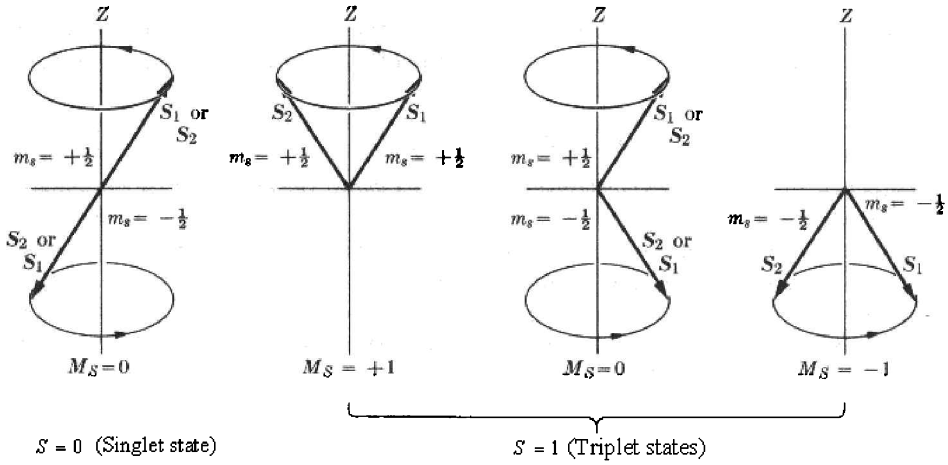
تظهر هنا حالتان منفصلتان: الأولى عندما:

$$S_{\min} = |s_1 - s_2| = \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right| = 0$$

ولها مستوى واحد فقط مقابل للقيمة $M_s = 0$، انظر الشكل (٢) أ، ولهذا يسمى مستوى أحادي (Singlet state). والحالة الثانية عندما:

$$S_{\max} = s_1 + s_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

ولها ثلاث مستويات متناظرة لهما القيم $M_S = 1, 0, -1$، انظر الشكل (٢) ب، ولهذا تسمى مستويات ثلاثية (Triplet states).



أ- مستوى أحادي   ب- مستوى ثلاثي

شكل (٢) المستويات المغزلية لنظام مكون من إلكترونين.

مثال: افترض فقط الحركة المغزلية لإلكترونين، استخدم المؤثرات التنازلية لحساب الدالة المقترنة $\left|s_1,s_2;S,M_S\right\rangle$، وللاختصار سوف نستخدم $\left|s_1,s_2;S,M_S\right\rangle \equiv \left|S,M_S\right\rangle$.

الحل: بالنسبة للحركة المغزلية لإلكترونين فإن الدالة الكلية تعرف بالتالي:

$$\left|s_1=\frac{1}{2},s_2=\frac{1}{2};S,M_S\right\rangle \equiv \left|S,M_S\right\rangle$$

وتظهر هنا حالتان منفصلتان: الأولى هي

$$S_{\max}=s_1+s_2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1$$

ولها ثلاث مستويات متناظرة مقابلة للقيم $M_S=1,0,-1$. والحالة الثانية هي

$$S_{\min}=s_1-s_2=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}=0$$

ولها مستوى واحد فقط مقابل للقيمة $M_s=0$.

للحالة الأولى: وهي أعلى مستوى وتُعرف بالدالة $\left|S_{\max}=1,M_{S,\max}=1\right\rangle$ وهي ناتجة من الجمع المتجه للدالتين $\alpha_1=\left|s_1=\frac{1}{2},m_1=\frac{1}{2}\right\rangle$ و $\alpha_2=\left|s_2=\frac{1}{2},m_2=\frac{1}{2}\right\rangle$ وتكون على الصورة:

$$\boxed{\left|11\right\rangle=\alpha_1\alpha_2} \qquad (١)$$

وباستخدام العلاقة العامة :

$$\hat{S}_{\pm}\left|S,M_S\right\rangle=\hbar\sqrt{S(S+1)-M_S(M_S\pm1)}\left|S,M_S\pm1\right\rangle$$

فإن تأثير المؤثر $\hat{S}_-$ على الدالة بالمعادلة (١) يعطي:

$$\hat{S}_-\left|1,1\right\rangle=\left(\hat{s}_{-1}+\hat{s}_{-2}\right)\alpha_1\alpha_2 \qquad (٢)$$

فإن تأثير المؤثر $\hat{S}_-$ على الطرف الأيسر للمعادلة (١) يعطى:

$$\hat{S}_-\left|1,1\right\rangle=\left[1(1+1)-1(1-1)\right]^{1/2}\left|1,0\right\rangle=\sqrt{2}\left|1,0\right\rangle \quad (٣)$$

وتأثيره على الطرف الأيمن يعطي (مع ملاحظة أن $\hat{s}_{-1}$ تؤثر على m_1 فقط و $\hat{s}_{-2}$ تؤثر على m_2 فقط):

$$\begin{aligned}(\hat{s}_{-1}+\hat{s}_{-2})\alpha_1\alpha_2 &= (\hat{s}_{-1}\alpha_1)\alpha_2 + \alpha_1(\hat{s}_{-2}\alpha_2) \\ &= \left(\left[\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)\right]^{1/2}\beta_1\right)\alpha_2 + \alpha_1\left(\left[\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)\right]^{1/2}\beta_2\right) \quad (٤) \\ &= \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1\end{aligned}$$

وبمساواة المعادلتين (٣) و(٤) نصل إلى أن المعادلة المطلوبة هي:

$$\boxed{|1,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\{\alpha_1\beta_2+\alpha_2\beta_1\}}$$

فماذا تعني لنا هذه المعادلة؟ تعني أن الدالة المميزة $|S,M_S\rangle = |1,0\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي (Linear combination) من الدوال المميزة $|s_1,m_1\rangle|s_2,m_2\rangle$ من هذا المثال نلاحظ أنه في حالة التجميع الخطي فإن العلاقة $m_1+m_2=m$ يجب أن تتحقق.

واجب منزلي: استخدم نفس الطريقة السابقة للتحقق من المستوى:

$$\boxed{|1,-1\rangle = \beta_1\beta_2} \quad (٥)$$

وهذه المستويات الثلاثة المسموح بها للقيمة $S_{\max}=1$ ، وهما $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$، مع ملاحظة أن درجة الانتماء هي:

$$d_1 = 2S_{\max}+1 = 2\times 1+1 = 3$$

كما تم حسابهما سابقاً.

لإيجاد المستويات المسموح بها في الحالة الثانية، $S_{\min}=0$ ، نعلم أن المستوى المطلوب حسابه له القيمة $M_S=0$ وهو $|0,0\rangle$. سوف نفترض أن المستوى $|0,0\rangle$ يأخذ الشكل التالي:

$$|0,0\rangle = c_1\alpha_1\beta_2 - c_2\alpha_2\beta_1 \quad (٦)$$

حيث إننا أخبرنا سابقاً أن الدالة المميزة $|S,m_S\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة $|s_1,m_1\rangle|s_2,m_2\rangle$).

شرط المعايرة للمعادلة (٦) يتطلب:

$$\langle 0,0|0,0\rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

وشرط تعامدها مع الدالة $|1,0\rangle$ يتطلب:

$$\langle 0,0|0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}c_1 + \sqrt{\frac{1}{2}}c_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad c_2 = -c_1$$

ومن شرطي المعايرة و التعامد نجد أن:

$$c_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}$$

وأخيراً نصل إلى الشكل النهائي للدالة:

$$\boxed{|0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left\{\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1\right\}} \qquad (٧)$$

وتلخص الدوال بالحالتين كالآتي:

$$\chi_S = \left\{\begin{array}{lcl} |11\rangle & = & |\alpha\rangle_1|\alpha\rangle_2 \\ |10\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2 + |\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2\right] \\ |1-1\rangle & = & |\beta\rangle_1|\beta\rangle_2 \end{array}\right\} \text{ triplet states}$$

$$\chi_A = \ |00\rangle \ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2 - |\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2\right] \quad \text{singlet states}$$

الدوال χ_S يقال عنها: إنها دوال متماثلة (symmetric wavefunction)، لأننا لو بدلنا الترقيم السفلي 1 و2 نجد أن χ_S لا تتغير إشارتها. χ_A هي دالة مضادة للتماثل (antisymmetric wavefunction)، لأننا لو بدلنا الترقيم السفلي 1 و2 نجد أن χ_A تتغير إشارتها.

من المثال السابق يتضح لنا أن جميع الدوال المميزة $|S,M_S\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة $|s_1,m_1\rangle|s_2,m_2\rangle$. وتحسب معاملات التجميع c_i إما باستخدام المؤثرات التصاعدية والتنازلية، أو باستخدام المتسلسلة:

$$|S,M_S\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{s_1,s_2,S}_{m_1,m_2,M_S}\,|s_1,s_2\rangle|m_l,m_2\rangle \tag{٨}$$

حيث المعامل $C^{s_1,s_2,S}_{m_1,m_2,M_S}$ يسمى معاملات كلبش_جوردن وله خواص مهمة نتناولها بالملحق A.١٠. ولنا تعليق مهم هنا، وهو أن معاملات كلبش_جوردن سوف تظهر لنا أهميتها عندما نتعامل مع جسيمين أو أكثر. وهذا ناتج من الصعوبة الرياضية لاستخدام المؤثرات التنازلية (أو التصاعدية) مع جسيمين فأكثر.

مثال: تحقق من أن الدالة $\psi = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right)$ لها القيمة $M_S = 0$.

الحل: للتحقق من أن الدالة $\psi = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right)$ لها القيمة $M_S = 0$ يجب أن نسترجع معادلة القيم المميزة $\hat{S}_z\psi = M_S\psi$، لذلك يجب أن نؤثر على الدالة ψ بالمؤثر $\hat{S}_z$ كالتالي:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_z\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}\right)\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) \\
&= \sqrt{\frac{1}{2}}\left[\beta_2\left(\hat{s}_{1z}\alpha_1\right) - \alpha_2\left(\hat{s}_{1z}\beta_1\right) + \alpha_1\left(\hat{s}_{2z}\beta_2\right) - \beta_1\left(\hat{s}_{2z}\alpha_2\right)\right] \\
&= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\beta_2\alpha_1 + \frac{1}{2}\alpha_2\beta_1 - \frac{1}{2}\alpha_1\beta_2 - \frac{1}{2}\beta_1\alpha_2\right) = 0
\end{aligned}$$

وهو المطلوب إثباته. لاحظ هنا أن المؤثر $\hat{S}_{iz}$ قد أَثرَ على الدالة ذات الرمز i فقط.

واجب منزلي: تحقق من أن:

$$\begin{aligned}
\hat{S}^2 = \left(\hat{s}_1 + \hat{s}_2\right)^2 &= \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2 \\
&= \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\left[\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \frac{1}{2}\left(\hat{s}_{+1}\hat{s}_{-2} + \hat{s}_{-1}\hat{s}_{+2}\right)\right] \\
&= \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \left(\hat{s}_{+1}\hat{s}_{-2} + \hat{s}_{-1}\hat{s}_{+2}\right)
\end{aligned}$$

مثال: تحقق من أن الدالة $\psi = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right)$ لها القيمة $S = 0$.

الحل: المطلوب هنا أن نثبت أن (مع استخدام $\hbar = 1$)

$$\hat{S}^2\psi = 0\,\psi$$

باستخدام وتجميع العلاقات التالية:

$$\begin{aligned}
\hat{s}_1^2\psi &= \tfrac{3}{4}\psi \\
\hat{s}_2^2\psi &= \tfrac{3}{4}\psi \\
2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z}\psi &= 2\left(-\tfrac{1}{4}\right)\psi \\
\hat{s}_{+1}\hat{s}_{-2}\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) &= \sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(0 - \alpha_1\beta_2\right) \\
\hat{s}_{-1}\hat{s}_{+2}\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) &= \sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\beta_1\alpha_2 - 0\right)
\end{aligned}$$

نصل للمطلوب.

واجب منزلي: تحقق من أن الدالة $\psi = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2\right)$ لها القيم $M_S = 0$ و $S = 1$، بمعنى أن:

$$\begin{aligned}
\hat{S}^2\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) &= 1(1+1)\hbar^2\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right), \\
\hat{S}_z\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) &= 0\hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right)
\end{aligned}$$

٥- أمثلة منوعة

١- احسب القيم والدوال المميزة للمؤثر $\hat{S}_y$.

الحل: معادلة القيم المميزة تعرف بالمعادلة

$$\det\left|S_y-\lambda \mathrm{I}\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\lambda & 0\\ 0 & \lambda\end{pmatrix}\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\begin{pmatrix}\lambda & -i\\ i & \lambda\end{pmatrix}\right| = 0$$

ومنها نحصل على المعادلة التي تحدد القيم المميزة:

$$(2\lambda/\hbar)^2-1=0 \quad\Rightarrow\quad \lambda=\pm\frac{\hbar}{2}$$

القيمة المميزة الأولى $\lambda=\frac{\hbar}{2}$ تعطي $ia=b$. وباستخدام شرط المعايرة $a^2+b^2=1$ نجد أن $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$. للقيمة المميزة الثانية $\lambda=-\frac{\hbar}{2}$ تعطي $ia=-b$. وباستخدام شرط المعايرة $a^2+b^2=1$ نجد أن $ia=-b=-\frac{1}{\sqrt{2}}$. الجدول التالي يحتوى على ملخص للمستويات والقيم المميزة:

القيم المميزة	الرمز	المستويات المميزة
$\frac{\hbar}{2}$	$\left\|+_y\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}+i\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}\right\}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha+i\beta\}$
$-\frac{\hbar}{2}$	$\left\|-_y\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}-i\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}\right\}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha-i\beta\}$

مع ملاحظة مهمة أنه من السهل أن نعكس المستويات المميزة السابقة لنحصل على:

$$\left|+\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|+_y\right\rangle+\left|-_y\right\rangle\right\};$$
$$\left|-\right\rangle=-\frac{i}{\sqrt{2}}\left\{\left|+_y\right\rangle-\left|-_y\right\rangle\right\}$$

إن المقدرة على التغيير من نظام إلى نظام آخر تعد من الأدوات المهمة. على سبيل المثال، إذا اعتبرنا الدالة:

$$\left|\psi\right\rangle=a\left|+\right\rangle+b\left|-\right\rangle$$

للقاعدة S_z، فإننا نستطيع تحويلها إلى القاعدة S_y كالتالي:

$$|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}}\left\{|+_y\rangle + |-_y\rangle\right\} - \frac{bi}{\sqrt{2}}\left\{|+_y\rangle - |-_y\rangle\right\}$$
$$= \left(\frac{a-ib}{\sqrt{2}}\right)|+_y\rangle + \left(\frac{a+ib}{\sqrt{2}}\right)|-_y\rangle$$

٣- أوجد الدوال والقيم المميزة لجسيم مغزلة على محور اعتباري باتجاه متجه الوحدة $\hat{n}$.

الحل: بفرض أن متجه الوحدة الاعتباري هو:

$$\hat{n} = \cos\varphi \sin\theta\, \hat{x} + \sin\varphi \sin\theta\, \hat{y} + \cos\theta\, \hat{z}$$

وباستخدام التعريف $\hat{\vec{S}} = \hat{S}_x\, \hat{x} + \hat{S}_y\, \hat{y} + \hat{S}_z\, \hat{z}$ نجد أن:

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{n} = \hat{S}_n = \cos\varphi \sin\theta\, \hat{S}_x + \sin\varphi \sin\theta\, \hat{S}_y + \cos\theta\, \hat{S}_z$$

واجب منزلي: تأكد من الحسابات التالية:

$$\hat{S}_n = \frac{\hbar}{2}\left\{\cos\varphi \sin\theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin\varphi \sin\theta \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos\theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right\}$$
$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

مع اعتبار المعادلات المميزة:

$$\hat{S}_n|+_n\rangle = \frac{\hbar}{2}|+_n\rangle \quad ; \quad \hat{S}_n|-_n\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-_n\rangle$$

نستطيع أن نضع الدالة المميزة $|+_n\rangle$ بالصورة العامة:

$$|+_n\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$$

باستخدام المعادلة المميزة $\hat{S}_n \left|+_n\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|+_n\right\rangle$ ، نستطيع كتابة:

$$\left(\cos\varphi \sin\theta \hat{S}_x + \sin\varphi \sin\theta \hat{S}_y + \cos\theta \hat{S}_z\right)\left(a\left|+\right\rangle + b\left|-\right\rangle\right) = \frac{\hbar}{2}\left(a\left|+\right\rangle + b\left|-\right\rangle\right)$$

وباستخدام تأثير كل من المؤثرات $\hat{S}_x$ ، $\hat{S}_y$ ، $\hat{S}_z$ فإن المعادلة المميزة $\hat{S}_n \left|+_n\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|+_n\right\rangle$ تؤول إلى المعادلتين:

$$\begin{aligned}
&a\cos\varphi \sin\theta + ia\sin\varphi \sin\theta - b\cos\theta = b;\\
&b\cos\varphi \sin\theta - ib\sin\varphi \sin\theta - a\cos\theta = a
\end{aligned}$$

ومنهما نجد أن:

$$a = \frac{1+\cos\theta}{\sin\theta} e^{-i\varphi}\, b$$

وحيث إن $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ، لذلك نجد أن الثابت:

$$|b|^2 = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

بالإمكان اتخاذ حد يحتوي على الطور بحيث إن:

$$b = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

واجب منزلي: أثبت أن $a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$.

ومن ثم نحن نحصل على الصيغة النهائية بالشكل:

$$\left|+_n\right\rangle = a\left|+\right\rangle + b\left|-\right\rangle = a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\left|+\right\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\left|-\right\rangle$$

وهذه هي الدالة المميزة المطلوبة.

٤- ذا تواجد جسيم بالمستوى $\left|\psi\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}2\\ i\end{pmatrix}$ ،

أ- احسب احتمالية القياس أن الجسيم مغزله للأعلى أو مغزله للأسفل باتجاه المحور Z .

ب- احسب احتمالية القياس أن الجسيم مغزله للأعلى أو مغزله للأسفل باتجاه المحور Y.

الحل:

أ- أولاً: نضع الدالة المعطاة بدلالة المستويات $\left|\pm\right\rangle$ كالتالي:

$$\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}2\\ i\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}2\\ 0\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}0\\ i\end{pmatrix} = \frac{2}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} + \frac{i}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$
$$= \frac{2}{\sqrt{5}}\left|+\right\rangle + \frac{i}{\sqrt{5}}\left|-\right\rangle$$

لإيجاد احتمالية القياس أن الجسيم مغزله للأعلى $\left|+\right\rangle$ ، فإننا نود الحصول على القيمة $\left|\left\langle +|\psi\right\rangle\right|^2$. ذلك يتأتى بضرب الدالة $\left|\psi\right\rangle$ بالدالة $\left|+\right\rangle$ من اليسار وتربيعها، لنحصل على:

$$\left|\left\langle +|\psi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{2}{\sqrt{5}}\right|^2 = \frac{4}{5} = 0.8$$

لإيجاد احتمالية القياس أن الجسيم مغزله للأسفل $\left|-\right\rangle$ ، فإننا نود الحصول على القيمة $\left|\left\langle -|\psi\right\rangle\right|^2$. ذلك يتأتى بضرب الدالة $\left|\psi\right\rangle$ بالدالة $\left|-\right\rangle$ من اليسار وتربيعها، لنحصل على:

$$\left|\left\langle -|\psi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{5}}\right|^2 = \frac{1}{5} = 0.2$$

لاحظ هنا أن المجموع الكلي للاحتمالات يساوى الواحد، كما نتوقع.

باتجاه المحور Y يجب أن نحول الدالة المعطاة بدلالة المستويات $\left|\pm_y\right\rangle$ كالتالي:

$$\left|\psi\right\rangle = a\left|+\right\rangle + b\left|-\right\rangle = a\left(\frac{\left|+_y\right\rangle + \left|-_y\right\rangle}{\sqrt{2}}\right) + b\left(\frac{-i\left|+_y\right\rangle + i\left|-_y\right\rangle}{\sqrt{2}}\right)$$
$$= \left(\frac{a-ib}{\sqrt{2}}\right)\left|+_y\right\rangle + \left(\frac{a+ib}{\sqrt{2}}\right)\left|-_y\right\rangle$$

باستخدام القيم $a = \frac{2}{\sqrt{5}}$ و $b = \frac{i}{\sqrt{5}}$ نجد أن:

$$\left|\psi\right\rangle = a\left|+\right\rangle + b\left|-\right\rangle = a\left(\frac{\left|+_y\right\rangle + \left|-_y\right\rangle}{\sqrt{2}}\right) + b\left(\frac{-i\left|+_y\right\rangle + i\left|-_y\right\rangle}{\sqrt{2}}\right)$$
$$= \frac{3}{\sqrt{10}}\left|+_y\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}\left|-_y\right\rangle$$

ومن ثم نجد أن احتمالية قياس جسيم مغزله لأعلى أو مغزله لأسفل باتجاه المحور Y هما بالترتيب:

$$\left|\left\langle +_y \middle| \psi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{3}{\sqrt{10}}\right|^2 = \frac{9}{10} = 0.9;$$
$$\left|\left\langle -_y \middle| \psi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{10}}\right|^2 = \frac{1}{10} = 0.1;$$

٦- تمارين عامة

١- احسب القيم والدوال المميزة للمؤثر $\hat{S}_z$.

٢- وضع جسيم بالمستوى $\left|\psi\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|+\right\rangle + \left|-\right\rangle\right)$، أثبت أن $\left\langle \hat{S}_x \hat{S}_y \right\rangle = 0$.

أثبت أن $e^{i\theta\sigma_x} = I\cos\theta + i\sigma_x \sin\theta$

٣- تحقق من نتائج الأقواس التالية:

$$[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z; \quad [\sigma_z, \sigma_\pm] = 2\sigma_\pm;$$

٤- أثبت أن أي مصفوفة من الدرجة الثانية " A " يمكن كتابتها بالشكل:

$$A=\frac{1}{2}\left(a_o I+\vec{a}.\vec{\sigma}\right);$$

حيث $a_o=Tr(A)$ و $\vec{a}=A\vec{\sigma}$.

٥- تحقق من نتائج الأقواس التالية:

$$\left[\sigma_+,\sigma_-\right]=\sigma_z;\quad \left[\sigma_z,\sigma_\pm\right]=2\sigma_\pm;$$

٦- اعتبر الجسيمين ١ و٢ لهما الغزل $\frac{1}{2}$، والمؤثران $\hat{s}_1,\hat{s}_2$ اللذان يؤثران على الجزء المغزلي بالدالة.

أ- تأكد أن الدوال في التمثيل المنفصل هي:

$$\left|s_1 s_2 m_1 m_2\right\rangle\equiv\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle,\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle,\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

ب- تأكد أن الدوال في التمثيل الترافقي هي:

$$\left|s_1 s_2 S M_S\right\rangle\equiv\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},1,1\right\rangle,\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},1,0\right\rangle,\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},1,-1\right\rangle,\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2},0,0\right\rangle$$

ج- احسب القيم المميزة للمؤثر $\left(\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\right)$ في التمثيل الترافقي.

د- تأكد من الحسابات التالية:

$$\begin{aligned}\left\langle\alpha_1\beta_2\right|\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle&=\frac{1}{2}\Big[\left\langle 1,0\right|+\left\langle 0,0\right|\Big]\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\Big[\left|1,0\right\rangle+\left|0,0\right\rangle\Big]\\&=\frac{1}{2}\left\langle 0,0\right|\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\left|0,0\right\rangle+\frac{1}{2}\left\langle 1,0\right|\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\left|1,0\right\rangle\\&=\frac{1}{2}\left(-\frac{3}{4}\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4}\right)\\&=-\frac{1}{4}\hbar^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left\langle\alpha_1\beta_2\right|\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle&=\left\langle\alpha_1\beta_2\right|\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z}+\frac{1}{2}\left(\hat{s}_{+1}\hat{s}_{-2}+\hat{s}_{+2}\hat{s}_{-1}\right)\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle\\&=\left\langle\alpha_1\beta_2\right|\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z}\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle+\cancel{\frac{1}{2}\left\langle\alpha_1\beta_2\right|\left(\hat{s}_{+1}\hat{s}_{-2}+\hat{s}_{+2}\hat{s}_{-1}\right)\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle}\end{aligned}$$

$$\left\langle\alpha_1\alpha_2\right|\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle=\Big\langle\Big[\left\langle 1,0\right|+\left\langle 0,0\right|\Big]\Big|\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2\Big|\Big[\left|1,0\right\rangle+\left|0,0\right\rangle\Big]\Big\rangle=0$$

ملحق (10.A)
معاملات كلبش_جوردن

لقد وجد بالأمثلة بهذا الباب أن جميع الدوال المميزة المقترنة $|s_1 s_2;SM_S\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة المنفصلة $|s_1,m_{s_1}\rangle|s_2,m_{s_2}\rangle$، مع وجود الشرط $M_S=m_{s_1}+m_{s_2}$. وقد تم حساب معاملات التجميع c_i باستخدام المؤثرات التصاعدية والتنازلية. وفي هذا الملحق سوف نتناول طريقة أخرى لحساب المعاملات c_i باستخدام المتسلسلة:

$$|s_1 s_2;SM_S\rangle=\sum_{m_{s_1}}\sum_{m_{s_2}}C^{s_1,s_2,S}_{m_{s_1},m_{s_2},M_S}|s_1,m_{s_1}\rangle|s_2,m_{s_2}\rangle \qquad (1)$$

حيث المعاملات $C^{s_1,s_2,S}_{m_{s_1},m_{s_2},M_j}=C_{m_{s_1},m_{s_2}}$ تسمى معاملات كلبش_جوردن. طريقة حساب المعاملات $C_{m_{j_1},m_{j_2}}$ وخواصها تحتاج لتفاصيل عديدة بعيدة عن مستوى هذا الكتاب، لذا سوف نعرض جداول لبعض القيم الخاصة التي تفيدنا في دراستنا.

$|S,M_S\rangle$

m_{s_1}	m_{s_2}	$\lvert 1,1\rangle$	$\lvert 1,0\rangle$	$\lvert 0,0\rangle$	$\lvert 1,-1\rangle$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	١	٠	٠	٠
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	٠	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	٠
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	٠	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	٠
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	٠	٠	٠	١

جدول (1) معاملات كلبش_جوردن $C_{m_{j_1},m_{j_2}}$ للقيم $s_1=s_2=\frac{1}{2}$.

مثال: افترض فقط الحركة المغزلية لإلكترونين، استخدم الجدول (1) لحساب الدالة المقترنة $|s_1,s_2;S,M_S\rangle\equiv|\frac{1}{2},\frac{1}{2};1,0\rangle$، وللاختصار سوف نستخدم $|s_1,s_2;S,M_S\rangle\equiv|S,M_S\rangle\equiv|1,0\rangle$.

الحل: من العمود الرابع بالجدول (1) نجد أن الدالة المترافقة $|1,0\rangle$ تتكون من التجميع الخطي $\alpha_2\beta_1$ و $\alpha_1\beta_2$ حيث إن $M_S = m_{s_1} + m_{s_2} = 0$ لكل منهما. من ثم نحن نتوقع الصورة العامة للدالة $|1,0\rangle$ تأخذ الشكل:

$$|1,0\rangle = C_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\alpha_1\beta_2 + C_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\alpha_2\beta_1 \qquad (2)$$

ومن الجدول السابق (بالنظر رأسياً بالعمود الرابع) نجد أن:

$$C_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = C_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \qquad (3)$$

ومنها نجد:

$$|1,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2\right) \qquad (4)$$

واجب منزلي: افترض فقط الحركة المغزلية لإلكترونين، استخدم الجدول (1) للتأكد من أن:

$$|1,1\rangle = \alpha_1\alpha_2 \qquad (5a)$$

$$|1,-1\rangle = \beta_1\beta_2 \qquad (5b)$$

$$|0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\right) \qquad (5c)$$

ملحوظة: استخدمنا الجدول (1) لحساب الدوال المقترنة $|s_1s_2;SM_S\rangle$ بدلالة الدوال المنفصلة $|s_1,m_{s_1}\rangle|s_2,m_{s_2}\rangle$. الجدول (1) يُمكننا من حساب الدوال المنفصلة $|s_1,m_{s_1}\rangle|s_2,m_{s_2}\rangle$ بدلالة الدوال المقترنة $|s_1s_2;sm_s\rangle$. على سبيل المثال من الجدول $(2.B.1)$ نجد أن:

$$\begin{aligned} \alpha_1\beta_2 &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(|1,0\rangle + |0,0\rangle\right) \\ \beta_1\alpha_2 &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(|1,0\rangle - |0,0\rangle\right) \end{aligned} \qquad (6)$$

يمكن التأكد من صحة المعادلتين السابقتين، وذلك بطرح وجمع كل من المعادلتين (4) و $(5c)$.

الباب الحادي عشر

كمية الحركة الزاوية الكلية

(Total Angular Momentum)

الباب الحادي عشر

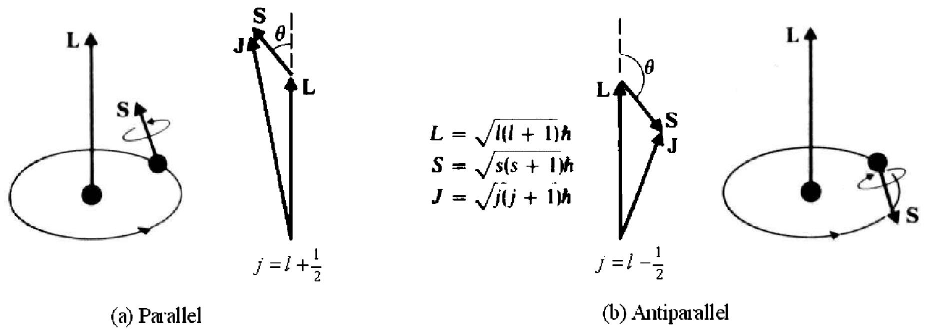
كمية الحركة الزاوية الكلية

تعرف كمية الحركة الزاوية الكلية، $\hat{J}$، لجسيم ما: بأنها محصلة الجمع المتجه لكمية الحركة الزاوية الدورانية $\hat{L}$، وكمية الحركة الزاوية المغزلية $\hat{S}$. (انظر شكل (٢)) ويرمز لها رياضياً بالمعادلة:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

ونظراً لأن $\hat{L}$ تُمثل في الفراغ (الإحداثي) العادي (ordinary space ≡ x, y, z) و $\hat{S}$ تمثل بفراغ آخر وهو الفراغ المغزلي (spin space) فإن المؤثرين متلازمان بمعنى أن $\left[\hat{L}, \hat{S}\right] = 0$ ومن ثم يصبح لهما نفس الدالة المميزة. ولهذا فإن $\hat{J}$ يحقق علاقات التلازم التالية:

$$\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_y, \hat{J}_z\right] = i\hbar\hat{J}_x, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] = i\hbar\hat{J}_y \qquad (1)$$



شكل (١) الحركة الزاوية الدورانية $\hat{L}$ وكمية الحركة المغزلية $\hat{S}$ بالإمكان جمعهما اتجاهياً إما (a) متوازيين (Parallel) أو (b) متضادي التوازي (Antiparallel).

وتعرف كمية الحركة الزاوية الكلية لجسيم بعددين كميين، الأول: هو العدد الكمي الكلي j والثاني: هو العدد الكمي المغناطيسي الكلي m_j بحيث:

$$\hat{J}^2 \mid j, m_j > = \hbar^2 j(j+1) \mid j, m_j >, \qquad \mid \hat{J} \mid = \hbar\sqrt{j(j+1)}\,,$$
$$\hat{J}_z \mid j, m_j > = m_j\hbar \mid j, m_j > \qquad (٢)$$

ولإلكترون وحيد بالذرة نجد أن $j = l \pm \frac{1}{2}$. وتأخذ j قيماً موجبة (صحيحة، وأيضاً قيم أنصاف صحيحة) وتحدد بالقيم $j = |l+s|, |l+s-1|, \cdots, |l-s|$ ، ولكل قيمة j نجد أن m_j تأخذ القيم $m_j = j, j-1, \cdots, -j$. وتكون التعددية (درجة الانتماء) هو $d_j = 2j+1$.

على سبيل المثال: لإلكترون بالمدار الأرضي s ، نجد أن $l = 0$ و $s = \frac{1}{2}$ و $j = \frac{1}{2}$ وله المسقطان $m_j = \pm\frac{1}{2}$ ومن ثم فإن التعددية تعطي $d_j = 2j+1 = 2$ ولذلك يدعى (مدار ثنائي التناظر two-fold degenerate)، ولإلكترون بالمدار p ، نجد أن $l = 1$ ومن ثم j تأخذ القيمتين $j = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ و $j = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ وبالتالي $d_j = d_{j=1/2} + d_{j=3/2} = 2 + 4 = 6$ ومن ثم فهو مدار سداسي التناظر، ولإلكترون بالمدار d ، نجد أن $l = 2$ ومن ثم $j = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2}$ و $j = 2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ والتعددية $d_j = 4 + 6 = 10$.

الجدول التالي يوضح الدوال المرتبطة بالمدارات s, p, d وأعداد الكم الخاصة بها. ونود أن نوضح هنا أنه من السهل أيضاً حساب قيمة التعددية للمدار باستخدام العلاقة $d_j = (2s+1)(2l+1)$ ، حيث إن القيمة المغزلية s تأخذ القيمة $\frac{1}{2}$ دائماً لجسيم وحيد.

المدار	l	j	$\mid j, m_j >$
s	٠	$\frac{1}{2}$	$\mid \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2} >$
p	١	$\frac{3}{2}$	$\mid \frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2} >, \mid \frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2} >$
		$\frac{1}{2}$	$\mid \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2} >$
d	٢	$\frac{5}{2}$	$\mid \frac{5}{2}, \pm\frac{5}{2} >, \mid \frac{5}{2}, \pm\frac{3}{2} >, \mid \frac{5}{2}, \pm\frac{1}{2} >$
		$\frac{3}{2}$	$\mid \frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2} >, \mid \frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2} >$

والمعادلات التالية ماهي إلا ملخص لخواص المؤثرات الخاصة بكمية الحركة الزاوية الكلية باستخدام الرمز j ، من ثم، فإن جميع حالات الحركة الدائرية والمغزلية تدمج في شكل واحد كالتالي:

$$
\begin{aligned}
&\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \\
&\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}.\hat{S} = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_z\hat{S}_z + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+ \\
&\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_y, \hat{J}_z\right] = i\hbar\hat{J}_x, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] = i\hbar\hat{J}_y \Rightarrow \vec{\hat{J}} \times \vec{\hat{J}} = i\hbar\vec{\hat{J}} \\
&\hat{J}^2 \mid j, m_j >= \hbar^2 j(j+1) \mid j, m_j > \\
&\hat{J}_z \mid j, m_j >= m_j\hbar \mid j, m_j >; \quad \hat{J}_z^2 \mid j, m_j >= m_j^2\hbar \mid j, m_j > \\
&\hat{J}_{\pm} \mid j, m_j >= \hbar\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \mid j, m_j \pm 1 > \\
&\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_-\right] = -\hbar\hat{J}_-, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_+\right] = \hbar\hat{J}_+ \\
&\left[\hat{J}^2, \hat{J}_+\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_-\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_x\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_y\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_z\right] = 0,
\end{aligned}
\tag{٣}
$$

١- التمثيل الاقتراني والتمثيل المنفصل

لقد مثلنا سابقاً دالة شرودنجر العامة بالأعداد الكمية $\left|l, m_l, s, m_s\right\rangle$ ، وقد محونا العدد الكمي n للتبسيط فقط. الأعداد الأربعة $\left|l, m_l, s, m_s\right\rangle$ تدعى أعداداً جيدة (good quantum numbers) ، فلماذا سميت بالأعداد الجيدة؟ لأنها ببساطة تجعل الدالة المميزة تعطينا مصفوفات قطرية للمؤثرات $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ من خلال المعادلات:

$$
\begin{aligned}
&\left\langle l, m_l, s, m_s\right|\hat{L}^2\left|l, m_l, s, m_s\right\rangle = l(l+1)\delta_{l, m_l, s, m_s} \\
&\left\langle l, m_l, s, m_s\right|\hat{L}_z\left|l, m_l, s, m_s\right\rangle = m_l\delta_{l, m_l, s, m_s} \\
&\left\langle l, m_l, s, m_s\right|\hat{S}^2\left|l, m_l, s, m_s\right\rangle = s(s+1)\delta_{l, m_l, s, m_s} \\
&\left\langle l, m_l, s, m_s\right|\hat{S}_z\left|l, m_l, s, m_s\right\rangle = m_s\delta_{l, m_l, s, m_s}
\end{aligned}
\tag{٤}
$$

وكيف نعلم أن هذه المؤثرات يكون لها نفس الدالة المميزة؟ الحل هو: أن نحسب أقواس التلازم الآتية لنجد أن:

$$
\left[\hat{S}^2, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{S}_z\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{S}_z\right] = \left[\hat{S}^2, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{S}^2, \hat{S}_z\right] = 0 \tag{٥}
$$

وهي مؤثرات متلازمة ومن ثم لها نفس الدالة المميزة، وهي $\left|l,m_l,s,m_s\right\rangle$.

وهل هذا هو التمثيل الوحيد المسموح به؟ بالطبع لا، فأي أعداد كمية تجعل الدالة تعطينا مصفوفات قطرية، فهي أعداد جيدة وتصبح الدالة بالتالي مُمَثلة تمثيلاً جيداً. لنأخذ على سبيل المثال الدالة $\left|l,s,j,m_j\right\rangle$، نجد أنها تعطينا مصفوفات قطرية للمؤثرات $\hat{L}^2,\hat{S}^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z$ من خلال المعادلات:

$$\begin{aligned}
\left\langle l,s,j,m_j\left|\hat{L}^2\right|l,s,j,m_j\right\rangle &= l(l+1)\delta_{l,s,j,m_j}\\
\left\langle l,s,j,m_j\left|\hat{S}^2\right|l,s,j,m_j\right\rangle &= s(s+1)\delta_{l,s,j,m_j}\\
\left\langle l,s,j,m_j\left|\hat{J}^2\right|l,s,j,m_j\right\rangle &= j(j+1)\delta_{l,s,j,m_j}\\
\left\langle l,s,j,m_j\left|\hat{J}_z\right|l,s,j,m_j\right\rangle &= m_j\delta_{l,s,j,m_j}
\end{aligned} \qquad (٦)$$

ومن ثم فإن الدالة $\left|l,s,j,m_j\right\rangle$ هي دالة جيدة أو "نقية" "good or pure state" وتعرف بالتمثيل الاقتراني الدوراني-المغزلي (spin-orbit coupling representation). وتُعرف الدالة $\left|l,m_l,s,m_s\right\rangle$ بالتمثيل (المنفصل) الذاتي.

مثال: إذا تم تعريف الهملتونيان لإلكترون بذرة الهيدروجين بالصورة:

$$\hat{H}_o = -\left(\frac{1}{2}\nabla_r^2 + \frac{1}{r}\right)$$

فما هي الدالة (أو الدوال) المميزة الجيدة لهذا المؤثر؟

الحل: يجب أن نعلم المؤثرات المتلازمة وغير المتلازمة مع المؤثر الهملتوني $\hat{H}_o$ ونجدها كالتالي:

$$\left[\hat{H}_o,\hat{L}^2\right] = \left[\hat{H}_o,\hat{S}^2\right] = \left[\hat{H}_o,\hat{J}^2\right] = \left[\hat{H}_o,\hat{J}_z\right] = 0$$

وحيث إنها مؤثرات متلازمة، من ثم فإن لها نفس الدالة المميزة، وهي $\left|l,s,j,m_j\right\rangle$. ونجد أيضاً أن

$$\left[\hat{H}_o,\hat{L}^2\right] = \left[\hat{H}_o,\hat{S}^2\right] = \left[\hat{H}_o,\hat{L}_z\right] = \left[\hat{H}_o,\hat{S}_z\right] = 0$$

من ثم فإن الدالة $\left| l,m_l,s,m_s \right\rangle$ هي أيضاً دالة مميزة للمؤثر الهملتوني $\hat{H}_o$.

مثال: احسب دوال المستويات الستة في التمثيل المقترن $\left| j,m_j \right\rangle$ لإلكترون بالمستوى p بذرة الهيدروجين بدلالة الدوال المنفصلة $\left| l,m_l,s,m_s \right\rangle \equiv \left| l,s \right\rangle \left| m_l,m_s \right\rangle$.

الحل: بالنسبة لذرة الهيدروجين فإن الدالة الكلية تعرف بالتالي:

$$\Psi_{total} \equiv R_{nl}(r) Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\chi_{\pm} = \left| n,l,m_l \right\rangle \left| s,m_s \right\rangle = \left| n,l,m_l,s,m_s \right\rangle = \left| n,l,s,j,m_j \right\rangle$$

حيث $\left| l=1, s=\frac{1}{2}, j=1\pm\frac{1}{2}, m_j = j, j-1,\cdots,-j \right\rangle$ وتظهر هنا حالتان منفصلتان:

الأولى هي:

$$j_{\max} = l+s = 1+\frac{1}{2} = \frac{3}{2} \quad \Rightarrow \quad m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$$

ولها أربعة مستويات متناظرة.

والثانية هي:

$$j_{\min} = l-s = 1-\frac{1}{2} = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

ولها مستويان متناظران. وللتمييز فقط سنستخدم الدالة $\left| j,m_j \right\rangle$ بالصورة $\left| j,m_j \right\rangle'$ حتى يتسنى لنا التفرقة بينها وبين الدالة $\left| m_l,m_s \right\rangle$.

للحالة الأولى $j_{\max} = \frac{3}{2}$ نبدأ أولاً بأعلى مستوى الذي له القيمة $m_j = \frac{3}{2}$، وهو

$$\left| \frac{3}{2}\frac{3}{2} \right\rangle' = Y_{1,1}\alpha = \left| m_l, m_s \right\rangle = \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle \qquad (7)$$

وباستخدام العلاقة العامة (حيث يمكن تغيير المؤثر $\hat{J}$ بالمؤثر $\hat{L}$ أو $\hat{S}$).

$$\hat{J}_{\pm} \left| j,m_j \right\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \left| j,m_j \pm 1 \right\rangle$$

فإن المعادلة (7) تأخذ الشكل:

$$\hat{J}_{-}\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle' = \left(\hat{L}_{-}+\hat{S}_{-}\right)\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle \qquad (8)$$

الطرف الأيسر للمعادلة (8) يعطى:

$$\hat{J}_{-}\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle' = \left[\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)-\frac{3}{2}(\frac{3}{2}-1)\right]^{1/2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = \sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' \qquad (9)$$

والطرف الأيمن للمعادلة (8) يعطي (مع ملاحظة أن $\hat{L}_{-}$ تؤثر على m_l فقط و $\hat{S}_{-}$ تؤثر على m_s فقط):

$$\begin{aligned}\left(\hat{L}_{-}+\hat{S}_{-}\right)\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle &= \hat{L}_{-}\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle + \hat{S}_{-}\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle \\ &= \left[1(1+1)-1(1-1)\right]^{1/2}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + \left[\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)\right]^{1/2}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle \\ &= \sqrt{2}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + 1\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned} \qquad (10)$$

وبمساواة المعادلتين (9) و(10) نصل أن المعادلة:

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = \sqrt{\frac{2}{3}}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,0}\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,1}\beta$$

فماذا تعني لنا هذه المعادلة؟ تعني أن الدالة المميزة $\left|j,m_j\right\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي (Linear combination) من الدوال المميزة $\left|l,s\right\rangle\left|m_l,m_s\right\rangle$.

واجب منزلي: استخدم نفس الطريقة السابقة للتحقق من المستويات التالية:

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle' = \sqrt{\frac{1}{3}}\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,0}\beta$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle' = \left|-1,-\frac{1}{2}\right\rangle = Y_{1,-1}\beta$$

وهذه هي المستويات الأربعة المسموح بها للقيمة $j_{\max} = \frac{3}{2}$ مع ملاحظة أن درجة الانتماء هي $d_{3/2} = 2\times\frac{3}{2}+1 = 4$ كما حسبناها سابقاً.

لإيجاد المستويات المسموح بها للقيمة $j_{\min} = \frac{1}{2}$ نبدأ أولاً بأعلى مستوى، الذي له القيمة $m_j = \frac{1}{2}$ وهو $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle'$ وسوف نفترض أنه يأخذ الشكل التالي، (حيث إننا أخبرنا سابقاً أن الدالة المميزة $\left|j,m_j\right\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة $\left|l,s\right\rangle\left|m_l,m_s\right\rangle$):

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = c_1\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + c_2\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle = c_1 Y_{1,0}\alpha + c_2 Y_{1,1}\beta$$

حيث إن شرط العيارية يتطلب:

$$'\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = \left|c_1\right|^2 + \left|c_2\right|^2 = 1$$

وشرط التعامد مع الدالة $\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle'$ يتطلب:

$$'\left\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = \sqrt{\frac{2}{3}}c_1 + \sqrt{\frac{1}{3}}c_2 = 0 \quad\Rightarrow\quad c_2 = -\sqrt{2}\,c_1$$

ومن شرطي العيارية والتعامد نجد أن:

$$c_1 = \pm\sqrt{\frac{1}{3}}$$

وأخيراً نصل إلى الشكل النهائي للدالة:

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = -\sqrt{\frac{1}{3}}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,0}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1}\beta$$

وباستخدام المؤثرات التنازلية نحصل على المستوى الأخير وهو:

$$\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle' = \sqrt{\frac{1}{3}}\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,0}\beta - \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,-1}\alpha$$

مثال: إذا تم تعريف مؤثر بالصورة:

$$\hat{H}_{so} = a\,\vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}$$

حيث a ثابت، فما هي الدالة المميزة الجيدة لهذا المؤثر؟

الحل: أولاً يجب أن نعلم المؤثرات المتلازمة وغير المتلازمة مع المؤثر $\hat{H}_{so} = a\,\vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}$ ونجدها كالتالي:

$$\left[\hat{H}_{so},\hat{L}^2\right]=\left[\hat{H}_{so},\hat{S}^2\right]=\left[\hat{H}_{so},\hat{J}^2\right]=\left[\hat{H}_{so},\hat{J}_z\right]=0,$$
$$\left[\hat{H}_{so},\hat{L}_z\right]\neq 0,\left[\hat{H}_{so},\hat{S}_z\right]\neq 0$$

ومن ثم فإن الدالة $\left|l,s,j,m_j\right\rangle$ هي التي تصلح كدالة مميزة للمؤثر $\hat{H}_{so} = a\,\vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}$.

مثال: احسب القيمة المتوقعة $\left\langle \vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}} \right\rangle$

الحل: وجدنا بالمثال السابق أن الدالة الوحيدة التي نحصل منها على مصفوفة قطرية للمؤثر $\vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}$ هي الدالة $\left|l,s,j,m_j\right\rangle$ وهي التي سوف تستخدم لحساب القيمة المتوقعة.

$$\begin{aligned}\vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}\left|l,s,j,m_j\right\rangle &= \tfrac{1}{2}\left(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2\right)\left|l,s,j,m_j\right\rangle\\ &=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right]\left|l,s,j,m_j\right\rangle\end{aligned}$$

وباستخدام $s=\frac{1}{2}$ وضرب طرفي المعادلة السابقة من اليسار بالمتجه $\left\langle l,s,j,m_j\right|$ نحصل على:

$$\left\langle \vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}\right\rangle = \left\langle l,s,j,m_j\right|\vec{\hat{L}}.\vec{\hat{S}}\left|l,s,j,m_j\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]$$

وهي قيمة متعددة الطيات (التناظر) تبعاً للعدد j .

٢- تمارين عامة

١- إذا تم تعريف مؤثر بالصورة:

$$\hat{H}_{so} = \hat{L}.\hat{S}$$

احسب $\left[\hat{J}_z, \hat{H}_{so}\right]$.

٢- احسب دوال المستويات الستة في التمثيل المقترن $\left| j,m_j \right\rangle$ لإلكترون بالمستوى p بذرة الهيدروجين بدلالة الدوال المنفصلة $\left| l,m_l,s,m_s \right\rangle \equiv \left| l,s \right\rangle \left| m_l,m_s \right\rangle$ ومنها تحقق من قيم الجدول التالي.

$$\left| J.M_J \right\rangle$$

m_{j_1}	m_{j_2}	$\left\|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$
1	$\frac{1}{2}$	1	0	0	0	0	0
1	$-\frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	0	0
0	$\frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	0	0	0
0	$-\frac{1}{2}$	0	0	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	0
-1	$\frac{1}{2}$	0	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	0
-1	$-\frac{1}{2}$	0	0	0	0	0	1

معاملات كلبش_جوردن $C_{m_{j1},m_{j2}}$ للقيم $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$.

ملحق(11.A)
الجسيمات المتطابقة وغير المميزة

سوف نتعرض هنا للأنظمة الفيزيائية التي تحتوي على جسيمين متطابقين أو أكثر. والجسيمات المتطابقة تعني هنا: الجسيمات التي تمتلك نفس الخواص الفيزيائية (كتلة، شحنة، ...) ومن ثم فنحن لا نستطيع أن نميز بينها بواسطة أي قياسات معملية، أو حتى ترقيمها، كما يحدث في الفيزياء الكلاسيكية. إن مبدأ عدم التمييز (Priciple of indistinguishability) يخص جميع الجسيمات غير العينية (غير المجهرية) مثل الإلكترون والبروتون والنيترون والفوتون، الخ.

ولتوضيح الصورة، دعونا نأخذ نظاماً يتكون من جسيمين منفصلين (مثلاً إلكترونين)، وسنفترض أنهما يأخذان الترقيم (1) و(2)، بصندوق أحادي الأبعاد بطول L، مع إهمال الحركة المغزلية. الهملتونين لهذا النظام يعرف كالتالي:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla^2(1) + \nabla^2(2)\right] \qquad (١)$$

من الواضح أن الهملتونين متماثل للجسيمين. بمعنى أننا لو بدلنا الترقيم (1) و(2) فإن الهملتونين لن يتغير. ونعلم أن معادلة شرودنجر:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

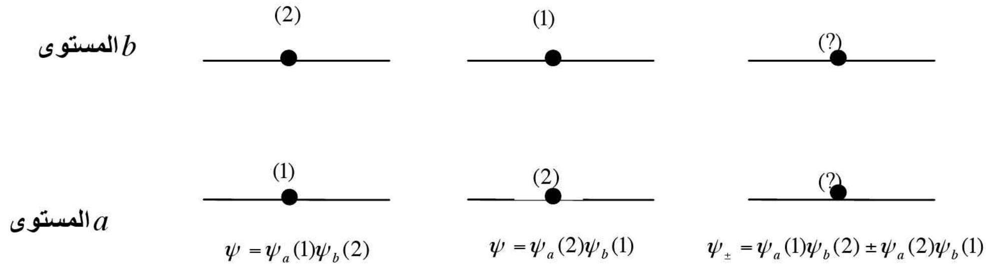
بالإمكان حلها بفصل المتغيرات للجسيمين لنحصل على الدوال المميزة:

$$\psi_a(1) = A\sin\frac{n_a\pi x}{L} \qquad (٢)$$

$$\psi_b(2) = A\sin\frac{n_b\pi x}{L} \qquad (٣)$$

وسوف نفترض أن أحد الجسيمين بالمستوى a والأخر بالمستوى b. والحل المقبول رياضياً للجسيمين يُوضَّح بالشكل:

$$\psi = \psi_a(1)\psi_b(2) \qquad (٤)$$



شكل (١): تواجد الجسيمين (١) و (٢) في مستويين مختلفين

ولنسأل أنفسنا! هل الدالة ψ مقبولة فيزيائياً؟ والإجابة بالطبع: لا! لأننا افترضنا مسبقاً أننا قد ميزنا الجسيمين، وتأكدنا أن الجسيم (١) بالمستوى a، و الجسيم الثاني (٢) بالمستوى b. ونحن نعلم تماماً أن هذا الافتراض غير صحيح، ولا نستطيع تأكيده والتحقق منه عملياً. قد نستطيع أن نؤكد وجود جسيمٍ واحد فقط بالمستوى الأول، وجسيمٍ آخر بالمستوى الثاني، ليس أكثر من هذا، كما في شكل (١) .

وللتغلب على قصورنا في عدم التمييز بين الجسيمات، فإنه يوجد طريقة مباشرة لتكوين دالة موجية للجسيمات وخطواتها كالتالي:

١- بالأخذ في الاعتبار أن الهملتونين (١) متماثل للجسيمين، من ثم فإن الدالة:

$$\psi = \psi_b(1)\psi_a(2) \tag{٥}$$

هي أيضاً تحقق الهملتونين $\hat{H}$.

٢- أي تجميع خطي للدوال (٤) و(٥) سوف يحقق أيضاً الهملتونين (١). على سبيل المثال يوجد تجمعان مهمان، وهما:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)\right] \tag{٦}$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)\right] \tag{٧}$$

لو بدلنا الترقيم (1) و (2) بالدالة ψ_+ نجد أنها لا تتغير، بمعنى أن:

$$\hat{P}(1,2)\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(2)\psi_b(1) + \psi_b(2)\psi_a(1)\right] = \psi_+ \tag{٨}$$

وقد استخدمنا بالمعادلة (٦) المؤثر التبادلي (Permutation operator) $\hat{P}(1,2)$ الخاص بتبديل الترقيم (1) و (2). لذلك يقال عن الدالة ψ_+: إنها تجميع خطي متماثل (symmetrical linear combination). لو أبدلنا الترقيم (1) و (2) بالدالة ψ_- بالمعادلة (٧) نجد أنها تتغير في الإشارة، بمعنى أن:

$$\hat{P}(1,2)\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(2)\psi_b(1) - \psi_b(2)\psi_a(1)\right] = -\psi_- \qquad (٩)$$

لذلك يقال عن المعادلة (٧): إنها تجميع خطي (Linear combination) مضاد التماثل (Antisymmetrical). المعادلتان (٦) و (٧) تدلان على حقيقة مؤكدة وهي أنه يوجد جسيم بالمستوى a وجسيم بالمستوى b. وبالرغم من هذه الحقيقة المؤكدة فإننا لا نستطيع التكهن مما يوجد بالمستوى a، أو بالمستوى b، هل هو الجسيم (١)؟ أم الجسيم (٢)؟

يتضح من هذا المثال: أن مبدأ عدم التحديد لهيزنبرج أرغمنا على أن تصبح الدالة الكلية للجسيمات المتعددة: إما متماثلة أو مضادة للتماثل. وحيث إن معظم الدوال ليست بالمتماثلة ولا بالمضادة للتماثل، كما سنرى لاحقاً، لذلك فإن مبدأ عدم التمييز سوف يضع القيود على شكل الدوال المستخدمة.

صفة التماثل هنا تعكس خاصية مهمة جداً؛ وهي أن طاقة النظام المصاحب للدالة ψ_+ لا يمكن أن يكون كطاقة النظام المصاحب للدالة ψ_-، فكيف يحدث هذا؟

نلاحظ أنه في حالة تقارب (تلاصق) الجسيم (١) و الجسيم (٢)، فإن الحدين المكونين للدالة ψ_- يكونان متساويين (تقريباً)، ومن ثم فإن الدالة ψ_- تصبح صغيرة جداً أو تؤول للصفر. ولهذا فإن الدالة ψ_- تصف حالة لا يمكن أن يكون فيها الجسيمان متقاربين، ونتيجةً لهذا، فإنه يوجد طاقة تنافر (صغيرة في المتوسط) بين الجسيمين. العكس هنا مع الدالة المتماثلة ψ_+، حيث لا تستبعد احتمالية وجود الجسيمين قريبين جدا من بعضهما البعض، لوقت محدد. نتيجةً لذلك، فإن طاقة التنافر للدالة ψ_- تصبح أكبر من طاقة تنافر الدالة ψ_+. وهذا بالطبع ينطبق على الحركة المغزلية للجسيمات.

ومن الملاحظات العملية لأطياف الذرات والجزيئات تم استنباط مبدأ باولي للاستبعاد (Pauli exclusion principle) والذي ينص ببساطة على أنه:

"لا يمكن أن تتشابه الأعداد الكمية الأربعة (l,m_l,s,m_s) لإلكترونين أو أكثر في ذرة واحدة".

والأعداد الكمية المُعَرفة هنا هي:

أ- العدد الكمي الرئيس (n): وهو الذي يحدد المنسوب الذي يوجد به الإلكترون في الذرة، وأيضاً يحدد طاقة المستوى وبُعدهُ عن النواة.

ب- العدد الكمي المداري (l (: ومنه نحدد قيم المدارات الفرعية في المنسوب الأساسي (l n). تأخذ القيم من ٠ إلى $n-1$.

ج- العدد الكمي المداري المغناطيسي (m_l): ويحدد اتجاهات المدارات في الفراغ للعدد الكمي المداري (l) وعدد اتجاهات m_l يحدد بالعلاقة $m_l = 2l+1$

د- العدد الكمي المغزلي (S): ويحدد دوران الجسيم، ويأخذ القيم الصحيحة أو أنصاف أعداد القيم الصحيحة الفردية.

ه- العدد الكمي المغزلي المغناطيسي (m_s):ويحدد اتجاهات المدارات في الفراغ للعدد الكمي المغزلي (s) وعدد اتجاهات m_s يحدد بالعلاقة $m_s = 2s+1$

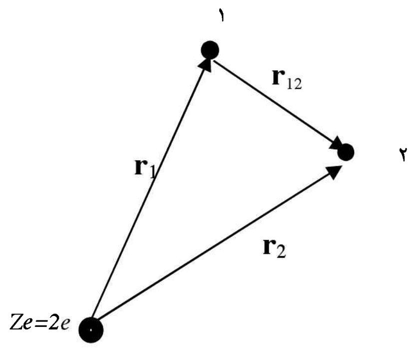
وهناك أعداد كمية أخرى سوف نذكرها لاحقاً.

وقد تم وضع مبدأ باولي للاستبعاد بصورة أخرى، وهي:

١- الدالة الكلية (بما فيها الدالة المغزلية) يجب أن تكون مضادة التماثل عند تبديل إحداثيات أي زوج من جسيمات فيرمي (الفيرميون Fermions). وجسيمات الفيرميون مثل الإلكترون والبروتون والنيوترون. هي التي لها عدد مغزلي " s " يتكون من أنصاف أعداد صحيحة فردية للقيمة $\hbar$.

٢- الدالة الكلية (بما فيها الدالة المغزلية) يجب أن تكون متماثلة عند تبديل إحداثيات أي زوج من جسيمات بوز-اينشتاين (بوزون Bosons). وجسيمات البوزون والديوترون، وجسيمات α هي التي لها عدد مغزلي " s " يتكون من أعداد صحيحة للقيمة $\hbar$ ، مثل الفوتون.

ولقد لعبت خواص التماثل للدالة الكلية دوراً أساسياً في تطوير ميكانيكا الكم الإحصائية. وسوف نناقش هذه الخواص بشيء من التفصيل لاحقاً.



مثال: استعرض جميع الدوال الكلية الممكنة للمستوى الأرضي لذرة الهيليوم.

الحل: نعلم أن المستوى الأرضي لذرة الهيليوم يتكون من إلكترونين (١و٢)، مرتبطين بنواة شحنتها $Ze = 2e$ ، بالمدار 1s (كما في الشكل المجاور)، ولذلك فإن الدوال الأربع الممكنة للمستوى الأرضي لذرة الهيليوم هي:

$$\psi_1 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\alpha(1)\alpha(2)$$
$$\psi_2 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\alpha(1)\beta(2)$$
$$\psi_3 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\beta(1)\alpha(2)$$
$$\psi_4 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\beta(1)\beta(2)$$

هذه الدوال الأربع تعد الحل الصحيح لمعادلة شرودنجر:

$$\left(-\frac{1}{2}\left[\nabla^2(1)+\nabla^2(2)\right]-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+\frac{2}{r_{12}}\right)\psi_i = E_o\psi_i$$

ولكن لا توجد أي منها تحقق مبدأ باولي للاستبعاد لجسيمات الفيرميون. وبالإمكان التحقق من ذلك باستخدام المؤثر التبادلي $\hat{P}(1,2)$ لنجد:

$$\hat{P}(1,2)\psi_1 = \psi_{1s}(2)\psi_{1s}(1)\alpha(2)\alpha(1) = \psi_1$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_2 = \psi_3$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_3 = \psi_2$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_4 = \psi_4$$

ولنحافظ على مبدأ عدم التمييز للإلكترونين، يجب أن نأخذ التجميع الخطي لكل من الدالتين ψ_3 وψ_2. وأنسب التجمعات هي:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\left[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)\right]$$
$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\left[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)\right]$$

ومنها نجد أن:

$$\hat{P}(1,2)\psi_+ = +\psi_+$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_- = -\psi_-$$

ولذا فإن الدالة المطلوبة التي تحقق مبدأ باولي للاستبعاد هي ψ_-.

باستطاعتنا أن نضع الدالة ψ_- في صورة محدد من الدرجة الثانية، 2، يقال عنه "محدد سلاتر" نسبة إلى العالِم سلاتر، حيث العدد 2 يرمز إلى عدد الجسيمات بالنظام ويأخذ الصورة:

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_{1s}(1)\alpha(1) & \psi_{1s}(1)\beta(1) \\ \psi_{1s}(2)\alpha(2) & \psi_{1s}(2)\beta(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_{1s}^{\alpha}(1) & \psi_{1s}^{\beta}(1) \\ \psi_{1s}^{\alpha}(2) & \psi_{1s}^{\beta}(2) \end{vmatrix} \qquad (١٠)$$

لاحظ هنا أنه في حالة وجود إلكترونين لهما نفس الأعداد الكمية فإن المحدد يأخذ الشكل:

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_{1s}^{\alpha}(1) & \psi_{1s}^{\alpha}(1) \\ \psi_{1s}^{\alpha}(2) & \psi_{1s}^{\alpha}(2) \end{vmatrix} = 0$$

ولهذا انعدم المحدد نظراً لوجود صفين (أو عمودين) متطابقين. من ثم فإن هذه الدالة سوف تستبعد، وهي تحقق مبدأ باولي للاستبعاد. وعامةً فإن محدد سلاتر للدالة ψ_- من درجة N ، حيث N هو عدد الجسيمات بالنظام، يكتب بالصورة:

$$\psi(1,2,\cdots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \psi_c(1) & \cdots \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \psi_c(2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_a(N-1) & \psi_b(N-1) & \psi_c(N-1) & \cdots \\ \psi_a(N) & \psi_b(N) & \psi_c(N) & \cdots \end{vmatrix} \qquad (١١)$$

حيث إن للمحدد الخواص التالية:

أ- بتبديل أي زوج من الجسيمات يغير المحدد صفة التماثل، لأن قيمة المحدد تتغير إشارته بتبديل أي صفين (أو أي عمودين).

ب- عند تطابق صفين (أو عمودين)، تنعدم قيمة المحدد.

وللاختصار يكتب المحدد بالشكل $\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left|\psi_1(1)\psi_2(2)\cdots\psi_N(N)\right|$ أو بالشكل $\left\|\psi_1(1)\psi_2(2)\cdots\psi_N(N)\right\|$.

واجب منزلي:

١. تحقق من أن مفكوك محدد سلاتر لثلاثة إلكترونات يُعطى بالشكل:

$$\Psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}[\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) + \psi_1(2)\psi_2(3)\psi_3(1) + \psi_1(3)\psi_2(1)\psi_3(2)$$
$$- \psi_1(1)\psi_2(3)\psi_3(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)\psi_3(3) - \psi_1(3)\psi_2(2)\psi_3(1)]$$

واجب منزلي: التفاعل بين إلكتروني ذرة الهليوم يُعطى بالمؤثر:

$$\hat{H}_{12} = \frac{e^2}{r_{12}} = \frac{e^2}{|r_2 - r_1|}$$

باستخدام الدالة $\psi_{\pm} = \psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1)$ أثبت أن:

$$\int \psi_{\pm}^* \hat{H}_{12}\psi_{\pm} d\tau_1 d\tau_2 = C \pm K$$

حيث

$$C = \int\int \left|\psi_a^*(1)\right|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \left|\psi_b^*(2)\right|^2 d\tau_1 d\tau_2$$

هو تكامل كولم (ويسمي أيضاً التكامل المباشر Direct integral)، ويمثل طاقة التفاعل بين إلكتروني ذرة الهليوم وذلك بفرض أنها موزعة بكثافة كهربية تُعطى بالعلاقات:

$$\rho_1 = -e\psi_{1s}^*(1)\psi_{1s}(1) = -e\left|\psi_{1s}(1)\right|^2,$$
$$\rho_2 = -e\psi_{1s}^*(2)\psi_{1s}(2) = -e\left|\psi_{1s}(2)\right|^2$$

و

$$K = \int\int \psi_a^*(1)\psi_b(1)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_b^*(2)\psi_a(2) d\tau_1 d\tau_2$$

يعرف بأنه التكامل التبادلي (Exchange integral)، ويمثل طاقة التفاعل بين إلكتروني ذرة الهليوم، وذلك بفرض أنها موزعة بكثافة كهربية تُعطى بالعلاقات:

$$\rho_1 = -e\psi_a^*(1)\psi_b(1),$$
$$\rho_2 = -e\psi_b^*(2)\psi_a(2)$$

وقيمته دائماً موجبة. هذا التكامل ظهر من حسابات ميكانيكا الكم ولا يوجد له أي تفسير كلاسيكي، وهو ناتج من تطبيق مبدأ الاستبعاد للعَالم بولي. يعد حساب قيم كل من C و K من المسائل الرياضية الصعبة نتيجة وجود الحد $\frac{1}{|r_2 - r_1|}$ بالتكامل، وبوجوده لا نستطيع فصل المتغيرات. نود التنويه هنا أن طاقة التفاعل التبادلية ليست قوى حقيقية مثل قوى الجاذبية والكهروستاتيكية، إلخ، ولكنها ناتجة من تطبيق مبدأ الاستبعاد للعَالم بولي.

واجب منزلي: تأكد من عيارية الدالة

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_b(1)\psi_a(2)\right]$$

واجب منزلي: نظام يتكون من جسيمين من جسيمات البوزون في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

أ- مع إهمال الحركة المغزلية، احسب دالة المستوى الأرضي للنظام، وطاقته.

ب- احسب دالة المستوى المثار الأول للنظام، وطاقته.

ج- حل الجزئين أ و ب باعتبار وجود الحركة المغزلية.

د- حل الأجزاء أ و ب وت لجسيمين من الفيرميون.

الباب الثاني عشر

مؤثر الكثافة

(The density operator)

الباب الثاني عشر
مؤثر الكثافة

١- مقدمة عامة

تعاملنا سابقاً مع حالات لأنظمة تتكون دوالها المميزة من دالة فريدة (نسميها حالة نقية pure state). مثال على ذلك: جسيم يتحرك داخل صندوق أحادي، ثنائي أو ثلاثي الأبعاد، الهزاز التوافقي، ذرة الهيدروجين، إلخ. ووجدنا أن دالة النظام تتكون من دوال تعتمد على الإحداثيات المستعملة ويمكن فصل متغيراتها. لكن إذا تصورنا أن النظام يوجد بداخل خزان يمثل مجالاً خارجياً، حرارياً أو كهربائياً أو مغناطيسياً إلخ، سوف نجد أن دالة النظام لن نستطيع أن نضعها كحاصل ضرب دوال منفصلة من الإحداثيات والمجال الخارجي. في هذه الحالة تكون دوال النظام مختلطة، ولا نستطيع التمييز بينها، فكيف نتعامل مع هذه الأنظمة؟ وكيف نحدد أن هذا النظام يتكون من دوال نقية أو مختلطة (ممزوجة) mixed state؟ هذا هو الهدف من هذا الباب، وهذا هو الهدف من تقديم وتعريف مؤثر الكثافة أو مؤثر الحالة.

٢- خواص مؤثر الكثافة

اعتبر الحالة العامة لنظام يتكون من عدد n من الدوال $|\psi_i\rangle$ المعيرة، وليست من الضروري متعامدة. مع تعريف القيمة المتوسطة (المتوقعة) لمؤثر $\hat{A}$ حينما يكون النظام في حالة محددة $|\psi_i\rangle$ بالقيمة A_i حيث

$$A_i = \left\langle \hat{A} \right\rangle_i = \left\langle \psi_i \left| \hat{A} \right| \psi_i \right\rangle$$

هنا سوف نعرف قيمة متوقعة أخرى، وهي **weighted average of** $\left\langle \hat{A} \right\rangle$ وذلك عندما نتعامل مع فئة من الأنظمة تسمى ensemble وهي مجموعة من الأنظمة المتشابهة:

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \sum_i p_i A_i = \sum_i p_i \left\langle \psi_i \left| \hat{A} \right| \psi_i \right\rangle.$$

حيث p_i هي احتمالية تواجد النظام بالحالة المعيرة $\langle \psi_i|$ ، والتجميع هنا يكون على جميع المستويات المسموح بها في النظام. الاحتمالية الإحصائية p_i يجب أن تحقق العلاقات التالية:

$$0 \le p_i \le 1, \qquad \sum_i p_i = 1, \qquad \sum_i p_i^2 \le 1$$

الآن نستطيع أن نعرف مؤثر الكثافة، الذي يدل على أفضل "**optimal**" وصف للنظام، ويعرف بالمعادلة:

$$\hat{\rho} = \sum\nolimits_i p_i \left|\psi_i\right\rangle\left\langle\psi_i\right|$$

وله الخواص التالية:

أ- $\hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger}$

ب- $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$

ج- في الحالات النقية نجد أن $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$ و $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$.

د- في الحالات الممزوجة نجد أن $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$.

ه- القيم المميزة لمؤثر الكثافة λ_i تحقق العلاقة $0 \le \lambda_i \le 1$.

و- لأي مؤثر $\hat{A}$ نجد أن:

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{A}\right\rangle &= \sum\nolimits_i p_i \left\langle\psi_i\left|\hat{A}\right|\psi_i\right\rangle = \sum\nolimits_i p_i \left\langle\psi_i\left|\sum\nolimits_n\right|\varphi_n\right\rangle\left\langle\varphi_n\left|\hat{A}\right|\psi_i\right\rangle \\ &= \sum\nolimits_n\left\langle\varphi_n\left|\left[\sum\nolimits_i p_i\left|\psi_i\right\rangle\left\langle\psi_i\right|\right]\hat{A}\right|\varphi_n\right\rangle = \sum\nolimits_n\left\langle\varphi_n\left|\hat{\rho}\hat{A}\right|\varphi_n\right\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})\end{aligned}$$

قبل أن نبدأ في استعراض بعض الأمثلة دعونا ندرس نظاماً ذا حالة لها دالة وحيدة $\langle\psi|$ ومفكوكها مع قواعدها هو:

$$\left|\psi\right\rangle = c_1\left|u_1\right\rangle + c_2\left|u_2\right\rangle + \cdots + c_n\left|u_n\right\rangle$$

ومنها نستطيع أن نحسب مصفوفة الكثافة بالشكل:

$$\hat{\rho} = \left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right| = \sum_{i=1}^{n}\left|c_i\right|^2\left|u_i\right\rangle\left\langle u_i\right| + \sum_{i\neq j}^{n} c_i c_j^{*}\left|u_i\right\rangle\left\langle u_j\right|$$

لنجد أن مصفوفة الكثافة قد انقسمت إلى حدين: الحد الأول منها يُعطي:

$$\langle u_i | \hat{\rho} | u_i \rangle = |c_i|^2$$

وهو يمثل العناصر القطرية لمصفوفة الكثافة، ويعطي احتمالية تواجد الجسيم في الحالة $|u_i\rangle$.

لكي نعلم المعنى الفيزيائي للحد الثاني، دعونا نستخدم التعريف المركب التالي:

$$c_i = |c_i| e^{i\varphi_i}$$

ومن هذا التعريف نجد أن:

$$\langle u_i | \hat{\rho} | u_j \rangle = c_i c_j^* e^{i \overbrace{(\varphi_i - \varphi_j)}^{\text{Phase difference}}}$$

حيث يعبر الفرق الطوري [Phase difference $(\varphi_i - \varphi_j)$] عن مدى الترابط أو مقدرة تداخل الحدود مع بعضها البعض في هذه الحالة. هذه الخاصية هي إحدى خواص النظام الكمي النقي، التي تتمثل بالعناصر غير القطرية لمصفوفة الكثافة. لا تظهر هذه الحدود بمصفوفة الكثافة في الحالات المختلطة ويكون النظام تقليدياً.

لذلك فإن العناصر غير القطرية بمصفوفة الكثافة تكون أصفاراً بالمستويات المختلطة، ولها قيم بالمستويات النقية. لا حظ أيضاً أن العناصر غير القطرية بمصفوفة الكثافة تعتمد على مركبات الدالة. وللتأكد من نقاء الحالة يجب أن نتأكد من أن $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$.

نعرف هنا أيضاً الحالة المختلطة التامة، وهي الحالة التي يكون احتمالية تواجد الجسيم بأي مستوى متساوية. مثال على ذلك مصفوفة الكثافة:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

تمثل حالة تامة الاختلاط، حيث نجد أن النظام له احتمالية تواجده إما بالمستوى $\langle 0|$ أو المستوى $\langle 1|$ **هي** ٥٠٪.

واجب منزلي: للحالة $|\psi\rangle \equiv a_1|\alpha\rangle + a_2|\beta\rangle$ مع الشرط $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$ تحقق من التالي:

$$\hat{\rho} = \left(a_1|\alpha\rangle + a_2|\beta\rangle\right)\left(a_1^*\langle\alpha| + a_2^*\langle\beta|\right) = \begin{pmatrix} |a_1|^2 & a_1 a_2^* \\ a_2 a_1^* & |a_2|^2 \end{pmatrix}$$

مثال: كون مصفوفة الكثافة لجسيم مستقطب بحيث إن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z ، ومنها احسب كلاً من $\langle \hat{s}_x \rangle$ و $\langle \hat{s}_y \rangle$ و $\langle \hat{s}_z \rangle$ و $\langle\alpha|\hat{\rho}|\alpha\rangle$ و $\langle\beta|\hat{\rho}|\beta\rangle$.

الحل: حيث إن الجسيم مستقطب بحيث إن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z ، فإن دالة هذا الجسيم هي $\alpha \equiv |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ وتكون دالة نقية. لذلك نجد أن مصفوفة الكثافة:

$$\hat{\rho} = |+\rangle\langle+| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

لاحظ هنا أن $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ و $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ حيث إن الدالة نقية.

ومن مصفوفة الكثافة نجد التالي:

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{s}_x\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{s}_y\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{s}_z\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2};$$

$$\langle\alpha|\hat{\rho}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1;$$

$$\langle\beta|\hat{\rho}|\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0;$$

وكما هو متوقع فإن القيمة المتوقعة الوحيدة هي $\langle \hat{s}_z \rangle$ باتجاه المحور الموجب Z.

مثال: كون مصفوفة الكثافة لجسيم مستقطب بحيث إن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور X. ومنها احسب كلاً من $\langle \hat{s}_x \rangle$ و $\langle \hat{s}_y \rangle$ و $\langle \hat{s}_z \rangle$ و $\langle +_x | \hat{\rho} | +_x \rangle$.

الحل: حيث إن الجسيم مستقطب بحيث إن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور X، فإن دالة هذا الجسيم هي $\langle +_x |$ وتكون حالة نقية. يمكن وضع الدالة $\langle +_x |$ بدلالة القواعد α و β بالشكل:

$$|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

لذلك نجد أن مصفوفة الكثافة:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\alpha+\beta\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}\langle \alpha+\beta| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}$$

لاحظ هنا أن العناصر غير القطرية لمصفوفة الكثافة غير منعدمة، وأن $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ و $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ حيث إن الدالة نقية .

ومن مصفوفة الكثافة نجد التالي:

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{s}_x) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2};$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{s}_y) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}i & -i\\i & -i\end{pmatrix} = 0;$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{s}_z) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}1 & -1\\1 & -1\end{pmatrix} = 0;$$

وأيضاً:

$$\langle +_x | \hat{\rho} | +_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\\2\end{pmatrix} = 1$$

واجب منزلي: تحقق من العلاقة $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ لهذا المثال.

مثال: كون مصفوفة الكثافة لجسيمات ٥٠٪ منها اتجاه حركتها المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z و٥٠٪ الأخرى تأخذ الاتجاه السالب للمحور Z. ومنها احسب كلاً من $\langle \hat{s}_x \rangle$ و $\langle \hat{s}_y \rangle$ و $\langle \hat{s}_z \rangle$.

الحل: هذه حالة ممزوجة من جسيمات نصفها اتجاه حركته المغزلية للأعلى، والنصف الآخر اتجاه حركته المغزلية للأسفل. تأخذ مصفوفة الكثافة للنظام الشكل:

$$\hat{\rho} = \left(\frac{1}{2}|+\rangle\langle+|\right) + \left(\frac{1}{2}|-\rangle\langle-|\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{I}$$

لاحظ هنا أن العناصر غير القطرية لمصفوفة الكثافة منعدمة، وأن $\hat{\rho}^2 = \frac{1}{2}\hat{\rho} \neq \hat{\rho}$ ، حيث إن الدالة ممزوجة .

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{s}_x\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{s}_y\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{s}_z\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = 0$$

ملحوظة: نجد أن مصفوفة الكثافة السابقة يمكن وضعها أيضاً بصيغ عديدة مختلفة، منها على سبيل المثال:

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}|+_x\rangle + \frac{1}{2}|-_x\rangle$$

ماذا تعني هذا الصيغة لنا؟ هذه الصيغة تعني أيضاً أن ٥٠٪ من الجسيمات تأخذ اتجاه $\langle {}_x+|$ و٥٠ ٪ تأخذ اتجاه $\langle {}_x-|$. هذا يعني أن الجسيمات لها اتجاهات مغزلية عشوائية، وتتحرك في جميع الاتجاهات، ونحن نجهل اتجاهها.

مثال: إذا علم أن الهملتونيان لجسيم مغزلي في مجال مغناطيسي خارجي ثابت B_z باتجاه المحور Z يعرف بالمعادلة:

$$\hat{H} = -\gamma B_z S_z$$

حيث γ ثابت.

أ- أوجد الدالة بتغير الزمن.

ب- إذا تم قياس S_x عند الزمن t، فما هو احتمال الحصول على $\pm\frac{\hbar}{2}$؟

ج- إذا تم قياس S_z عند الزمن t، فما هو احتمال الحصول على $\pm\frac{\hbar}{2}$؟

الحل:

أ- إذا علمنا أن الجسيم عند بداية الحركة يعرف بالدالة المميزة $\langle {}_x+|$ حيث:

$$|\psi(0)\rangle = |+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right)$$

فإن تأثير الهملتونيان على كل جزء من هذه الدالة هو:

$$\hat{H}\,|+\rangle = -\gamma B_z S_z\,|+\rangle = -\gamma B_z\,\frac{\hbar}{2}|+\rangle = E_+|+\rangle, \qquad E_+ = -\gamma B_z\,\frac{\hbar}{2},$$

$$\hat{H}\,|-\rangle = -\gamma B_z S_z\,|-\rangle = -\gamma B_z\left(-\frac{\hbar}{2}\right)|-\rangle = E_-|-\rangle, \qquad E_- = \gamma B_z\,\frac{\hbar}{2}$$

من ثم فإن التطور الزمني للدالة تحت تأثير هذا الهملتونيان هو:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_+t/\hbar}\,|+\rangle + e^{-iE_-t/\hbar}\,|-\rangle\right)$$

ب- احتمال الحصول على $\frac{\hbar}{2}$ باتجاه المحور الموجب X يحسب من العلاقة $\langle +_x | \psi(t) \rangle$.

ولحساب هذه العلاقة يجب أن نحسب القيم التالية:

$$\langle + | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i E_+ t / \hbar} \langle + | + \rangle + e^{-i E_- t / \hbar} \langle + | - \rangle \right)$$
$$= \frac{e^{-i E_+ t}}{\sqrt{2}} = \frac{e^{-i \gamma B_z t / 2}}{\sqrt{2}}$$

$$\langle - | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i E_+ t / \hbar} \langle - | + \rangle + e^{-i E_- t / \hbar} \langle - | - \rangle \right)$$
$$= \frac{e^{-i E_- t}}{\sqrt{2}} = \frac{e^{i \gamma B_z t / 2}}{\sqrt{2}}$$

والآن نحسب السعة:

$$\langle +_x | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle + | + \langle - | \right) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle + | \psi(t) \rangle + \langle - | \psi(t) \rangle \right)$$
$$= \cos\left(\frac{\gamma B_z t}{2} \right)$$

والاحتمالية:

$$\left| \langle +_x | \psi(t) \rangle \right|^2 = \cos^2\left(\frac{\gamma B_z t}{2} \right)$$

وبنفس الطريقة نحصل على:

$$\langle -_x | \psi(t) \rangle = i \sin\left(\frac{\gamma B_z t}{2} \right) \quad \Rightarrow \quad \left| \langle -_x | \psi(t) \rangle \right|^2 = \sin^2\left(\frac{\gamma B_z t}{2} \right)$$

وهذه النتيجة تعد مشوقة، حيث وجدنا أن الاحتمالية تتذبذب مع الزمن.

ج- لحساب القيم $\left| \langle \pm_x | \psi(t) \rangle \right|^2$ فقد تم حساب القيم $\left| \langle \pm | \psi(t) \rangle \right|^2 = \frac{1}{2}$ وهي قيم احتمالية متوقعة للحصول على $\pm \frac{\hbar}{2}$ عند قياسنا S_z.

٣- تمارين عامة

١- إذا عرفت مصفوفة الكثافة لجسيم له مغزل $\frac{1}{2}$ بالصورة:

$$\hat{\rho} = c_o \hat{\mathrm{I}} + c_1 \hat{s}_x + c_2 \hat{s}_y + c_3 \hat{s}_z$$

حيث $\hat{\mathrm{I}}$ هي مصفوفة الوحدة الثنائية و c_i ثوابت، أثبت أن:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \langle \hat{s}_x \rangle & \langle \hat{s}_x \rangle - i \langle \hat{s}_y \rangle \\ \langle \hat{s}_x \rangle + i \langle \hat{s}_y \rangle & \frac{1}{2} - \langle \hat{s}_z \rangle \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{2} \hat{\mathrm{I}} + 2 \langle \hat{\mathrm{s}} \rangle . \hat{\mathrm{s}} = \frac{1}{2} \left[\hat{\mathrm{I}} + \langle \hat{\sigma} \rangle . \hat{\sigma} \right]$$

حيث $\hat{\sigma}$ هي مصفوفات بولي.

٢- أثبت أنه للمستويات المختلطة $\dfrac{d\hat{\rho}}{dt} = -\dfrac{i}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H}, \hat{\rho} \right] \right\rangle$

٣- إذا علم أن

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = -\mu B \, \hat{\sigma}_z = -\mu B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

أثبت أن $\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \tanh(\beta \mu B)$.

الجزء الثاني: طرق تقريبية لحل مسائل ميكانيكا الكم وتطبيقاتها

Approximate methods in solving quantum mechanics problems and their applications

لقد تم سابقاً معالجة وحل معظم المسائل الفيزيائية (مثل المتذبذب (الهزاز) التوافقي، ذرة الهيدروجين وجسيم بداخل مربع أو مستطيل جهد) حلاً كاملاً. هذه المسائل لها الهملتونيان البسيط والخاص بها، ومن ثم استطعنا حل معادلات شرودنجر وحصلنا على طاقة المستويات ودوالها المميزة.

والحق أنه يوجد أنظمة فيزيائية أخرى مهمة وليس لها حل متكامل. وذلك ناشئ من تعقد معادلة شرودنجر، نظراً لوجود حد الجهد فيها. مثال لهذه النظم: ذرة الهليوم أو ذرة الهيدروجين في مجال كهربي أو مغناطيسي أو كليهما معاً. ولحل هذه المسائل يجب أن نلجأ إلى طرق تقريبية مختلفة، وأهم الطرق وتطبيقاتها ما يلي:

الباب الثالث عشر

نظرية التغاير

(Variational theory)

الباب الثالث عشر

نظرية التغاير

نظرية التغاير هي طريقة بسيطة لحساب قيم الطاقة للمستويات المختلفة، (أهمها طاقة المستوى الأرضي (أدنى مستوى) لما لها من أهمية قصوى، لأي نظام فيزيائي أو كيميائي) لمقارنتها بالقيم المعملية. ويتم ذلك عن طريق تخمين واختبار دالة تجريبية (لها بعض الشروط) لنظام فيزيائي معقد.

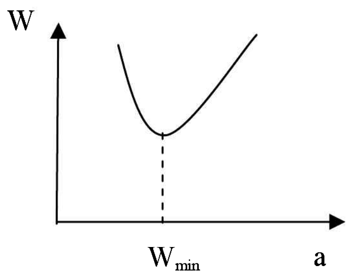
لنفترض مثلاً: أننا نود أن نحسب الطاقة المميزة للمستوى الأرضي، E_1 ، لنظام فيزيائي يوصف بالهملتونيان $\hat{H}$ ، ولكننا لا نستطيع حل معادلة شرودنجر (غير المعتمدة على الزمن) لصعوبتها، فما هي الطريقة المثلى لحل هذه المعضلة؟

١-حساب طاقة المستوى الأرضي

قبل أن نتعرف على الوصفة لهذه الطريقة نود أن نوجه النظر إلى حقيقة مهمة، وهي أن نظرية التغاير تبني على مبدأ مهم (سوف نثبته مؤخراً) وهو أنهُ لأي دالة اختيارية معايرة φ (مهما تكن هذه الدالة) فإن الطاقة المتوسطة المحسوبة لهذه الدالة تعطي قيمة أعلى من (أو تتساوى مع) طاقة المستوى الأرضي المميزة وتمثل بالمعادلة:

$$\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle \geq E_1 \qquad (١)$$

ولتطبيق نظرية التغاير نتبع الخطوات التالية:



أ- اختيار (تخمين) دالة تجريبية معيرة ($[\varphi(a,b,\cdots)]$) تحتوى على عدد من المتغيرات المجهولة $(a,b,\cdots)$. هذه الدالة يفترض أن تعبر عن الدالة الحقيقية (من حيث التماثل وتحقيق الشروط الحدودية.... الخ).

ب- تحسب القيمة المتوسطة للطاقة المطلوبة و المرتبطة بالهملتونيان $\hat{H}$ عن طريق استخدام العلاقة

$$W(a,b,\cdots) = <\varphi | \hat{H} | \varphi> \qquad (٢)$$

ج- لحساب وإيجاد القيم المثالية (optimum value) للمتغيرات $(a,b,\cdots)$ نتبع طريقتين: الطريقة الأولي تتأتى برسم المعادلة (2) لكل متغير على حدة (مثل a كما بالرسم) واختيار أقل قيمة للطاقة W_{min} من الرسم. ولكن هذه الطريقة

ليست عملية تماماً، لذلك نلجأ للطريقة الثانية، وهي أن نفاضل المعادلة (2) جزئيا بالنسبة لكل متغير على حدة، ثم نجد قيمها المثالية التي تحقق الشرط:

$$\frac{\partial W}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial b} = 0, \quad \cdots \tag{٣}$$

وذلك عند النهايات الصغرى (Lower limits).

ج- باستخدام القيم المثالية للمتغيرات بالخطوة السابقة والتعويض بها بالمعادلة (2) نحصل على القيمة المثلى للطاقة $W_{\min}$، والمفترض أن تكون قريبة من القيمة العملية (المطلوبة).

ملاحظة: في حالة كون الدالة غير معيرة، فإن مبدأ التغاير يطبق على التكامل:

$$W = \frac{<\varphi\,|\,\hat{H}\,|\,\varphi>}{<\varphi\,|\,\varphi>} \tag{٤}$$

نظرية: لأي دالة اختيارية معيرة، φ، (مهما تكن هذه الدالة) فإن الطاقة المتوسطة المحسوبة لهذه الدالة تعطي قيمة أعلى من (أو تتساوى مع) طاقة المستوى الأرضي المميزة.

الإثبات: لإثبات هذه النظرية نفترض وجود نظام فيزيائي (بسيط أو معقد) لدينا، والمؤثر الهملتوني $\hat{H}$ الخاص به معروف، وله فئة لانهائية من مستويات الطاقة المميزة $\{E_i\}$ بحيث إن $E_1 < E_2 < \cdots < E_n < \cdots$ والدوال المميزة $\{\psi_i\}$ (المعايرة و المتعامدة) التابعة لهذه المستويات بحيث إن

$$<\psi_i\,|\,\psi_j> = \delta_{ij} \tag{٥}$$

وعليه فإن معادلة شرودنجر (التي لا تعتمد على الزمن) تحكمها المعادلة التالية:

$$\hat{H}\,|\psi_i> = E_i\,|\psi_i> \tag{٦}$$

والطاقة المميزة:

$$E_i = <\psi_i\,|\,\hat{H}\,|\,\psi_i> \tag{٧}$$

ويجب أن نتذكر هنا أننا لا نستطيع غالباً حساب القيم E_i لأننا لا نعرف الدوال المميزة $\{\psi_i\}$ والمرتبطة بالمؤثر الهملتوني $\hat{H}$، ولهذا سوف نفترض دالة φ مرتبطة

بالمؤثر الهملتوني $\hat{H}$ ولا يشترط لها أن تمثل دالة موجية معينة، عدا أنها تحقق شروط الدالة المميزة كونها أحادية القيمة ومستمرة ومعيرة وفق الشرط:

$$< \varphi | \varphi > = 1 \qquad (٨)$$

ومن مبدأ التغاير، الذي يشكل أساس طريقتنا التقريبية هنا، نعرف القيمة المتوقعة للطاقة بالتكامل:

$$W = < \varphi | \hat{H} | \varphi > \qquad (٩)$$

وسوف نختار الدالة φ كمفكوك بالدوال المميزة $\{\psi_i\}$ بالصورة:

$$| \varphi > = \sum_i a_i | \psi_i > \qquad (١٠)$$

حيث a_i ثوابت. وباستعمال المعادلة (1) نجد أن:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \sum_{i,j} \langle \psi_j | a_j^* a_i | \psi_i \rangle = \sum_{i,j} a_j^* a_i \delta_{ij} = \sum_i | a_i |^2 \\ &= 1, \end{aligned} \qquad (١١)$$

و

$$W = \langle \varphi | E_i | \varphi \rangle = \sum_i | a_i |^2 E_i$$

ونعلم أن طاقة المستوى الأرضي يعطي بالعلاقة:

$$E_1 = \sum_i | a_i |^2 E_1 \qquad (١٢)$$

ومنه نجد أن القيمة

$$W - E_1 = \sum_i \underbrace{| a_i |^2}_{positive} \underbrace{(E_i - E_1)}_{E_i > E_1} \qquad (١٣)$$

ماهي إلا كمية موجبة، ومن ثم $W \geq E_1$. وهذا يعني أن الدالة المقترحة تعطينا قيمة عليا للطاقة (بمعنى أنها أكبر من الطاقة المميزة). وتكون القيمة المتوقعة للطاقة W مساوية للطاقة المميزة E_1 في حالة كون جميع الثوابت a_i مساوية للصفر ماعدا a_1 وبمعنى آخر حينما يتحقق الشرط $\varphi = \psi_1$.

مثال: احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\varphi_{1s}(r) = Ne^{-ar}$ حيث a متغير اختياري و N ثابت المعيارية. مع ملاحظة أنه باستخدام الوحدات الذرية (انظر الملحق **A**) يكتب الهملتونيان بالصيغة التالية:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{1}{r}$$

حيث $\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$.

الحل: دعونا أولاً نحسب ثابت المعيارية N في الإحداثيات الكروية (r,θ,φ) باستخدام شرط المعيارية (مع ملاحظة أن $d\mathbf{r} = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi$):

$$\begin{aligned} <\varphi_{1s}|\varphi_{1s}> &= \int |\varphi_{1s}(r)|^2 d\mathbf{r} \\ &= N^2 \underbrace{\int_0^\infty r^2 e^{-2ar} dr}_{\frac{1}{4a^2}} \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta d\theta}_{2} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \end{aligned}$$

وباستخدام التكامل القياسي ($\int_0^\infty r^2 e^{-br} dr = \frac{2}{b^3}$). وبمساواة المعادلة السابقة بالواحد نجد أن:

$$4\pi |N|^2 \frac{1}{4a^3} = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$$

ولحساب قيمة التكامل $W = <\varphi_{1s}|\hat{H}|\varphi_{1s}>$ نعلم أن:

$$\begin{aligned} \hat{H}\varphi_{1s} &= -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\varphi_{1s}}{\partial r}\right] - \frac{\varphi_{1s}}{r} \\ &= -\frac{a^{3/2}}{2\sqrt{\pi}}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2(-ae^{-ar})\right] - \frac{\varphi_{1s}}{r} \\ &= \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{a}{r^2}(2r - r^2 a) - \frac{1}{r}\right]e^{-ar} \\ &= \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{a-1}{r} - \frac{a^2}{2}\right]e^{-ar} \end{aligned}$$

ومنه نجد معادلة الطاقة (حيث إن التكامل على الزوايا يعطي 4π):

$$W = 4\pi\int_0^\infty \varphi_{1s}^* \hat{H} \varphi_{1s} r^2 dr = 4a^3 \int_0^\infty \left[\frac{a-1}{r} - \frac{a^2}{2}\right] e^{-2ar} r^2 dr$$
$$= 4a^3\left[(a-1)\frac{1!}{(2a)^2} - \frac{a^2}{2}\frac{2!}{(2a)^3}\right] = \frac{a^2}{2} - a$$

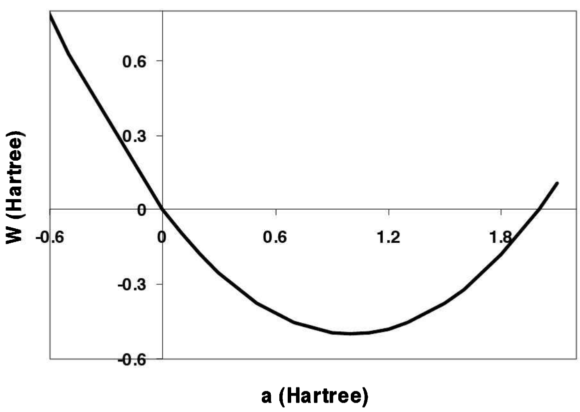
ومن ثم لحساب القيمة المثلى للمتغير a نستخدم التفاضل:

$$\frac{\partial W}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\left[\frac{a^2}{2} - a\right] = a - 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad a = 1$$

ولإيجاد طاقة أدنى مستوى نعوض بالقيمة $a = 1$ بمعادلة الطاقة:

$$E_1 = W_{\min} = \frac{a^2}{2} - a = \frac{1}{2} - 1 = -\frac{1}{2} \text{ Hartree}$$

نلاحظ هنا أن E_1 هي القيمة الحقيقية لهذا المستوى. السبب في ذلك يعود إلى أننا استخدمنا الدالة المميزة الحقيقية للمستوى الأرضي لذرة الهيدروجين في حساباتنا.



والآن لنتأكد من صحة الحسابات دعنا نرسم هذه الطاقة $W = \frac{a^2}{2} - a$ كدالة في المتغير a لنرى أين تقع القيمة الصغرى، التي هي القيمة المثلى (optimum value). من الواضح بالرسم المرافق أن القيمة $a = 1$ (بالوحدات الذرية) هي القيمة المثلى، التي تعطي أصغر قيمة للطاقة (كما أثبتنا رياضياً).

البرنامج التالي كُتب باستخدام البرنامج ماثيماتيكا، وذلك لحساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\Psi1 = Ne^{-a(1+r)}$. يمكن تنفيذ البرنامج للتأكد من الحسابات. وأيضاً بالإمكان تغيير شكل الدالة $\Psi1$ لحساب قيم الطاقة المصاحبة لها.

```
Ψ1 = N e^(-a (1+r))

aa = Integrate[r^2 Ψ1^2, {r, 0, ∞}, Assumptions → a > 0]

Solve[(∫_0^(2π) dϕ) * (∫_0^π Sin[θ] dθ) * (aa) == 1, N]

 {{N → -a^(3/2) e^a/√π}, {N → a^(3/2) e^a/√π}}

HΨ1 = -1/(2 r^2) ∂_r (r^2 ∂_r Ψ1) - Ψ1/r  // Simplify

W = Integrate[r^2 Ψ1 * HΨ1 , {r, 0, ∞}, Assumptions → a > 0] / aa

 1/2 (-2 + a) a

select = Solve[∂_a W == 0, a]

 {{a→1}}

b=a/.select[[1]]

 1

W /. {a→ b}//N

 -0.5
```

مثال: باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\varphi(x) = xe^{-ax}$، حيث a متغير اختياري، احسب طاقة أدنى مستوى لجسيم يتحرك في مجال جهد معرف كالتالي:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ xV_o & x > 0 \end{cases}$$

حيث V_o هو ثابت اختياري له وحدة الطاقة على المسافة. وللتبسيط سوف نضع $V_o = 1$.

الحل: حيث إن الجهد يؤول إلى ما لا نهاية عندما $x < 0$ فإن الدالة المختارة تأخذ الشكل:

$$\varphi(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ xe^{-ax} & x>0\end{cases}$$

وحيث إن هذه الدالة غير معيرة، لذلك نحسب:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle=\int_0^\infty x^2e^{-2ax}dx=\frac{1}{4a^3};$$

ونعلم أن الهملتونيان لجسيم يتحرك في مجال الجهد $V(x)$ هو x $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+x$ ولذلك:

$$\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle=\langle\varphi|-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+x|\varphi\rangle=\int_0^\infty xe^{-ax}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+x\right\}xe^{-ax}dx$$

$$=\int_0^\infty xe^{-ax}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}ae^{-ax}(ax-2)+x^2e^{-ax}\right\}dx$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty a^2xe^{-2ax}(ax-2)dx+\int_0^\infty x^3e^{-2ax}dx=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{4a}+\frac{3}{8a^4}$$

من ثم:

$$W(a)=\frac{<\varphi|\hat{H}|\varphi>}{<\varphi|\varphi>}=\frac{\hbar^2a^2}{2m}+\frac{3}{2a}$$

وباستخدام العلاقة $\frac{\partial W(a)}{\partial a}=0$ نجد أن قيمة a المثلى هي $\left(\frac{3m}{2\hbar^2}\right)^{1/3}$ والطاقة المثالية هي:

$$W_{\min}=\frac{\hbar^2a^2}{2m}+\frac{3}{2a}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3m}{2\hbar^2}\right)^{2/3}+\frac{3}{2}\left(\frac{2\hbar^2}{3m}\right)^{1/3}=\frac{9}{4}\left(\frac{2\hbar^2}{3m}\right)^{1/3}=\frac{3}{2}\left(\frac{9\hbar^2}{4m}\right)^{1/3}$$

مثال: احسب طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي الخطي باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية:

$$\varphi(x)=\begin{cases}\cos(ax) & -\frac{\pi}{2a}\le x\le\frac{\pi}{2a}\\ 0 & \text{elsewhere}\end{cases}$$

حيث a متغير اختياري والهملتونيان يعرف بالمعادلة $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$ ، حيث $k = m\omega^2$. ومنها ارسم الدالة الاختيارية، وقارنها بدالة المستوى الأرضي للمتذبذب التوافقي البسيط.

الحل: لحساب القيمة $W(a) = \frac{<\varphi|\hat{H}|\varphi>}{<\varphi|\varphi>}$ نبدأ أولاً بحساب المقام وهو:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos^2(ax)dx = \left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4a}\sin(2ax)\right]_{-\pi/2a}^{\pi/2a}$$

$$= \frac{\pi}{4a} - \frac{1}{4a}\sin(\pi) - \left(-\frac{\pi}{4a}\right) - \frac{1}{4a}\sin(-\pi)$$

$$= \frac{\pi}{4a} + \frac{\pi}{4a} = \frac{\pi}{2a}$$

والبسط يحسب كالتالي:

$$\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle = \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos(ax)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right\}\cos(ax)dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos(ax)\underbrace{\frac{d^2}{dx^2}\cos(ax)}_{-\cos(ax)}dx + \frac{1}{2}k\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} x^2\cos^2(ax)dx$$

$$= \frac{\hbar^2 a^2}{2m}\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos^2(ax)dx + \underbrace{\frac{1}{2}k\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} x^2\cos^2(ax)dx}_{I_2}$$

$$= \frac{\hbar^2 a^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2a}\right) + I_2$$

واجب منزلي: احسب القيمة I_2 وأثبت أن:

$$I_2 = \frac{1}{2}k\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} x^2\cos^2(ax)dx = \frac{k}{a^3}\left[\frac{\pi^3}{48} - \frac{\pi}{8}\right]$$

ومنه نجد:

$$\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle = \frac{\hbar^2 a^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2a}\right) + \frac{k}{a^3}\left[\frac{\pi^3}{48} - \frac{\pi}{8}\right] = \frac{\pi\hbar^2 a}{4m} + \frac{\pi k}{8a^3}\left[\frac{\pi^2}{6} - 1\right]$$

ومن ثم:

$$W(a)=\frac{<\varphi|\hat{H}|\varphi>}{<\varphi|\varphi>}=\frac{\dfrac{\pi\hbar^2 a}{4m}+\dfrac{\pi k}{8a^3}\left[\dfrac{\pi^2}{6}-1\right]}{\dfrac{\pi}{2a}}$$

$$=\frac{\hbar^2 a^2}{2m}+\frac{k}{4a^2}\left[\frac{\pi^2}{6}-1\right]$$

وبالتفاضل نجد أن:

$$\frac{\partial W(a)}{\partial a}=\frac{\hbar^2 a}{m}-\frac{k}{2a^3}\left[\frac{\pi^2}{6}-1\right]$$

ومساواة القيمة السابقة بالصفر نجد أن قيمة a المثلى هي:

$$a=\left\{\left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)\left[\frac{\pi^2}{12}-\frac{1}{2}\right]\right\}^{1/4}$$

والطاقة المقابلة لها هي:

$$W_{\min}=\frac{\hbar^2 a^2}{2m}+\frac{k}{a^2}\left[\frac{\pi^2}{24}-\frac{1}{4}\right]$$

$$=\frac{\hbar^2\left\{\left(\dfrac{mk}{\hbar^2}\right)\left[\dfrac{\pi^2}{12}-\dfrac{1}{2}\right]\right\}^{1/2}}{2m}+\frac{k\left[\dfrac{\pi^2}{24}-\dfrac{1}{4}\right]}{\left\{\left(\dfrac{mk}{\hbar^2}\right)\left[\dfrac{\pi^2}{12}-\dfrac{1}{2}\right]\right\}^{1/2}}$$

$$=\frac{A}{2}\hbar\omega+\frac{B}{A}\hbar\omega$$

و

$$A=\left[\frac{\pi^2}{12}-\frac{1}{2}\right]^{1/2}=0.56786,\quad B=\left[\frac{\pi^2}{24}-\frac{1}{4}\right]=0.16123,$$

ومنها نحصل على الطاقة المثلى:

$$E_o=W_{\min}=\frac{0.56786}{2}\hbar\omega+\frac{0.16123}{0.56786}\hbar\omega=0.56786\hbar\omega$$

$$=1.1357\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right)$$

وهى ١٤٪ أكبر من القيمة الحقيقية.

ولرسم الدالة المفترضة $\varphi(x)$ في المدى المحدد بالقيم $\{-\pi/2, \pi/2\}$ ومقارنتها بالدالة الحقيقية:

$$\psi_{o}(x)=\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^{2}/2}, \quad b=\frac{m\omega}{\hbar}$$

يجب أن نعرف الدالة المفترضة والمعيرة بالشكل:

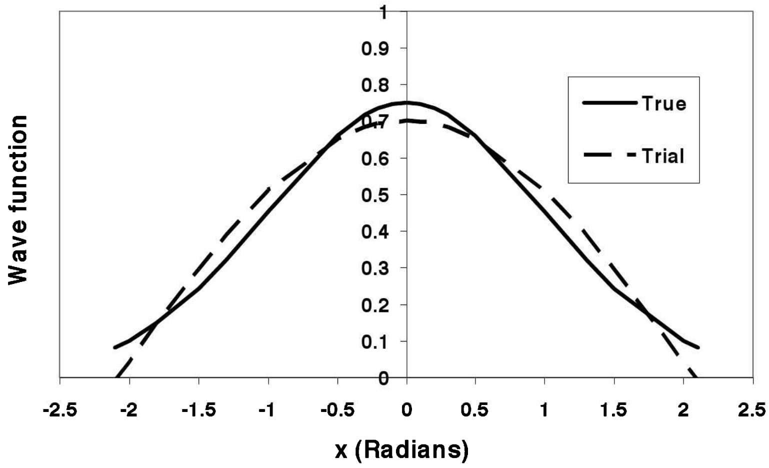
$$\varphi(x)=\begin{cases} N\cos(ax) & -\frac{\pi}{2a}\leq x\leq\frac{\pi}{2a} \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

حيث N هو ثابت المعيارية، ومن السهل حسابه (يترك كواجب منزلي)، وهو $N=\sqrt{\frac{2a}{\pi}}$ و a قد حسبت سابقاً وتعطي بالعلاقة:

$$a=\left\{\left(\frac{m^{2}\omega^{2}}{\hbar^{2}}\right)\left[\frac{\pi^{2}}{12}-\frac{1}{2}\right]\right\}^{1/4}=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\left[\frac{\pi^{2}}{12}-\frac{1}{2}\right]^{1/4}=0.7536\sqrt{b}$$

وللتبسيط بالرسم سوف نستخدم $b=1$.

الرسم التالي يوضح مدى الفرق بين الدالتين، الحقيقية والمفترضة، وخصوصاً في المنتصف حول $x=0$. المنحني ذو الخط المتصل يعبر عن الدالة الحقيقية $\psi_{o}(x)$ والمنحني المتقطع يعبر عن الدالة المفترضة $\varphi(x)$.



٢- نظرية التغاير الخطية

سوف نفترض هنا أن الدالة التجريبية المقترحة φ هي عبارة عن جمع خطي (Linear combination) لبعض الدوال الاختيارية ψ_i المحددة والمعروفة، والتي لا يشترط لها أن تكون معيرة أو متعامدة. ولسهولة الإيضاح سوف نستخدم دالة تجريبية بسيطة مثل:

$$\varphi(a_1, a_2) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \qquad (١٤)$$

حيث a_n متغيرات اختيارية. ولحساب التكامل $W = \dfrac{<\varphi|\hat{H}|\varphi>}{<\varphi|\varphi>}$ ، نجد أن:

$$\begin{aligned} <\varphi|\varphi> &= <a_1\psi_1 + a_2\psi_2 | a_1\psi_1 + a_2\psi_2> \\ &= a_1a_1^*S_{11} + a_2a_2^*S_{22} + a_1^*a_2S_{12} + a_2^*a_1S_{21}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} <\varphi|\hat{H}|\varphi> &= <a_1\psi_1 + a_2\psi_2 | \hat{H} | a_1\psi_1 + a_2\psi_2> \\ &= a_1a_1^*H_{11} + a_2a_2^*H_{22} + a_1^*a_2H_{12} + a_2^*a_1H_{21} \end{aligned}$$

حيث استخدمنا الرموز:

$$\begin{aligned} H_{ij} &= <\psi_i|\hat{H}|\psi_j> = H_{ji}; \\ S_{ij} &= <\psi_i|\psi_j> = S_{ji} \end{aligned}$$

والآن نستخدم المعادلة التي تحتوي W على الصورة:

$$\begin{aligned} & a_1a_1^*H_{11} + a_2a_2^*H_{22} + a_1^*a_2H_{12} + a_2^*a_1H_{21} \\ &= W\left(a_1a_1^*S_{11} + a_2a_2^*S_{22} + a_1^*a_2S_{12} + a_2^*a_1S_{21}\right) \end{aligned} \qquad (١٥)$$

وللحصول على القيمة الدنيا للطاقة W نستخدم التفاضل $\dfrac{\partial W}{\partial a_2^*} = 0, \quad \dfrac{\partial W}{\partial a_1^*} = 0,$

فنحصل على المعادلتين الآتيتين:

$$\begin{aligned} (H_{11} - WS_{11})a_1 + (H_{12} - WS_{12})a_2 &= 0 \\ (H_{21} - WS_{21})a_1 + (H_{22} - WS_{22})a_2 &= 0 \end{aligned} \qquad (١٦)$$

وهما زوج من المعادلات الجبرية الخطية في المتغيرات a_1 و a_2. وتبعاً لنظرية المعادلات الجبرية الخطية فإنه يوجد حل غير صفري، (بمعنى أنه غير الحل $a_1 = a_2 = 0$) إذا ساوينا محدد المعاملات بالصفر، وهو:

$$\begin{vmatrix} (H_{11} - WS_{11}) & (H_{12} - WS_{12}) \\ (H_{21} - WS_{21}) & (H_{22} - WS_{22}) \end{vmatrix} = 0 \qquad (١٧)$$

فإننا نحصل على معادلة من الدرجة الثانية في W. وهذا يعني أن الحل النهائي سوف يعطينا جذرين أو قيمتين للطاقة؛ وبناء على مبدأ التغاير فإننا سنختار الجذر الأدنى قيمة لتمثيل طاقة المستوى الأرضي للنظام، أو على الأقل الحد الأعلى لطاقة المستوى الأرضي. الجذر الثاني: للمعادلة يعطي الحد الأعلى لطاقة المستوى المثار الأول (وهو عموماً ليس بالدقة المطلوبة).

للحالة العامة والتي تتكون فيها الدالة تجريبية بالشكل العام:

$$\varphi(a_1, a_2, \cdots) = \sum_{n=1}^{N} a_n \psi_n \qquad (١٨)$$

ونتيجةً للشروط:

$$\frac{\partial W}{\partial a_i^*} = 0, \quad i = 1, 2, \cdots N$$

سنحصل على N من المعادلات الجبرية الخطية ومنها نحصل على المحدد العام

$$\begin{vmatrix} H_{11} - WS_{11} & H_{12} - WS_{12} & \cdots & H_{1N} - WS_{1N} \\ H_{21} - WS_{21} & H_{22} - WS_{22} & \cdots & H_{2N} - WS_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{N1} - WS_{N1} & H_{N2} - WS_{N2} & \cdots & H_{NN} - WS_{NN} \end{vmatrix} = 0 \qquad (١٩)$$

وهذه المعادلة عبارة عن متعددة الحدود من الدرجة N في المتغير W. بحل المعادلة واختيار أدنى قيمة، لنسميها $W_{\min}$، لتعبر عن القيمة التقريبية لطاقة النظام الكمي في المستوى الأرضي. قيم الجذور المتبقية وعددها $N-1$ تعبر عن القيم التقريبية للمستويات المتبقية $N-1$.

مثال: لجسيم يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 1 \\ \infty & 0 > x > 1 \end{cases}$$

احسب طاقة أدنى مستوى باستخدام طريقة التغاير الخطية للدالة الاختيارية

$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2;$$
$$\psi_1 = x(1-x), \quad \psi_2 = x^2(1-x)^2$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, 1) = 0$ محققة.

الحل: لهذا المثال نعلم أن المؤثر الهملتوني هو $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ ومستويات الطاقة المميزة هي $E_n = n^2\pi^2\frac{\hbar^2}{2m}$ وللتبسيط سوف نستخدم $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ وعليه فإن التكاملات تحسب كالتالي:

$$S_{11} = \int_0^1 \psi_1^2 dx = \int_0^1 x^2(1-2x+x^2)dx = 1/30;$$
$$S_{22} = \int_0^1 \psi_2^2 dx = \int_0^1 x^4(1-2x+x^2)dx = 1/630;$$
$$S_{12} = \int_0^1 \psi_1\psi_2 dx = \int_0^1 x^3(1-2x+x^2)dx = 1/140;$$

$$H_{11} = \int_0^1 \psi_1\hat{H}\psi_1 dx = -\int_0^1 \psi_1\frac{d^2\psi_1}{dx^2}dx = 2\int_0^1 x(1-x)dx = 1/3;$$

$$H_{22} = \int_0^1 \psi_2\hat{H}\psi_2 dx = -\int_0^1 \psi_2\frac{d^2\psi_2}{dx^2}dx$$
$$= -2\int_0^1 x^2(1-8x^2+19x^4-18x^4+6x^5)dx = 2/105;$$
$$H_{12} = \int_0^1 \psi_1\hat{H}\psi_2 dx = -\int_0^1 \psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2}dx$$
$$` = -2\int_0^1 x(1-7x+12x^2-6x^3)dx = 1/15$$

وطاقة أدنى مستوى هي أصغر جذر للمحدد:

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{1}{3}-\frac{W}{30}\right) & \left(\frac{1}{15}-\frac{W}{140}\right) \\ \left(\frac{1}{15}-\frac{W}{140}\right) & \left(\frac{2}{105}-\frac{W}{630}\right) \end{vmatrix} = 0$$

حيث W يأتي من مفكوك المحدد بالمعادلة

$$W^2 - 112W + 1008 = 0$$

التي لها الجذور:

$$W_{\min} = 9.8698 \text{ and } 102.13$$

وهما متفقتان للمستوى الأرضي $n = 1$ بالرغم من سهولة الدالة المفترضة. ونجد هنا أن الاختلاف بين الطاقة المحسوبة بواسطة طريقة التغاير الخطية والقيمة الحقيقية للمستوى الأول المثار $n = 2$ كبيرة (انظر الجدول التالي للمقارنة).

n	$W_{\min}$	$W_{\text{exact}} = \pi^2 n^2$
١	٩٫٨٦٩٨	٩٫٨٦٩٦
٢	١٠٢٫١٣	٣٩٫٤٧٨٤

البرنامج التالي كتب باستخدام البرنامج ماثيماتيكا لحساب قيم الطاقة للمثال السابق بواسطة طريقة التغاير الخطية. يمكن تنفيذ البرنامج للتأكد من الحسابات. وأيضاً بالإمكان تغيير شكل الدوال $\Psi1$ و $\Psi2$ لحساب قيم الطاقة.

```
Ψ1 = x (1 - x) ; Ψ2 = x^2 (1 - x)^2;
```

$$s11 = \int_0^1 \Psi1^2\, dx$$

$$s22 = \int_0^1 \Psi2^2\, dx$$

$$s12 = \int_0^1 \Psi2\ \Psi1\, dx$$

```
s21=s12
```

$$h11 = \int_0^1 \Psi1 * (-\partial_{\{x,2\}}\Psi1)\, dx$$

$$h12 = \int_0^1 \Psi1 * (-\partial_{\{x,2\}}\Psi2)\, dx$$

```
h21=h12
```

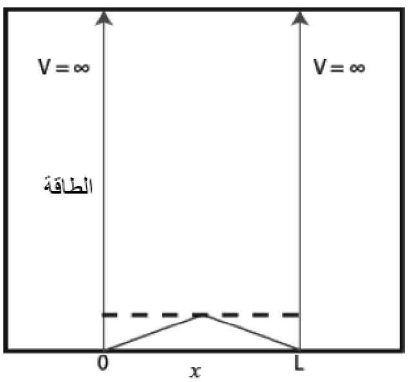
$$h22 = \int_0^1 \Psi2 * (-\partial_{\{x,2\}}\Psi2)\, dx$$

$$AA = \begin{pmatrix} h11 - W\,s11 & h12 - W\,s12 \\ h21 - W\,s21 & h22 - W\,s22 \end{pmatrix}$$

$$\left\{\left\{\frac{1}{3} - \frac{W}{30}, \frac{1}{15} - \frac{W}{140}\right\}, \left\{\frac{1}{15} - \frac{W}{140}, \frac{2}{105} - \frac{W}{630}\right\}\right\}$$

```
Solve[Det[AA]==0 ,W] //N
{{W→9.86975},{W→102.13}}
```

مثال: جسيم محصور في صندوق لا نهائي الجهد عرضه L يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:



$$V(x) = \begin{cases} Ax & 0 \le x \le \frac{L}{2} \\ A(L-x) & \frac{L}{2} \le x \le L \end{cases}$$

احسب طاقة ودوال أدنى مستويين باستخدام طريقة التغاير الخطية للدالة الاختيارية:

$$\varphi(a_1,a_2,x)=a_1\psi_1+a_2\psi_2;\qquad \psi_i=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(i\frac{\pi x}{L}),$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1,a_2,0)=\varphi(a_1,a_2,L)=0$ محققة.

الحل: استخدم الهملتونيان الذي يكتب على الصورة:

$$\hat{H}(x)=\begin{cases}\hat{H}_1(x)=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+Ax & 0\le x\le\dfrac{L}{2}\\ \hat{H}_2(x)=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+A(L-x) & \dfrac{L}{2}\le x\le L\end{cases}$$

لحساب التكاملات الآتية:

$$S_{11}=\int_0^L\psi_1^2dx=1;\quad S_{22}=\int_0^L\psi_2^2dx=1;\quad S_{12}=S_{21}=\int_0^L\psi_1\psi_2dx=0;$$

$$H_{11}=\int_0^L\psi_1\hat{H}\psi_1dx=\int_0^{L/2}\psi_1\hat{H}_1\psi_1dx+\int_{L/2}^L\psi_1\hat{H}_2\psi_1dx=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}+AL\left(\frac{1}{4}+\frac{1}{\pi^2}\right);$$

$$H_{22}=\int_0^L\psi_2\hat{H}\psi_2dx=\int_0^{L/2}\psi_2\hat{H}_1\psi_2dx+\int_{L/2}^L\psi_2\hat{H}_2\psi_2dx=\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}+\frac{AL}{4};$$

$$H_{12}=H_{21}=\int_0^L\psi_1\hat{H}\psi_2dx=\int_0^{L/2}\psi_1\hat{H}_1\psi_2dx+\int_{L/2}^L\psi_1\hat{H}_2\psi_2dx=0$$

ومنها أوجد معادلة المحدد العام:

$$\begin{vmatrix}\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}+AL\left(\dfrac{1}{4}+\dfrac{1}{\pi^2}\right)-W & 0\\ 0 & \dfrac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}+\dfrac{AL}{4}-W\end{vmatrix}=0$$

و منها نجد أن:

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}+AL\left(\frac{1}{4}+\frac{1}{\pi^2}\right),\qquad E_2=\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}+\frac{AL}{4}$$

وهما أقل طاقتين ويعتمدان على قيم الجهد المؤثر A . ومن قيم الطاقة المحسوبة يمكن حساب الدوال المميزة بالحصول على المعادلات العامة وهما:

$$a_1\left\{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}+AL\left(\frac{1}{4}+\frac{1}{\pi^2}\right)-W\right\}+a_2\times(0)=0$$
$$a_1\times(0)+a_2\left\{\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}+\frac{AL}{4}-W\right\}=0$$

ولحساب الدالة المميزة المناظرة للقيمة E_1 ، نعوض بالقيمة E_1 بالمعادلتين السابقتين فنجد أن جميع الحدود تؤول للصفر ماعدا الحد الأخير. ولتصبح المعادلة الأخيرة مساوية للصفر كالأولى فإنه يتوجب علينا وضع $a_2=0$. ولكن إذا وضعنا $a_2=0$ فما هو الحال بالنسبة إلى a_1؟ الحل هو أي قيمة ماعدا الصفر، وإذا أردنا دالة معيرة فيجب أن نختار $a_1=1$. وبالنسبة إلى القيمة الثانية E_2 نجد أن $a_1=0$ و $a_2=1$. ومن ثم نحصل على الجدول التالي:

القيمة المميزة	الدالة المميزة
$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}+AL\left(\frac{1}{4}+\frac{1}{\pi^2}\right)$	$\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{\pi x}{L})$
$E_2=\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}+\frac{AL}{4}$	$\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{2\pi x}{L})$

ولنا ملاحظة مهمة هنا وهي أن التغيير في الجهد (وهو متماثل بالنسبة إلى النقطة $x=\frac{L}{2}$) بهذا المثال لم يخلط بين المستويين لأنهما غير متماثلين (الدالة ψ_1 دالة زوجية و الدالة ψ_2 دالة فردية) بالنسبة لمحور التماثل الذي يمر بالنقطة $x=\frac{L}{2}$.

٢- تمارين عامة

١- لجسيم في بئر جهد لانهائي مربع، ذي بعد واحد وسعة L ، وضح لماذا لا تصلح الدالة $\psi(x)=\sqrt{\frac{3}{L^3}}x$ لحساب طاقة المستوى الأرضي بطريقة التغاير.

٢- باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\psi_a=x^a(1-x)^a$ حيث a متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لجسيم في بئر جهد لانهائي مربع، ذي بعد واحد وسعة 1.

أ- أثبت أن $W=\frac{<\psi_a|\hat{H}|\psi_a>}{<\psi_a|\psi_a>}=\frac{2a(4a+1)}{2a-1}$

ب- أثبت أن $a = 1.11237$

ومنها أثبت أن $W_{\min} = 9.90$

٣- باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\psi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{y^5}{3\pi}}\, r e^{-yr}$ حيث y متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين.

أ- أثبت أن $<\psi_{1s} | \hat{H} | \psi_{1s}> = \frac{4}{3}\left\{\frac{y^2}{8} - \frac{3}{8}y\right\}$

ب- أثبت أن $y = \frac{3}{2}$

ج- أثبت أن $W_{\min} = -0.375\,\mathrm{H}$

٤- باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\psi_{1s}(r) = Ce^{-a(1+r)}$ حيث a متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين.

أ- أثبت أن $C = \frac{a^{3/2}e^{a}}{\sqrt{\pi}}$

ب- أثبت أن $<\psi_{1s} | \hat{H} | \psi_{1s}> = a + \frac{a^2}{2}$

ج- احسب القيمة المثالية للمتغير a ومنه أثبت أن $W_{\min} = -0.5\,\mathrm{H}$

٤- باستخدام طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\psi_{1s}(r) = Ce^{-ar^2}$ حيث a متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين.

أ- أثبت أن $C = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{3/4}$

ب- أثبت أن $<\psi_{1s} | \hat{H} | \psi_{1s}> = \frac{3a}{2} - 2\left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2}$

ج- احسب القيمة المثالية للمتغير a ومنه أثبت أن $W \geq E_1$

٥- لحساب طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي الخطي استخدم طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\psi(x) = Ce^{-ax^2}$ حيث a متغير اختياري والهملتونيان $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$.

أ- أثبت أن $C = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}$

ب- أثبت أن $W = \frac{a\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8a}$ ومنه أثبت أن القيمة المثالية $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$.

ج- أثبت أن طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي هي $E_0 = W_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$.

٦- لحساب طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي الخطي استخدم طريقة التغاير للدالة الاختيارية $\psi(x,a) = c\frac{1}{x^2 + a^2}$ حيث a متغير اختياري و

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

أ- أثبت أن $C = \left(\frac{2a^3}{\pi}\right)^{1/2}$

ب- أثبت أن $W = \frac{\hbar^2}{4ma^2} + \frac{m\omega^2 a^2}{2}$ ومنه أثبت أن القيمة المثالية $a = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}}$.

ج- أثبت أن طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي هي $E_o = W_{\min} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar\omega}{2}$

ومن ثم نسبة الخطأ $\frac{\hbar\omega/\sqrt{2} - \hbar\omega/2}{\hbar\omega/2} = \sqrt{2} - 1 \approx 0.41 = 41\%$ وهى نسبة كبيرة.

٧- لجسيم يتحرك في صندوق أحادي البعد وبوجود دالة الجهد دلتا بالصورة:

$$V(x) = -V_o\delta(x)$$

حيث V_o ثابت وله وحدات الطاقة. باستخدام الدالة الاختيارية:

$$\psi(x) = A\, e^{-\lambda x^2}$$

حيث λ متغير اختياري، تحقق من القيم التالية:

i- $\frac{d\psi}{dx} = -2\lambda x\psi$

ii- $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left(2\lambda - 4x^2\lambda^2\right)\psi$

iii- $A^2\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}=1 \quad \Rightarrow \quad A=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4}\lambda^{1/4}$

iv- $\langle K.E.\rangle = A^2\langle\psi|-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}|\psi\rangle = \lambda/2$

v- $P.E. = A^2\langle\psi|V(x)|\psi\rangle = -\left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/2}V_o$

vi- $\lambda. = -\frac{2V_0^2}{\pi}$

vii- $\frac{K.E.}{P.E.} = -\frac{1}{2}$

٨- - لجسيم يتحرك في صندوق أحادي البعد وبوجود دالة الجهد دلتا بالصورة:

$$V = -V_0 e^{-\alpha x^2}$$

حيث V_o ثابت وله وحدات الطاقة. باستخدام الدالة الاختيارية:

$$\psi(x) = Ne^{-\lambda x^2}$$

حيث λ متغير اختياري، تحقق من القيم التالية:

viii- $T\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = \frac{\hbar^2}{2m}e^{-\lambda x^2}\lambda(1-2x^2\lambda)$

ix- $\langle\psi|\psi\rangle = N^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\lambda x^2}dx = N^2\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}=1 \qquad \Rightarrow \qquad N=\left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4}$

x- $\langle\psi|T|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}N^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\lambda x^2}\lambda(1-2x^2\lambda)dx = \frac{\hbar^2}{2m}\lambda$

xi- $\langle\psi|V|\psi\rangle = -N^2\int_{-\infty}^{\infty}V_0e^{-\alpha x^2}e^{-2\lambda x^2}dx = -V_0\sqrt{\frac{2\lambda}{2\lambda+\alpha}}$

xii- $W = \langle\psi|T|\psi\rangle + \langle\psi|V|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\lambda - V_0\sqrt{\frac{2\lambda}{2\lambda+\alpha}},$

xiii- Using $\hbar = V_o = \alpha = 1$, then the condition

$$\frac{\partial W}{\partial\lambda} = 0, \qquad \text{gives} \quad \lambda_1 = 0.374, \quad \lambda_2 = -1.109$$

و

$$W(\lambda) = -1.903$$

٩- لجسيم يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 1 \\ \infty & 0 > x > 1 \end{cases}$$

احسب طاقة أدنى مستوى باستخدام طريقة التغاير الخطية للدالة الاختيارية

$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2;$$
$$\psi_1 = x(1-x), \quad \psi_2 = x^2(1-x)$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, 1) = 0$ محققة.

للمساعدة: احسب التكاملات الآتية:

$$S_{11} = \int_0^1 \psi_1^2 dx = \int_0^1 x^2(1-2x+x^2)dx = 1/30;$$
$$S_{22} = \int_0^1 \psi_2^2 dx = \int_0^1 x^4(1-2x+x^2)dx = 1/105;$$
$$S_{12} = \int_0^1 \psi_1\psi_2 dx = \int_0^1 x^3(1-2x+x^2)dx = 1/60;$$

$$H_{11} = \int_0^1 \psi_1 \hat{H} \psi_1 dx = -\int_0^1 \psi_1 \frac{d^2\psi_1}{dx^2}dx = 2\int_0^1 (x-x^2)dx = 1/3;$$
$$H_{22} = \int_0^1 \psi_2 \hat{H} \psi_2 dx = -\int_0^1 \psi_2 \frac{d^2\psi_2}{dx^2}dx = -\int_0^1 x^2(2-8x+6x^2)dx = 2/15;$$
$$H_{12} = \int_0^1 \psi_1 \hat{H} \psi_2 dx = -\int_0^1 \psi_1 \frac{d^2\psi_2}{dx^2}dx = -\int_0^1 x(2-8x+6x^2)dx = 1/6$$

ومنها أوجد:

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{1}{3} - \frac{W}{30}\right) & \left(\frac{1}{6} - \frac{W}{60}\right) \\ \left(\frac{1}{6} - \frac{W}{60}\right) & \left(\frac{1}{15} - \frac{W}{105}\right) \end{vmatrix} = 0$$

واحسب منها جذور المعادلة: $W^2 - 52W + 420 = 0$

٨- جسيم محصور في صندوق لانهائي الجهد عرضه L يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} Ax & 0 \le x \le \dfrac{L}{2} \\ A(L-x) & \dfrac{L}{2} \le x \le L \end{cases}$$

احسب طاقة ودوال أدنى مستويين باستخدام طريقة التغاير الخطية للدالة الاختيارية

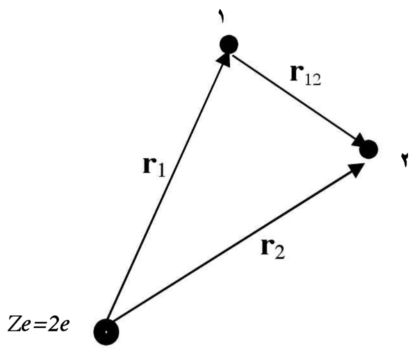
$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_3; \qquad \psi_i = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(i\frac{\pi x}{L}),$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, L) = 0$ محققة.

ملحق (13.A)

ذرة الهيليوم باستخدام طريقة التغاير

المثال التالي ما هو إلا تطبيق مباشر لنظرية التغاير العامة لحساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيليوم (He). وتتكون ذرة الهيليوم من إلكترونين (١و٢) مرتبطين بنواة شحنتها $Ze = 2e$ ، انظر الرسم المرافق.



سوف نستخدم هنا الدالة الاختيارية:

$$\psi_{1s}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)$$

حيث:

$$\psi_{1s}(r_i) = \sqrt{\frac{a^3}{\pi}}\, e^{-a r_i}$$

هي الدالة المميزة لإلكترون ذرة الهيدروجين بالمستوى الأرضي و a متغير اختياري سوف تحسب قيمته باستخدام نظرية التغاير. الهملتونيان لهذه الذرة، باستخدام الوحدات الذرية (انظر الملحق ١) واعتبار أن النواة ساكنة، يأخذ الصورة:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \qquad \textbf{(A.1)}$$

ولحل هذه المسألة فمن المناسب أن نضع الهملتونيان بالصورة:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{a}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{a}{r_2} + \frac{(a-2)}{r_1} + \frac{(a-2)}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \qquad \textbf{(A.2)}$$

وباستخدام معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين (بالوحدات الذرية) بالصورة:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{a}{r_i}\right)\psi(r_i) = -\frac{a^2}{2}\psi(r_i) \qquad \textbf{(A.3)}$$

نجد أن:

$$W(a) = \frac{a^6}{\pi^2}\iint e^{-a(r_1+r_2)}\left[-\frac{a^2}{2} - \frac{a^2}{2} + \frac{(a-2)}{r_1} + \frac{(a-2)}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right] e^{-a(r_1+r_2)} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2$$

$$W(a) = -a^2 + \frac{2a^6(a-2)}{\pi}\int \frac{e^{-2ar}}{r}dr + \frac{a^6}{\pi^2}\int\int \frac{e^{-2a(r_1+r_2)}}{r_{12}}dr_1dr_2$$
$$= -a^2 + 2a(a-2) + \frac{5a}{8} = a^2 - \frac{27}{8}a$$

وقد استخدمنا التكاملات القياسية بالملحق **B**. ولإيجاد القيم المثلى للمتغير Z نستخدم العلاقة $\frac{\partial W(a)}{\partial a} = 0$ فنجد أن $a = \frac{27}{16} \equiv Z - \frac{5}{16}$ و طاقة أدنى مستوى:

$$E_1 = W_{\min} = a^2 - \frac{27}{8}a = \left(\frac{27}{16}\right)^2 - \left(\frac{27}{8}\right)\left(\frac{27}{16}\right) = -\left(\frac{27}{16}\right)^2$$
$$= -2.8477 \text{ H} = -77.45 \text{ eV}$$

وهي قيمةً مقبولة (٢٪ فرق) مقارنةً بالقيمة العملية $-2.905 \text{ H} = -78.98 \text{ eV}$.

وعملياً نستطيع أن نقارن النتائج المقربة مع جهد التأين الأول (IP) ، وهي الطاقة اللازمة لنزع إلكترون من المدار $1s$ إلى خارج الذرة، لإتمام التفاعل:

$$\text{He} \rightarrow \text{He}^+ + e^-$$

حيث عرفنا:

$$(\text{IP})_{\text{He}} \rightarrow E_{\text{He}^+} - E_{\text{He}}$$

وتحسب من العلاقة:

$$(\text{IP})_{\text{He}} = (Z - \tfrac{5}{16}) - \tfrac{1}{2}Z^2 \quad \text{eV}$$

ونحن نعلم تماماً أن

$$E_{\text{He}^+} = -2.0 \text{ H} = -54.4 \text{ eV}$$

لذا فإن القيمة النظرية تعطينا

$$(\text{IP})_{\text{He}} = -2.0 \text{ H} + 2.905 \text{ H} = 0.905 \text{ H} = 23.05 \text{ eV}$$

وهي أصغر من القيمة العملية ($0.904 \text{ H} = 24.6 \text{ eV}$) بحوالي ٦٪.

ونلاحظ هنا ما يلي:

أ- إن طريقة التغاير أعطت قيمة قريبة من القيمة العملية بالرغم من الصيغة المبسطة للدالة المقترحة. باستعمالنا دالة أكثر تعقيداً نستطيع الحصول على

قيمة قريبةٍ جداً من القيمة العملية (انظر الجدول التالي، وذلك باستخدام الرموز $u = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2$). الطاقة والخطأ لهم الوحدات هارتري

الدالة المقترحة	المستوى الأرضي	الخطأ
e^{-2u}	−2.7500	0.1537
$e^{-au}, \quad a = 27/16$	−2.8477	0.0560
$e^{-au}\cosh(ct), \quad a = 1.67, c = 0.48$	−2.8754	0.0283
$e^{-au}(1+ct^2), \quad a = 1.69, c = 0.142$	−2.8768	0.0269

ب- القيمة $a < 2$ تفسر بأنها الشحنة المؤثرة (Effective charge) للنواة. وذلك ناتج من أن كل إلكترون يحجب النواة، بحيث إن الإلكترون الثاني يتأثر بشحنة من النواة مقدارها أقل من القيمة ٢.

ج- يوجد قيم عملية لجهد التأين الأول (IP) لبعض الذرات التي نزعت منها جميع الإلكترونات ماعدا إلكترونين يتواجدان بالمستوي $1s$، وهي كالتالي:

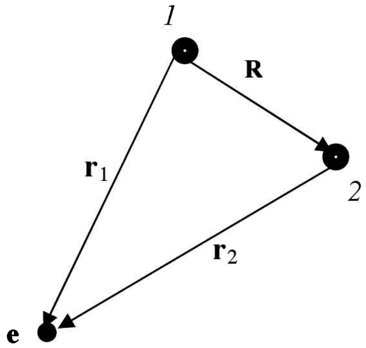
العدد الذري Z	الذرة	القيمة النظرية (eV)	القيمة العملية (eV)	النسبة المئوية للخطأ ٪
2	He	23.2	24.5	5.31
3	Li^{+}	74.1	75.6	1.98
4	Be^{++}	152.2	153.6	0.91
6	C^{4+}	390	393	0.76
8	O^{6+}	737	738	0.14

من الجدول نلاحظ أن النسبة المئوية، التي عبرنا عنها (بالفرق بين القيمة العملية والقيمة النظرية مقسمةً على القيمة العملية) ضرب ١٠٠، تقل مع زيادة العدد الذري Z.

ملحق (13.B)

أيون جزيء الهيدروجين H_2^+

المثال التالي ماهو إلا تطبيق مباشر لنظرية التغاير الخطية لأيون جزيء الهيدروجين (H_2^+) الذي يتكون من بروتونين (١و٢) متماسكين بإلكترون وحيد e. انظر الرسم المرافق.



مثال : ناقش (بدون حساب التكاملات) طاقة أدنى مستويين ودالتهما لأيون جزيء الهيدروجين باستخدام طريقة التغاير الخطية باستخدام الدالة الاختيارية

$$\varphi = a_1\psi_1 + c_2\psi_2 ;\quad \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r_1}, \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r_2} \tag{B.1}$$

حيث a_i متغيرات اختيارية. ترمز ψ_i للدالة المميزة لحالة أدنى طاقة لإلكترون مترابط مع بروتون i.

الحل: لأيون جزيء الهيدروجين نعرف الهملتونيان التقريبي (حيث تم إهمال الجزء الخاص بحركة النواة)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{R} \tag{B.2}$$

و التكاملات

$$H_{ij} = <\psi_i | \hat{H} | \psi_j> = H_{ji};$$
$$S_{ij} = <\psi_i | \psi_j> = S_{ji}$$

ومنه نحصل على المحدد

$$\begin{vmatrix} (H_{11} - W) & (H_{12} - WS) \\ (H_{21} - WS) & (H_{22} - W) \end{vmatrix} = 0 \tag{B.3}$$

ومنه نجد أن

$$H_{11} - W = \pm(H_{12} - WS) \tag{B.4}$$

ومنه نحصل على جذرين يعبران عن طاقة أدنى مستويين ودالاتهما وهما

$$W_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S}$$
$$W_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S} \qquad \textbf{(B.5)}$$

ولحساب الدالتين المرتبطتين بهما نستخدم المعادلة

$$a_1(H_{11} - W) + a_2(H_{11} - SW) = 0 \qquad \textbf{(B.6)}$$

وباستخدام الجذر $W_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S}$ نجد أن $a_1 = a_2$ و $\varphi_+ = a_1(\psi_1 + \psi_2)$ ،

وباستخدام الجذر $W_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S}$ نجد أن $a_1 = -a_2$ و $\varphi_- = a_1(\psi_1 - \psi_2)$.

واجب منزلي: باستخدام خاصية التعامد $<\varphi_+|\varphi_+> = 1$ أثبت أن $a_1 = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S}}$.

وباستخدام $<\varphi_-|\varphi_-> = 1$ أثبت أن $a_2 = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S}}$ ولهذا تأخذ مستويات الطاقة والدوال المرتبطة بها الشكل:

$$W_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S}, \quad \varphi_+ = \frac{\psi_1 + \psi_2}{\sqrt{2 + 2S}}$$
$$W_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S}, \quad \varphi_- = \frac{\psi_1 - \psi_2}{\sqrt{2 - 2S}} \qquad \textbf{(B.7)}$$

الباب الرابع عشر

نظرية الاضطراب للحالات المستقرة

(Time-Independent Perturbation Theory)

الباب الرابع عشر

نظرية الاضطراب للحالات المستقرة

حتى الآن لم نتعامل إلا مع نظم فيزيائية لها حلول تحليلية كاملة. هذا بالطبع ناتج عن الشكل المبسط للجزء الخاص بجهد التفاعل بالهملتونيان (الابتدائي)، والذي أدى لحل معادلة شرودنجر بدون طرق تقريبية.

والآن ماهو العمل إذا لم يكن جهد التفاعل ومن ثم الهملتونيان الجديد (المعدل) ليس بالشكل البسيط؟ الحل هو: الاعتماد على الحلول العددية لحل المعادلات التفاضلية باستخدام الكمبيوتر. ولكن، إذا لم يكن هناك فرق كبير بين الهملتونيان المعدل والابتدائي فإننا نستطيع أن نستخدم نتائج نظرية الاضطراب (تسمى أيضاً نظرية التشويش) لإيجاد قيم تقريبية للطاقة والدوال المميزة.

فما هي نظرية الاضطراب؟ هي نظرية تعمل بدرجة دقة عالية في حالة إضافة اضطراب (حد) صغير جداً للطاقة الكلية للنظام الفيزيائي. ويصبح الهملتونيان الكلي $\hat{H}$ ماهو إلا مجموع جزئين: الأول هو الهملتونيان غير المضطرب $\hat{H}_o$ (وهو الجزء الممكن إيجاد حل كامل له تحليلياً). والثاني هو الجزء الصغير جداً والمسؤول عن الاضطراب $\hat{H}'$:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}', \qquad \hat{H}' << \hat{H}_o \qquad (1)$$

وتصبح المعادلة المميزة غير المضطربة هي:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad (2)$$

وخطتنا هنا هي أن نضع الهاملتونيان الجديد (ومن ثم طاقة ودالة النظام المضطرب) على هيئة مجموعة من الحدود (أو متسلسلة شبيهة بمتسلسلة تيلور). وحيث إن الاضطراب ما هو إلا جزء بسيط، لذا فإننا سوف نحتفظ بحدين أو ثلاثة حدود من المتسلسلة لإيجاد أقرب قيمة تقريبية للطاقة غير المضطربة.

نظراً للشبه بين هذه الطريقة ومتسلسلة تيلور فسوف نأخذ مثالاً بسيطا لمتسلسلة تيلور للدالة:

$$f(x) = (1+x)^{1/2}$$

حيث إن أول ثلاثة حدود من المتسلسلة حول $x = 0$ هو:

$$f(x) = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + ...$$

إذا اعتبرنا أن x هي الاضطراب بالنسبة إلى القيمة ١ (غير المضطربة). وإذا كانت $x << 1$ فإن الحدين المضافين للواحد سيكونان ملائمين لإيجاد قيمة تقريبية للدالة $f(x)$. أول حد (يحتوي على x) يقال عنه: التصحيح من الدرجة الأولى، والحد الثاني (الذي يحتوي على x^2) يقال عنه التصحيح من الدرجة الثانية). كمثال، القيمة غير المضطربة للدالة عند $(x = 0.2)$ هي $f(x = 0.2) = (2.0)^{...}$ $f(x=0.2) = 1.0954451$. وباستخدام ثلاثة حدود للدالة فقط نجد أن:

$$f(0.2) = 1.000 + 0.100 - 0.005 = 1.095$$

وهي أقل من القيمة غير المضطربة بنسبة 0.04%.

وسنحاول في دراستنا التالية أن نستخدم الطريقة نفسها لإيجاد التصحيحات التقريبية لطاقة النظام المضطرب.

١- اضطراب المستويات المنفردة

دعونا نعرف الدالة المميزة، غير المضطربة، بالرمز $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ حيث يدل الرمز العلوي (0) على الدالة المميزة للهملتونيان $\hat{H}_o$ والتي تحقق المعادلة المميزة:

$$\hat{H}_o\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \tag{3}$$

حيث $E_n^{(0)}$ هى الطاقة المميزة للمستوى n (أحد المستويات الخاصة بالهملتونيان $\hat{H}_o$). وللتبسيط فقط؛ سوف نضع المعادلة (٣) بالصورة:

$$\hat{H}_o\left|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{4}$$

وسنفترض هنا أن قيمة الدالة المميزة غير المضطربة $\left|\psi\right\rangle$ للهملتونيان الكلي $\hat{H}$ قريبة جداً من الدالة المميزة غير المضطربة $\left|n^{(0)}\right\rangle$ بحيث بإمكاننا وضعها بالشكل المتسلسل:

$$\left|\psi\right\rangle = \left|n^{(0)}\right\rangle + \left|a\right\rangle + \left|b\right\rangle + ... \tag{5}$$

حيث $\left|a\right\rangle$ هو التصحيح من الدرجة الأولى، و $\left|b\right\rangle$ هو التصحيح من الدرجة الثانية للدالة $\left|n^{(0)}\right\rangle$. وبالمثل، سنفترض هنا أن قيمة الطاقة المميزة غير المضطربة E قريبة جداً من الطاقة المميزة غير المضطربة $E_n^{(0)}$ بحيث نتمكن من وضعها بالشكل المتسلسل:

$$E = E_n^{(0)} + \in_1 + \in_2 + \dots \tag{6}$$

حيث $\in_1$ هو التصحيح من الدرجة الأولى و $\in_2$ هو التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة $E_n^{(0)}$. والسؤال الآن هو: كيف نوجد هذه التصحيحات (التعديلات)، وخصوصاً للطاقة؟ حيث إن الطاقة هي من الأوليات المطلوبة للفيزيائيين والكيميائيين. ولإعطاء أنفسنا دفعة قوية نحو إيجاد حل لهذه المعضلة، سنفترض وسيطاً صحيحاً (Integer parameter) هو λ. هذا الوسيط له قيمتان فقط وهما الصفر أو الواحد، وعند إعطاء هذا الوسيط قيمة صفرية ($\lambda = 0$) فإنه يلغي أي اضطراب، ومن ثم يلغي أي تعديل وعند إعطائه قيمة الواحد الصحيح ($\lambda = 1$) فإنه يظهر الاضطراب ومن ثم التعديل للرتب المختلفة، ويصبح الهملتونيان الكلي بالصورة:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \lambda \hat{H}' \tag{7}$$

المعادلتان (٥) و(٦) تكتبان بالشكل:

$$\left|\psi\right\rangle = \left|n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|a\right\rangle + \lambda^2\left|b\right\rangle + \dots \tag{8}$$

$$E = E_n^{(0)} + \lambda \in_1 + \lambda^2 \in_2 + \dots \tag{9}$$

ولنا هنا ملاحظتان:

١- عندما $\lambda = 0$ فإننا نحصل على القيم المميزة للدالة والطاقة غير المضطربة فقط، وعندما $\lambda = 1$ فإننا نحصل على جميع التصحيحات المضافة للقيم المميزة للدالة والطاقة.

٢- من المنطقي أن يظهر التصحيح من الدرجة الثانية باحتوائه مربع الوسيط λ^2 حيث نتوقع أن التصحيح من الدرجة الثانية (للدالة و الطاقة) سوف يحتوي على مربع $\hat{H}'$.

بالتعويض من المعادلات (٧-٩) بالمعادلة (٢) نجد:

$$\left(\hat{H}_o + \lambda \hat{H}'\right)\left(\left|n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|a\right\rangle + \lambda^2\left|b\right\rangle + \cdots\right) = \left(E_n^{(0)} + \lambda \in_1 + \lambda^2 \in_2 + \cdots\right)\left(\left|n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|a\right\rangle + \lambda^2\left|b\right\rangle + \cdots\right) \tag{10}$$

وهدفنا الآن هو أن يكون التصحيح من الدرجة الأولى يعتمد على $\hat{H}'$ والتصحيح من الدرجة الثانية يعتمد على $\hat{H}'^2$. وهذا يتأتى بمساواة معاملات الوسيط λ (لنفس الدرجة "equating the powers of λ") بطرفي المعادلة (١٠). دعونا نساوي المعاملات لأول ثلاث قوى للوسيط λ :

مساواة معاملات λ^0 تعطي:

$$\hat{H}_o\left|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{11}$$

وهي ببساطة معادلة شرودنجر للهملتونيان غير المضطرب، كما كتبت بمعادلة (٤).

ومساواة معاملات λ^1 تعطي:

$$\hat{H}_o\left|a\right\rangle + \hat{H}'\left|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|a\right\rangle + \in_1\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{12}$$

ومساواة معاملات λ^2 تعطي:

$$\hat{H}_o\left|b\right\rangle + \hat{H}'\left|a\right\rangle = E_n^{(0)}\left|b\right\rangle + \in_1\left|a\right\rangle + \in_2\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{13}$$

وسنتوقف هنا حيث إن التصحيح من الدرجة الثانية يعد كافياً لمعظم النظم الفيزيائية المهمة لنا في هذا المنهج المبسط.

كيفية حساب التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة:

باستخدام الضرب القياسي للمعادلة (١٢) من اليسار بالدالة $\left|n^{(0)}\right\rangle$ تصبح:

$$\left\langle n^{(0)}\right|\hat{H}_o\left|a\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\right|\hat{H}'\left|n^{(0)}\right\rangle = \left\langle n^{(0)}\right|E_n^{(0)}\left|a\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\right|\in_1\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{14}$$

وباستخدام خاصية الترافق للهملتونيان $\hat{H}$ ($\hat{H} = \hat{H}^\dagger$) نجد أن:

$$\left\langle n^{(0)}\right|\hat{H}_o\left|a\right\rangle = \left\langle n^{(0)}\right|\hat{H}_o^\dagger\left|a\right\rangle \tag{15}$$

$$\begin{aligned}\left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}_o^{\dagger}\right|a\right\rangle &= \left(\left\langle a\left|\hat{H}_o\right|n^{(0)}\right\rangle\right)^* \\ &= E_n^{(0)}{}^*\left(\left\langle a\middle|n^{(0)}\right\rangle\right)^* \\ &= E_n^{(0)}{}^*\left\langle n^{(0)}\middle|a\right\rangle\end{aligned} \tag{16}$$

وحيث إن القيمة المميزة $E_n^{(0)}$ هي قيمة حقيقية فإن $E_n^{(0)*} = E_n^{(0)}$ ، ومنها نستطيع أن نصل إلى المعادلة التالية:

$$\left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}_o\right|a\right\rangle = E_n^{(0)}\left\langle n^{(0)}\middle|a\right\rangle \tag{17}$$

بالإمكان أيضاً إخراج الطاقة من الأقواس بالطرف الأيمن للمعادلة (١٤)، حيث إنها ثوابت لنصل إلى:

$$E_n^{(0)}\left\langle n^{(0)}\middle|a\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left\langle n^{(0)}\middle|a\right\rangle + \in_1 \underbrace{\left\langle n^{(0)}\middle|n^{(0)}\right\rangle}_{=1} \tag{18}$$

وقد أخذنا في الاعتبار أن الدالة $\left\langle n^{(0)}\right|$ معيرة، لذا فإن التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة $\in_1$ يعطى بالمعادلة:

$$\boxed{\in_1 = \left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|n^{(0)}\right\rangle} \tag{19}$$

كيفية حساب التصحيح من الرتبة الثانية للطاقة $\in_2$

حيث إننا وجدنا طريقة ناجحة لإيجاد $\in_1$ فلنحاول بنفس الطريقة إيجاد $\in_2$.
باستخدام الضرب القياسي للمعادلة (١٣) من اليسار بالدالة $\left|n^{(0)}\right\rangle$ تصبح:

$$\left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}_o\right|b\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|a\right\rangle = \left\langle n^{(0)}\left|E_n^{(0)}\right|b\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\left|\in_1\right|a\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\left|\in_2\right|n^{(0)}\right\rangle \tag{20}$$

وبحساب الحدود الخمسة نجد:

$$E_n^{(0)}\left\langle n^{(0)}\middle|b\right\rangle + \left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|a\right\rangle = E_n^{(0)}\left\langle n^{(0)}\middle|b\right\rangle + \in_1\left\langle n^{(0)}\middle|a\right\rangle + \in_2\left\langle n^{(0)}\middle|n^{(0)}\right\rangle \tag{21}$$

ومن ثم فإن التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة $\in_2$ يُعطى بالمعادلة:

$$\in_2 = \left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|a\right\rangle - \in_1 \underbrace{\left\langle n^{(0)}\middle|a\right\rangle}_{=0} \tag{22}$$

وذلك بفرض أن الدالتين $\langle a|$ و $|n^{(0)}\rangle$ متعامدتان، ولهذا تؤول المعادلة (٢٢) إلى:

$$\in_2 = \langle n^{(0)}|\hat{H}'|a\rangle \tag{23}$$

لاحظ هنا أنه لحساب التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة نحتاج لمعرفة التصحيح من الدرجة الأولى للدالة، أي $|a\rangle$، فكيف نحسبها؟ بالنظر مرةً أخرى للمعادلة (١٢) وإعادة ترتيبها لنحصل على الآتي:

$$\hat{H}_o|a\rangle = E_n^{(0)}|a\rangle - \left(\hat{H}' - \in_1\right)|n^{(0)}\rangle \tag{24}$$

هذه معادلة تفاضلية للدالة $|a\rangle$ بالإمكان محاولة حلها لكل نظام بعينه. لكننا سوف نستخدم طريقة المتسلسلات، ونضع $|a\rangle$ بدلالة الدوال المميزة للهملتونيان $\hat{H}_o$، حيث إنها تكون فئة كاملة (Complete set)، ولذلك:

$$|a\rangle = \sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty} c_m |m^{(0)}\rangle \tag{25}$$

وهناك بعض الملاحظات على الصيغة (٢٥):

أ- الدوال $|m^{(0)}\rangle$ ما هي إلا الدوال المميزة للهملتونيان $\hat{H}_o$. ويجب أن نتذكر أن الدالة المميزة الكلية $|\psi\rangle$ قريبة جداً في الشكل من الدوال المميزة غير المضطربة $|n^{(0)}\rangle$.

ب- لم تُضف الدالة $|n^{(0)}\rangle$ بالمفكوك ($m \neq n$) حيث إننا افترضنا شرط التعامد $\langle n^{(0)}|m^{(0)}\rangle = 0$ ومن ثم فإنها لا تشارك في تكوين $|a\rangle$.

ج- المعاملات c_m ما هي إلا

$$c_m = \langle m^{(0)}|a\rangle \tag{26}$$

من ثم:

$$|a\rangle = \sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|a\rangle \tag{27}$$

باستخدام الضرب القياسي للمعادلة (٢٤) من اليسار بالدالة $\langle m^{(0)}|$ تصبح:

$$\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}_o\middle|a\right\rangle = \left\langle m^{(0)}\middle|E_n^{(0)}\middle|a\right\rangle - \left\langle m^{(0)}\middle|\left(\hat{H}' - \in_1\right)\middle|n^{(0)}\right\rangle \qquad \textbf{(28)}$$

$$E_m^{(0)}\left\langle m^{(0)}\middle|a\right\rangle = E_n^{(0)}\left\langle m^{(0)}\middle|a\right\rangle - \left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|n^{(0)}\right\rangle + \in_1 \underbrace{\left\langle m^{(0)}\middle|n^{(0)}\right\rangle}_{=0} \qquad \textbf{(29)}$$

ومن المعادلة (٢٩) نجد أن:

$$\left\langle m^{(0)}\middle|a\right\rangle = -\frac{\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \qquad \textbf{(30)}$$

أخيراً نستطيع أن نجمع نتائجنا بالتعويض من (٣٠) في (٢٣) لنحصل على التصحيح الأول للدالة بالشكل:

$$\boxed{\left|a\right\rangle = -\sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty}\left|m^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}} \qquad \textbf{(31)}$$

بالتعويض من (٣١) في (٢٣) نحصل على:

$$\in_2 = \left\langle n^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle| - \sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty}\left|m^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}\right\rangle$$

$$= -\sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\left\langle n^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|m^{(0)}\right\rangle\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

وأخيراً

$$\boxed{\in_2 = -\sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\left|\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}} \qquad \textbf{(32)}$$

وهذا هو التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة.

لاحظ هنا مايلي:

أ- المعادلة (٣٢) تحتوي على مربع الاضطراب $\hat{H}'$ كما افترضنا مسبقاً.

ب- التجميع في المعادلات (٣١) و(٣٢) يحتوي على عدد لانهائي من الحدود، ولكن عملياً، ونظراً لبعض الشروط، فإننا نأخذ في الاعتبار عدداً قليلاً من الحدود (وخصوصاً القريبة من بعضها البعض) للحصول على قيمة تقريبية للتصحيح.

ج- $E_m^{(0)}$ لا يمكن أن تتساوى مع $E_n^{(0)}$ وإلا فإن $\infty \to \in_2$، وقد وضع الشرط $m \neq n$ حتى نتجنب هذه الحالة.

في المستويات متعددة الانتماء (Degenerate states) لا نستطيع تجنب الشرط الثالث حيث نجد أنه لبعض المستويات $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$. لذلك فإن هذه الطريقة لا تصلح للمستويات متعددة الانتماء، وسنضطر للتعامل مع هذه الحالة بطريقة أخرى.

٢- اضطراب المستويات متعددة الانتماء

هي الحالة التي تكون فيها الطاقة المميزة للنظام لها أكثر من دالة مميزة، بمعنى أن المعادلة (١١) تؤول إلى:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_o \left| n_1^{(0)} \right\rangle &= E_n^{(0)} \left| n_1^{(0)} \right\rangle \\
\hat{H}_o \left| n_2^{(0)} \right\rangle &= E_n^{(0)} \left| n_2^{(0)} \right\rangle \\
&\vdots \\
\hat{H}_o \left| n_p^{(0)} \right\rangle &= E_n^{(0)} \left| n_p^{(0)} \right\rangle
\end{aligned} \tag{33}$$

ولإيجاد <u>التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة</u>❖ نجد أننا يجب أن نبحث عن حل معادلة المحدد العام:

$$\begin{vmatrix}
H_{11}-\in_1 & H_{12} & \cdots & H_{1p} \\
H_{21} & H_{22}-\in_1 & \cdots & H_{2p} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
H_{p1} & H_{p2} & \cdots & H_{pp}-\in_1
\end{vmatrix} = 0 \tag{34}$$

والذي يمكن وضعه بالصورة المدمجة:

$$\left| H_{ij} - \delta_{ij} \in_1 \right| = 0,$$

حيث عناصر المصفوفة H_{ij} تعرف كالتالي:

$$H_{ij} = \left\langle n_i^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| n_j^{(0)} \right\rangle \qquad (٣٥)$$

ونظراً لأهمية وصعوبة هذا الموضوع فإننا نوجه نظر القارئ إلى أننا أفردنا الملحق (**A.**١٣) لدراسة ظاهرة من أهم تطبيقات المستويات المتعددة الانتماء، وهي ظاهرة العالِم شتارك.

واجب منزلي: أثبت المعادلة (٣٤).

الحل: نفترض لكل منسوب n عدداً من المستويات $\left|n_i^{(0)}\right\rangle$ حيث $i = 1,2,\cdots,p$، من ثم فإن المعادلة(٣٣) يمكن وضعها بالصورة المبسطة:

$$\hat{H}_o \left|n_i^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|n_i^{(0)}\right\rangle, \qquad i = 1,2,\cdots,p$$

وباستخدام مفكوك الدوال:

$$\left|n^{(0)}\right\rangle = c_1\left|n_1^{(0)}\right\rangle + c_2\left|n_2^{(0)}\right\rangle + \cdots,$$
$$\left|a\right\rangle = a_1\left|n_1^{(0)}\right\rangle + a_2\left|n_2^{(0)}\right\rangle + \cdots,$$

بالمعادلة (١٢)، نحصل على:

$$\hat{H}_o\left[a_1\left|n_1^{(0)}\right\rangle + a_2\left|n_2^{(0)}\right\rangle + \cdots\right] + \hat{H}'\left[c_1\left|n_1^{(0)}\right\rangle + c_2\left|n_2^{(0)}\right\rangle + \cdots\right]$$
$$= E_n^{(0)}\left[a_1\left|n_1^{(0)}\right\rangle + a_2\left|n_2^{(0)}\right\rangle + \cdots\right] + \in_1\left[c_1\left|n_1^{(0)}\right\rangle + c_2\left|n_2^{(0)}\right\rangle + \cdots\right]$$

وبضرب المعادلة الأخيرة بالدوال:

$$\left\langle n_j^{(0)}\right|, \qquad j = 1,2,\cdots,p$$

بالترتيب، واستخدام خاصتي التعامد والعيارية للدوال المتعددة الانتماء بالصورة:

$$\left\langle n_j^{(0)} \middle| n_i^{(0)} \right\rangle = \delta_{ji}$$

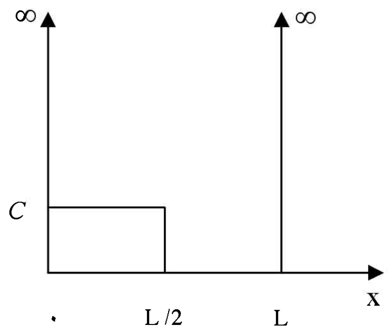
نحصل على المعادلات الآنية التالية:

$$\begin{aligned} c_1\left(H_{11} - \in_1\right) + c_2 H_{12} + \cdots + c_p H_{1p} &= 0 \\ c_1 H_{21} + c_2\left(H_{22} - \in_1\right) + \cdots + c_p H_{2p} &= 0 \\ &\vdots \\ c_1 H_{p1} + c_2 H_{p2} + \cdots + c_p\left(H_{pp} - \in_1\right) &= 0 \end{aligned}$$

ولإيجاد قيم c_p يجب أن يتحقق شرط المحدد المعرف بالمعادلة (٣٤)، وهو المطلوب إثباته.

٣- أمثلة محلولة

مثال: جسيم محصور في صندوق لانهائي الجهد ذي بعد واحد طوله L أثر عليه باضطراب معطي كالآتي:



$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} C & \text{for} \quad 0 \le x \le L/2 \\ 0 & \text{for} \quad L/2 < x < L \end{cases}$$

حيث $C << 1$ ثابت وله وحدات الجهد، كما هو موضح بالرسم.

أ- احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع للطاقة.

ب- احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي وعلق على الفرق بيانياً.

ج- احسب التصحيح من الدرجة الثانية المتوقع للطاقة.

وذلك بمعلومية أن الدوال والطاقة غير المضطربة تُعطى بالمعادلات:

$$\left|n^{(0)}\right\rangle = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(k_n x\right), \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$E_n^{(0)} = n^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right) = n^2 E_1^{(0)}, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

الحل:

أ- التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع للطاقة للمستوى الأرضي$(n = 1)$ يحسب من المعادلة:

$$\in_1 = \left\langle 1^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle = \left(\frac{2}{L}\right) C \int_0^{L/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx$$

$$= \left(\frac{2}{L}\right) C \left(\frac{L}{4}\right) = \frac{C}{2}$$

ب- التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي تحسب من المعادلة:

$$\left|a\right\rangle = -\sum_{\substack{m=0\\ m\neq n}}^{\infty}\left|m^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|n^{(0)}\right\rangle}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}} = -\sum_{m=2}^{\infty}\left|m^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle}{m^2E_1^{(0)}-E_1^{(0)}}$$

$$= -\left|2^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle 2^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle}{2^2E_1^{(0)}-E_1^{(0)}} - \left|3^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle 3^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle}{3^2E_1^{(0)}-E_1^{(0)}} - \left|4^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle 4^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle}{4^2E_1^{(0)}-E_1^{(0)}} - \cdots$$

نلاحظ هنا: أن التجميع لكل قيم m من $m=2$ إلى $m=\infty$. ومع زيادة قيمة m نجد أن المقام يزداد، ومن ثم قيم الحدود تقل تدريجياً. ولهذا السبب، كقيمة تقريبية، سوف نكتفي بالقيمة $m=2$ فقط ويصبح التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي هو:

$$\left|a\right\rangle \approx -\left|2^{(0)}\right\rangle \frac{\left\langle 2^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle}{2^2E_1^{(0)}-E_1^{(0)}}$$

وأخيراً لن يتبقى لنا غير إجراء التكامل، وهو:

$$\left\langle 2^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle = \frac{2C}{L}\int_0^{L/2}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

وباستخدام التعويض $y=\frac{\pi}{L}x$ و $dy=\frac{\pi}{L}dx$ فإن حدود التكامل تصبح $\{0,\pi/2\}$، ولذا:

$$\left\langle 2^{(0)}\left|\hat{H}'\right|1^{(0)}\right\rangle = \frac{2C}{\pi}\int_0^{\pi/2}\sin(2y)\sin(y)dy = \frac{2C}{\pi}\frac{2}{3}\sin^3 y\Big|_0^{\pi/2}$$

$$= \frac{4C}{3\pi},$$

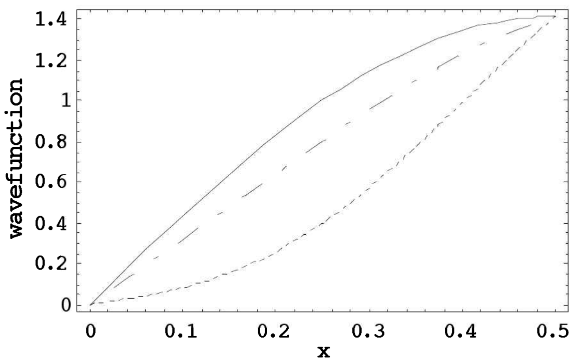
ومن ثم نجد:

$$\left|a\right\rangle = -\frac{\frac{4C}{3\pi}}{4E_1^{(0)}-E_1^{(0)}}\left|2^{(0)}\right\rangle = -\frac{4}{9}\frac{C}{\pi E_1^{(0)}}\left|2^{(0)}\right\rangle = -\frac{4}{9}\frac{C}{\pi E_1^{(0)}}\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

لرسم الدالة الكلية المضطربة $\left|\psi\right\rangle = \left|1^{(0)}\right\rangle + \left|a\right\rangle$ في المدى المعرف فيه الاضطراب فقط، وهو $\{0,L/2\}$ ومقارنتها بالدالة غير المضطربة:

$$\left|1^{(0)}\right\rangle=\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

تم وضع $\frac{C}{E_1^{(0)}}=1$ ، وهذا يعني أن الاضطراب C يتساوى مع الطاقة المميزة للمستوى الأرضي. للتبسيط بالرسم استخدمنا القيمة $L=1$. بالرسم التالي، المنحني ذو الخط المستمر يعبر عن الدالة غير المضطربة، والمنحني ذو الخط المتقطع يعبر عن الدالة المضطربة. والشكل يوضح جلياً مدى تأثير الاضطراب على الدالة، والرسم أيضاً يحتوي على الحالة $\frac{C}{E_1^{(0)}}=3$ (للخط المنقط) ومنها نجد أن الفرق بين الدالتين يزداد بزيادة النسبة $\frac{C}{E_1^{(0)}}$ ، وينعدم عندما تؤول هذه النسبة للصفر، كما هو متوقع.

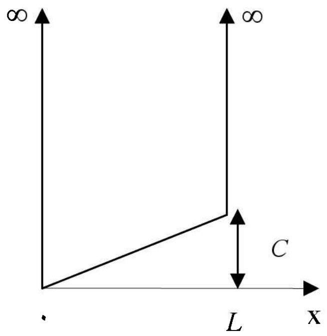


د- التصحيح من الدرجة الثانية المتوقع للطاقة للمستوى الأرضي($n=1$) يحسب من المعادلة:

$$\in_2=-\sum_{\substack{m=0\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\left|\left\langle m^{(0)}\right|\hat{H}'\left|n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\approx-\frac{\left|\left\langle 2^{(0)}\right|\hat{H}'\left|1^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}=-\frac{\left(\frac{4C}{3\pi}\right)^2}{4E_1^{(0)}-E_1^{(0)}}$$

$$=-\frac{16C^2}{27\pi^2E_1^{(0)}}$$

مثال: احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لطاقة المستوى الأرضي($n=1$) لجسيم بداخل جهد يُعطى كما بالشكل:



$$V(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ C(x/L) & 0\le x\le L\\ \infty & L<x\end{cases}$$

الحل: نعلم أن الحل الصفري العام للدالة المميزة و الطاقة المصاحبة لها لجسيم بداخل صندوق جهد بدون اضطراب هو:

$$\left|n^{(0)}\right\rangle=\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\left(k_n x\right),\qquad k_n=\frac{n\pi}{L}$$

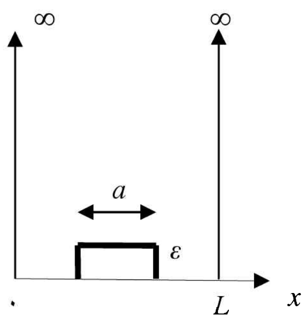
$$E_n^{(0)}=n^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)=n^2E_1^{(0)},\qquad n=1,2,\cdots$$

وباعتبار أن الاضطراب هو $\hat{H}'=C(x/L)$ ويؤثر في المدى ($0\le x\le L$) فقط، لذلك فإن التعديل الأول للطاقة هو:

$$\in_1=\left\langle 1^{(0)}\right|\hat{H}'\left|1^{(0)}\right\rangle=\left(\frac{2}{L}\right)\frac{C}{L}\int_0^L x\,\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx\quad=\left(\frac{2}{L}\right)\frac{C}{L}\left(\frac{L}{2}\right)^2=\frac{C}{2}$$

واجب منزلي: احسب وارسم التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي.

مثال: احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع للطاقة لجسيم بداخل جهد يُعطى بالشكل المرافق (مع اعتبار أن $\varepsilon<<1$ قيمة ثابتة):



$$V(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ 0 & 0<x<\frac{1}{2}(L-a)\\ \varepsilon & \frac{1}{2}(L-a)<x<\frac{1}{2}(L+a)\\ 0 & \frac{1}{2}(L+a)<x<L\\ \infty & L<x\end{cases}$$

الحل: نعلم أن دوال الموجة غير المضطربة تعطى بالشكل:

$$\left|n^{(0)}\right\rangle = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(k_n x\right), \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$E_n^{(0)} = n^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right) = n^2 E_1^{(0)}, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

باعتبـار أن الاضـطراب هـو $\hat{H}' = \varepsilon << 1$ ويـؤثر في المـدى ($\frac{1}{2}(L-a) < x < \frac{1}{2}(L+a)$) فقط، لذلك فإن التعديل الأول للطاقة هو:

$$\in_1 = \left\langle n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|n^{(0)}\right\rangle = \left(\frac{2}{L}\right)\varepsilon \int_{\frac{1}{2}(L-a)}^{\frac{1}{2}(L+a)} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$= \varepsilon\left\{\frac{a}{L} - (-1)^n \frac{1}{n\pi}\sin\left(\frac{n\pi a}{L}\right)\right\}$$

باستخدام القيم العددية $L = 1\ \mathrm{m}$ ، $a = 0.1\ \mathrm{m}$ و $\hbar = 1$ نجد أن التعديل الأول مقارنةً بطاقة المستويات الأولى، كما هو موضح بالجدول:

n	$E_n^{(0)}$	$\in_1$
1	9.8696	$0.1984\ \varepsilon$
2	39.4784	$0.0065\ \varepsilon$

نلاحظ هنا أن التعديل كبير نسبياً للمستوى الأول، حيث إن الاضطراب في منتصف الصندوق، والدالة المميزة للمستوى الأول تبلغ قيمتها العظمى بالمنتصف، ولهذا أصبح الاضطراب مؤثراً. والعكس هنا صحيح بالنسبة للمستوى الثاني، حيث إن دالتها المميزة تنعدم بمنتصف الصندوق.

واجب منزلي: احسب وارسم التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي.

مثال: احسب التصحيح الأولى لطاقة المستوى الأرضي ($n = 0$) للمتذبذب التوافقي الخطي إذا وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير يعرف بالعلاقة $\hat{H}' = a x^3 + b x^4$ ، حيث a و b ثوابت أقل كثيراً من الواحد الصحيح.

الحل: التصحيح الأولى لطاقة المستوى الأرضي للمتذبذب التوافقي الخطي تحسب بالمعادلة:

$$\in_1 = \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| n^{(0)} \right\rangle = \left\langle n^{(0)} \middle| ax^3 + bx^4 \middle| n^{(0)} \right\rangle$$
$$= \underbrace{a \left\langle n^{(0)} \middle| x^3 \middle| n^{(0)} \right\rangle}_{\in_{11}} + \underbrace{b \left\langle n^{(0)} \middle| x^4 \middle| n^{(0)} \right\rangle}_{\in_{12}}$$

وهنا سوف نستفيد من نتائج الباب الأول حيث إن التكامل:

$$\in_{11} = a \left\langle n \mid x^3 \mid n \right\rangle = 0,$$

ومن ثم فإن:

$$\in_1 = \in_{12} = b \left\langle n \mid x^4 \mid n \right\rangle = b \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left(6n^2 + 6n + 3\right) = 3b \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

مثال: اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور x بحيث إن $\hat{H}' = -qEx$. احسب التصحيح المتوقع.

الحل: باستخدام نتائج الباب الأول نجد أن المصفوفة:

$$\hat{H}^{(1)}_{mn} = -qE \langle m \mid x \mid n \rangle = -qE \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1}\, \delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\, \delta_{m,n-1} \right]$$

لها قيمة غير صفرية وذلك عند تحقق الشرط $m = n \pm 1$ فقط، ومن ثم فإن التصحيح الأول والذي يُعطىَ بالمعادلة:

$$\in_1 = \hat{H}'_{nn} = -qE \langle n \mid x \mid n \rangle$$

سوف ينعدم. وحيث إن التعديل الأول قد انعدم فإننا نلجأ لحساب التصحيح الثاني والذي يحسب كالتالي: (مع ملاحظة أن $E_{n\pm1} - E_n = \pm\hbar\omega$)

$$\in_2 = -\sum_{\substack{m=0\\m\neq n}}^{\infty} \frac{\left|\left\langle m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}} = -q^2E^2\sum_{\substack{m=0\\m\neq n}}^{\infty}\frac{\left|< m^{(0)}\,|\,x\,|\,n^{(0)}>\right|^2}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

$$= -q^2E^2\left\{\frac{|< n-1\,|\,x\,|\,n >|^2}{E_{n-1}-E_n}+\frac{|< n+1\,|\,x\,|\,n >|^2}{E_{n+1}-E_n}\right\}$$

$$= -q^2E^2\left\{\frac{\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{n}\right)^2}{-\hbar\omega}+\frac{\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{n+1}\right)^2}{\hbar\omega}\right\}$$

$$\therefore \in_2 = -q^2E^2\left\{\frac{1}{2m\omega^2}\left[(n+1)-n\right]\right\} = -\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

والتصحيح من الدرجة الأولى والمتوقع لدالة المستوى الأرضي يحسب من المعادلة (مع تحقق الشرط $m = n \pm 1$):

$$|a\rangle = -\sum_{\substack{m=0\\m\neq n}}^{\infty}\left|m^{(0)}\right\rangle\frac{\left\langle m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|n^{(0)}\right\rangle}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}} = qE\sum_{\substack{m=0\\m\neq n}}^{\infty}\left|m^{(0)}\right\rangle\frac{< m^{(0)}\,|\,x\,|\,n^{(0)} >}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

$$= qE\left\{|\,(n-1)^{(0)} > \frac{< (n-1)^{(0)}\,|\,x\,|\,n^{(0)} >}{E_{n-1}-E_n} + |\,(n+1)^{(0)} > \frac{< (n+1)^{(0)}\,|\,x\,|\,n^{(0)} >}{E_{n+1}-E_n}\right\}$$

$$= qE\left\{|\,(n-1)^{(0)} > \frac{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n}}{-\hbar\omega} + |\,(n+1)^{(0)} > \frac{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n+1}}{\hbar\omega}\right\}$$

$$= \frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{n+1}\,|\,(n+1)^{(0)} > -\sqrt{n}\,|\,(n-1)^{(0)} >\right\}$$

وتصبح الدالة الكلية بالشكل:

$$|\psi\rangle = \left|n^{(0)}\right\rangle + \frac{qE}{\omega}\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\left\{\sqrt{n+1}\,|\,(n+1)^{(0)} > -\sqrt{n}\,|\,(n-1)^{(0)} >\right\}$$

ملحوظة: للتأكد من صحة الحل $\in_2$ دعونا نقارنه بالحل الصحيح الذي يحسب كالتالي:

باستخدام التعويض $\hat{y} = \hat{x} - \frac{qE}{m\omega^2}$ يتحول الهملتونيان للمتذبذب التوافقي الخطي إلى الصورة المعدلة:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{y}^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

وله القيمة المميزة:

$$E_n = \left\langle n \,|\, \hat{H} \,|\, n \right\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) - \underbrace{\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}}_{\in_2}$$

والدالة المميزة:

$$\psi_n(y) = \psi_n(x - \frac{qE}{mw^2})$$

مثال: اعتبر الهملتونيان للمتذبذب الخطي في بعدين يُعطى بالمعادلة:

$$\hat{H}_o = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2\right) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \frac{1}{2\mu}\left(x^2 + y^2\right)$$

قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير هو:

$$\hat{H}' = C\hat{x}\hat{y} \qquad (C > 0)$$

احسب التصحيح المتوقع لهذا الاضطراب.

الحل: اعتبر الدالة الصفرية تعرف بالشكل $\left\langle nm \right| = \left\langle 1^{(0)} \right|$ والطاقة المقابلة لها تحسب من المعادلة $E_{nm}^{(0)} = (n+m+1)\hbar\omega$. سوف نعرف المؤثرات $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$ و $\hat{y} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left(\hat{b} + \hat{b}^\dagger\right)$. نظراً لأن هذه الحالة هي من الحالات المتعددة الانتماء فسوف نلجأ لحساب عناصر المصفوفة المربعة كالتالي:

$$W_{11} = W_{22} = \left\langle 1^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| 1^{(0)} \right\rangle = C\frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle 10\right|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)\left(\hat{b}+\hat{b}^\dagger\right)\left|10\right\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} W_{12} = W_{21} &= \left\langle 1^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| 2^{(0)} \right\rangle = C\frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle 10\right|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)\left(\hat{b}+\hat{b}^\dagger\right)\left|01\right\rangle \\ &= C\frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle 10\right|\left(\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b}^\dagger\right)\left|01\right\rangle \\ &= C\frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle 10\right|\left(\hat{a}^\dagger\hat{b}\right)\left|01\right\rangle = C\frac{\hbar}{2m\omega} \end{aligned}$$

لنجد جذور المحدد:

$$\begin{vmatrix} -\epsilon_1 & \dfrac{C\hbar}{2m\omega} \\ \dfrac{C\hbar}{2m\omega} & -\epsilon_1 \end{vmatrix} = 0$$

تعطي:

$$\epsilon_{1\pm} = \pm\frac{C\hbar}{2m\omega}$$

والدوال المميزة المقابلة لهذه الجذور هي:

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle \mp |10\rangle\right)$$

مثال: باستخدام النظرية النسبية الخاصة وجد أن المؤثر الهملتوني للمتذبذب الخطي يُعطى بالعلاقة:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - \frac{\hat{P}^4}{8m^3c^2}$$

استخدم طريقة الاضطراب لحساب التصحيح الأول للمستوى الأرضي للمتذبذب الخطي.

الحل: التصحيح الأول للمتذبذب الخطي يُعطى بالعلاقة:

$$\epsilon_1 = \langle 0|\hat{H}'|0\rangle, \qquad \hat{H}' = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$$

وبالإمكان كتابتها بالشكل المبسط:

$$\epsilon_1 = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle\psi|\psi\rangle, \qquad |\psi\rangle \equiv \hat{p}^2|0\rangle$$

وباستخدام الصيغة نجد $\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)$ $\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$ نجد أن:

$$|\psi\rangle \equiv \hat{p}^2|0\rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)^2|0\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)|1\rangle$$
$$= \frac{m\omega\hbar}{2}\left(|0\rangle - \sqrt{2}|2\rangle\right)$$

ومنها ينتج:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^2 (1+2) = \frac{3m^2\omega^2\hbar^2}{4}$$

من ثم فإن التصحيح الأول هو:

$$\in_1 = -\frac{1}{8m^3c^2}\left(\frac{3m^2\omega^2\hbar^2}{4}\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(-\frac{3\hbar\omega}{16mc^2}\right)$$

نرى من هذه الصيغة أن التصحيح الأول للمستوى الأرضي يعطى كحاصل ضرب طاقة المستوى الأرضي $\frac{1}{2}\hbar\omega$ بالنسبة $\left(-\frac{3\hbar\omega}{16mc^2}\right)$. النسبة $\left(\frac{\hbar\omega}{mc^2}\right)$ تعد بارامتر لتصحيح النظرية النسبية للمتذبذب، وهو معامل عديم الوحدات.

مثال: باستخدام النظرية النسبية الخاصة وجد أن المؤثر الهملتوني لذرة الهيدروجين (مع إهمال كمية الحركة للنواة) يُعطى بالعلاقة:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}' = -\frac{\hat{P}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{2m_ec^2}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m_e}\right)^2$$

استخدم طريقة الاضطراب لحساب التصحيح الأول للذرات الشبيهة بالهيدروجين.

الحل: لذرة الهيدروجين نستطيع أن نستخدم الهاملتونيان:

$$\hat{H}_o = -\frac{\hat{P}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} = E_n^{(0)}$$

لنضع:

$$-\frac{\hat{P}^2}{2m_e} = E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r}$$

حيث $E_n^{(0)} = -\frac{Z^2}{n^2}\,\mathrm{Ry}$ هي القيمة المميزة للمؤثر $\hat{H}_o$. لذلك فإن التصحيح الأول يحسب بالمعادلة:

$$\in_1 = \langle nlm'|\hat{H}'|nlm\rangle = -\frac{1}{2m_e c^2}\langle nlm'|\left(\frac{\hat{P}^2}{2m_e}\right)^2|nlm\rangle$$

$$= -\frac{1}{2m_e c^2}\langle nlm'|\left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r}\right)\left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r}\right)|nlm\rangle;$$

وباستخدام التعويض عن المؤثرات:

$$\left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r}\right)\left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r}\right) = E_n^{(0)2} + E_n^{(0)}\frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{r}E_n^{(0)} + \left(\frac{Ze^2}{r}\right)^2$$

نجد أن التصحيح الأول يتكون من أربعة حدود، وهي:

$$\in_1 = -\frac{1}{2m_e c^2}[\langle nlm'|E_n^{(0)2}|nlm\rangle + (Ze^2\langle nlm'|E_n^{(0)}\frac{1}{r}|nlm\rangle$$

$$+\langle nlm'|\frac{1}{r}E_n^{(0)}|nlm\rangle) + \left(Ze^2\right)^2\langle nlm'|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle]$$

والآن بالنظر لكل حد على حدة نجد أن الحد الأول يُعطي:

$$\langle nlm'|E_n^{(0)2}|nlm\rangle = \left(E_n^{(0)}\right)^2 \delta_{m'm}$$

الحدان الثاني والثالث يَعطيان:

$$\langle nlm'|E_n^{(0)}\frac{1}{r}|nlm\rangle = \langle nlm'|\frac{1}{r}E_n^{(0)}|nlm\rangle = E_n^{(0)}\langle nl|\frac{1}{r}|nl\rangle\delta_{m'm}$$

والحد الرابع يُعطي:

$$.\langle nlm'|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle = \langle nl|\frac{1}{r^2}|nl\rangle\delta_{m'm}$$

لنصل إلى النتيجة النهائية، وهي:

$$\in_1 = -\frac{\left(E_n^{(0)}\right)^2}{2m_e c^2} - \frac{Ze^2}{m_e c^2}E_n^{(0)}\langle nl|\frac{1}{r}|nl\rangle - \frac{\left(Ze^2\right)^2}{2m_e c^2}\langle nl|\frac{1}{r^2}|nl\rangle$$

وبالنسبة للذرات الشبيهة بالهيدروجين نعلم (راجع الباب السادس) أن:

$$\langle nl|\frac{1}{r}|nl\rangle = \frac{Z}{a_o}\frac{1}{n^2}\ \text{Ry}, \qquad \langle nl|\frac{1}{r^2}|nl\rangle = \left(\frac{Z}{a_o}\right)^2\frac{1}{n^3(l+\frac{1}{2})}\ \text{Ry}$$

ولهذا فإن:

$$\boxed{\in_1 = E_n^{(0)} Z^2 \alpha^2 [\frac{3}{4n^2} + \frac{1}{n(l+\frac{1}{2})}]\ \text{Ry}}$$

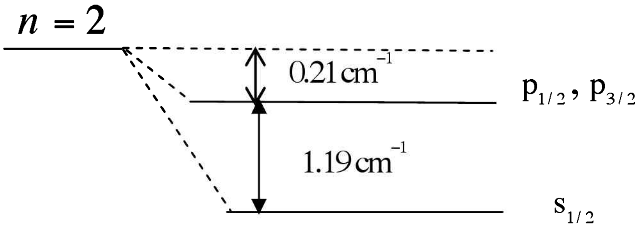
حيث استخدمنا ثابت التركيب الدقيق $\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c}$ (fine structure constant)، انظر الملحق (**A**). وبوحدات هارتري نجد أن:

$$\in_1 = \frac{Z^4}{2n^3} \alpha^2 [\frac{3}{4n} + \frac{1}{(l+\frac{1}{2})}]\ \text{Hartree}$$

نلاحظ هنا أن التصحيح $\in_1$ يزداد بزيادة العدد الذري Z ولذلك فهو ذو أهمية خاصة للذرات ذات الشحنات العالية. ويطبق التصحيح لجميع قيم $l = 0, 1, \cdots$.

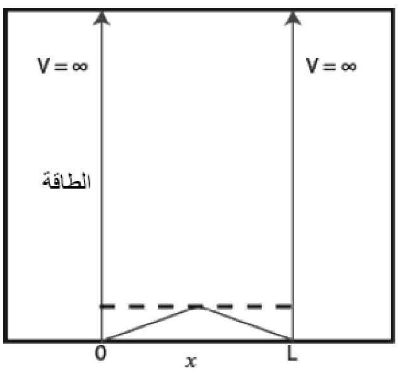
مثال: ادرس تأثير التصحيح الأول للنظرية النسبية الخاصة على المستوى $n = 2$ لذرة الهيدروجين. ملاحظة: الملحق (**A**) يُعطى العلاقة $1\ \text{Hartree} = 2.195\times10^5 \text{cm}^{-1}$.

الحل: نعلم أن المستوى $n = 2$ يتكون من مستويين فرعيين، وهما $\text{s} \equiv (l = 0)$ و $\text{p} \equiv (l = 1)$ ، ولهذا نجد أن الانقسام يحدث بالشكل التالي:



٤- تمارين عامة

١- جسيم محصور في صندوق لانهائي الجهد، ذو بعد واحد طوله L أُثر عليه باضطراب بشكل مثلث (كما هو موضح بالشكل المرافق) مُعطى كالآتي:



$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} Ax & 0 \le x \le \frac{L}{2} \\ A(L-x) & \frac{L}{2} \le x \le L \end{cases}$$

حيث A ثابت و $A << 1$.

للمستوى الأرضي $(n=1)$ تأكد من النتائج التالية:

أ- $\in_1 = \frac{AL(4+\pi^2)}{4\pi^2}$.

ب-
$$\left\langle m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| 1^{(0)} \right\rangle = -\frac{AL}{\pi^2} \quad \text{if} \quad m = \text{odd}$$
$$= 0 \quad \text{if} \quad m = \text{even}$$

من ثم للقيمة $m=3$

$$|a\rangle = -\frac{-\frac{AL}{\pi^2}}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} \left|3^{(0)}\right\rangle$$
$$= \frac{AL}{8\pi^2 E_1^{(0)}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{3\pi}{L}x)$$

ج-
$$\varepsilon_2 = -\frac{\left(-\frac{AL}{\pi^2}\right)^2}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} = -\frac{A^2L^2}{8\pi^4 E_1^{(0)}}$$

البرنامج التالي يستخدم ماثيماتيكا لحساب التصحيح من الدرجة الأولى والثانية للتمرين ١.

$$\Psi[n\_, x\_] = \sqrt{\frac{2}{L}}\ \mathrm{Sin}\left[\frac{n\pi}{L}x\right];$$
$$\mathrm{H1l} = A\,x;\ \ \mathrm{H1r} = A\,(L-x);$$
$$\epsilon 1 = \int_0^{L/2} \mathrm{H1l}\ \Psi[1,x]^2\, dx + \int_{L/2}^{L} \mathrm{H1r}\ \Psi[1,x]^2\, dx \ //\mathrm{Simplify}$$
$$A\,L\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2}\right)$$
$$m = 3;$$
$$\epsilon 2 = -\frac{\left(\int_0^{L/2} \mathrm{H1l}\ \Psi[1,x]\,\Psi[m,x]\,dx + \int_{L/2}^{L} \mathrm{H1r}\ \Psi[1,x]\ \Psi[m,x]\,dx\right)^2}{(m^2-1)\ \mathrm{E0}}$$
$$-\frac{A^2\,L^2}{8\ \mathrm{E0}\ \pi^4}$$

في التمارين الآتية اعتبر أنه في حالة أن الجسيم المحصور في صندوق لانهائي الجهد ذو بعد واحد طوله $2L$ يُعطى بالشكل:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad -L \le x \le +L \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

وإن الدوال الموجية غير المضطربة تعطي بالشكل:

$$\psi(x) = \left| n^{(0)} \right\rangle = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{L}} \sin(\dfrac{n\pi}{2L} x) & \text{for} \quad n = \text{even integer} \\ \dfrac{1}{\sqrt{L}} \cos(\dfrac{n\pi}{2L} x) & \text{for} \quad n = \text{odd integer} \end{cases}$$

والطاقة المميزة لها هي: $E_n^{(0)} = n^2 \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2L)^2} = n^2 E_1^{(0)}$

٢- جسيم محصور في صندوق لانهائي الجهد ذو بعد واحد طوله $2L$ أُثر عليه بالاضطراب:

$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} A \sin(\dfrac{\pi \text{x}}{2\text{L}}) & \text{for} \quad -L \le x \le L \\ 0 & \text{for} \quad L < x < -L \end{cases}$$

حيث A ثابت و $A << 1$. للمستوى الأرضي $(n = 1)$ تأكد من النتائج التالية:

أ- $\in_1 = 0$.

ب- $|a\rangle = \dfrac{A/2}{1^2 E_1^{(0)} - 2^2 E_1^{(0)}} \left| 2^{(0)} \right\rangle$

ج- $\varepsilon_2 = \dfrac{(A/2)^2}{1^2 E_1^{(0)} - 2^2 E_1^{(0)}} = -\dfrac{A^2}{12 E_1^{(0)}}$

٣- جسيم محصور في صندوق لانهائي الجهد عرضه L أُثر عليه باضطراب بالمركز مُعطى كالآتي:

$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} A\delta(x - \dfrac{L}{2}) & \text{for} \quad 0 \le x \le L \\ 0 & \text{for} \quad L < x < 0 \end{cases}$$

حيث A ثابت و $A << 1$. للمستوى الأرضي $(n = 1)$ تأكد من النتائج التالية:

أ-

$$\in_1 = \left\langle 1^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| 1^{(0)} \right\rangle = \frac{2A}{L} \int_{-L}^{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \delta(x - \frac{L}{2}) dx$$

$$= \frac{2A}{L} \sin^2\left(\frac{\pi}{L}\frac{L}{2}\right) = \frac{2A}{L}$$

ب-

$$\left\langle m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| 1^{(0)} \right\rangle = \begin{cases} \frac{2A}{L} & \text{if} \quad m = \text{odd} \\ 0 & \text{if} \quad m = \text{even} \end{cases}$$

من ثم للقيمة $m = 3$

$$|a\rangle = -\frac{\frac{2A}{L}}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} \left|3^{(0)}\right\rangle$$

ج-

$$\varepsilon_2 = -\frac{(2A / L)^2}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} = -\frac{A^2}{2L^2 E_1^{(0)}}$$

ملحق (14.A)

ذرة الهيليوم باستخدام طريقة الاضطراب

لقد تم سابقاً حساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهليوم باستخدام طريقة التغاير بالملحق (A.١٣). وفي هذا الملحق سوف نقوم بحساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهليوم باستخدام نظرية الاضطراب. كما لاحظنا سابقاً فإن الهملتونيان لذرة الهليوم (باستخدام الوحدات الذرية واعتبار أن النواة ساكنة) يكتب بالصورة:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = \hat{H}_o + \hat{H}'$$

حيث $Z = 2$ لذرة الهليوم والهملتونيان غير المضطرب هو:

$$\hat{H}_o = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2}$$

والهملتونيان $\hat{H}' = \frac{1}{r_{12}}$ المسؤول عن الاضطراب هو الجهد الكولومي لتفاعل الإلكترون الأول مع الإلكترون الثاني. والدالة المميزة غير المضطربة $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$، مع إهمال الدوران المغزلي، هي حل معادلة شرودنجر غير الزمنية $\hat{H}_o\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ وتأخذ الشكل:

$$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = \psi_{1s}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)$$

حيث $\psi_{1s}(r_i) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}}e^{-Zr_i}$ هي الدالة المميزة لإلكترون ذرة الهيدروجين بالمستوى الأرضي. ونحن نعلم أيضاً من دراستنا السابقة (راجع الباب السابع) أن معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين (بالوحدات الذرية) تأخذ الشكل:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1}\right)\psi_{1s}(r) = -\frac{Z^2}{2}\psi_{1s}(r)$$

من ثم فإن

$$E_1^{(0)} = -\frac{Z^2}{2} - \frac{Z^2}{2} = -Z^2 \text{ Hartree}$$

والتصحيح من الدرجة الأولى للطاقة في $\in_1$ يُحسب بالمعادلة (انظر الملحق C):

$$\in_1 = \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| n^{(0)} \right\rangle = \frac{Z^6}{\pi^2} \int\int e^{-Z(r_1+r_2)} \frac{1}{r_{12}} e^{-Z(r_1+r_2)} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2$$

$$= \frac{Z^6}{\pi^2} \int\int \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2$$

$$= \frac{5}{8} Z \ \ \text{Hartree}$$

ومن ثم فإن طاقة أدنى مستوى لذرة الهليوم للمرتبة الأولى تكون:

$$E = E_1^{(0)} + \in_1 = -Z^2 + \frac{5}{8} Z$$

$$= -\frac{11}{4} = -2.750 \ \ \text{Hartree.}$$

وهي قيمةً تقل 5% عن القيمة العملية -2.9033 Hartree.

ونلاحظ هنا التالي:

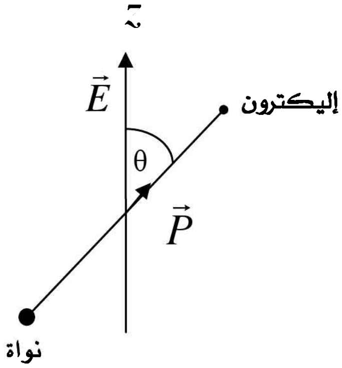
أ- إن طريقة الاضطراب أعطت قيمة قريبة من القيمة العملية بالرغم من الصيغة المبسطة للدالة المقترحة. باستخدام التصحيحات من الدرجات الأعلى نستطيع الحصول على قيمة قريبةٍ جداً من القيمة العملية، ولكن مع الكثير من التعقيدات الرياضية (انظر الجدول التالي).

طاقة المستوى الأرضي	الطريقة
-4.00 H	إهمال الحد $\hat{H}'$
-2.750 H	التصحيح من الدرجة الأولى
-2.910 H	التصحيح من الدرجة الثانية
-2.90372433 H	التصحيح من الدرجة الثالثة عشرة

ب- بالرغم من أن الاختلافات في حساب الطاقة للمستوى الأرضي تعد مقبولةً ولكن هذا الاختلاف البسيط يعد كبيراً بالنسبة إلى قيمة شدة الروابط الكيميائية. ولذلك يلجأ إلى طرق أخرى تعتمد على الحسابات العددية باستخدام الكمبيوتر.

ملحق (14.B)

ظاهرة شتارك الخطية



دُرست هذه الظاهرة بواسطة العالم شتارك في عام ١٩١٣، حيث تمت ملاحظة انقسام المستويات الأولية للذرات الشبيهة بالهيدروجين نتيجة تأثير مجال كهربي $\vec{E}$ خارجي ثابت وصغير (باتجاه المحور z فرضاً) مع إهمال الدوران المغزلي للإلكترون. وتعرف طاقة التفاعل (بين المجال الكهربي والذرة) المسئولة عن الاضطراب بالمؤثر:

$$\hat{H}' = \vec{P}.\vec{E} = e\vec{r}.\vec{E} = e|E|r\cos\theta$$

حيث $\vec{P} = e\,\vec{r}$ هو عزم ثنائي القطب الكهربي (electric dipole moment)، $\vec{r}$ هي المسافة بين نواة الذرة (التي لها العدد الذري Z) والإلكترون، e هي شحنة الإلكترون وθ هي الزاوية المحصورة بين المتجهين $\vec{E}$ و $\vec{P}$. من المهم الأخذ في الاعتبار أن $\hat{H}'$ لا يعتمد على الدوران المغزلي للإلكترون وخصوصاً للسرعات غير النسبية.

ويأخذ الهملتونيان الكلي للإلكترون الصورة:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + e|E|r\cos\theta$$

حيث m_e هي كتلة الإلكترون. وسوف نتعامل هنا مع دالة شرودنجر المميزة للذرات الشبيهة لذرة الهيدروجين في الإحداثيات الكروية بالصورة:

$$\Psi \equiv \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) = |n,l,m_l\rangle$$

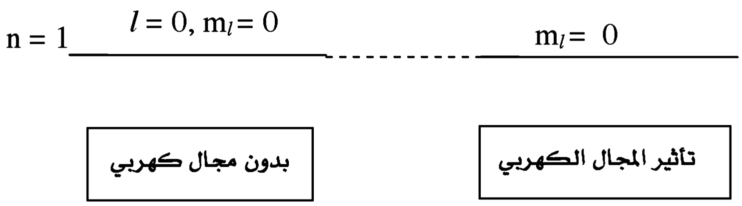
1- بالنسبة للمستوى الأرضي ($n=1$) نجد أن $l=0$ و $m_l=0$ ويعبر عنه بالدالة:

$$\psi_{1s}(r,\theta,\varphi) \equiv |n,l,m_l\rangle \equiv |1,0,0\rangle = R_{10}Y_{00}(\theta,\varphi) = 2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

وحيث إن التعددية (multiplicity) تساوي الوحدة ($d_l = 2l + 1 = 1$) لذلك فإن هذا المستوى منفرد (لا ينقسم) (وذلك بإهمال الحركة المغزلية). ولأن الدالة المميزة هي دالة زوجية، ومن ثم فإن التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة $\in_1$ يؤول للصفر تبعاً للمعادلة:

$$\begin{aligned}
\in_1 &= \langle i | \hat{H}' | i \rangle = e |E| \langle 1,0,0 | r \cos\theta | 1,0,0 \rangle \\
&= e |E| \int \psi^*_{1s} r \cos\theta \psi_{1s} d\tau \\
&= e |E| \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*_{1s} r \cos\theta \psi_{1s} r^2 \sin\theta dr\, d\theta d\varphi = 0
\end{aligned}$$

وقد استخدمنا بالتكامل عنصر الحجم ($d\tau = r^2 \sin\theta dr\, d\theta d\varphi$) بالإحداثيات الكروية. القيمة $\in_1 = 0$ معناها أن طاقة المستوى الأرضي لن تتأثر بالاضطراب (المجال الكهربي الخارجي) ومن ثم لن يظهر أي تصحيح (انقسام للمستوى) من الدرجة الأولى، انظر الشكل ٤،١.



شكل ٤،١ : عدم تأثر (انقسام) المستوى الأول ($n = 1$) لذرة الهيدروجين نتيجة لظاهرة شتارك الخطية.

وحيث إن التصحيح من الدرجة الأولى $\in_1$ قد انعدم فيجب أن نلجأ للتصحيح من الدرجة الثانية $\in_2$. وسوف يترك هذا التصحيح كواجب منزلي بنهاية الملحق.

II- للمستوى المثار الأول ($n = 2$) نجد أن $l = 0,1$ ، من ثم فإن التعددية تُعطي العدد $1 + 3 = 4$. لذلك فإن المستوى المثار الأول هو مستوى رباعي الطي (fourthfold degenerate)، و دواله الأربع المميزة هي (وللتبسيط فقط سوف نستعمل الدالة بالشكل $|l, m_l\rangle$ بدون العدد الكمي $n = 2$):

$$\left|2_1^{(0)}\right\rangle = \left|0,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}(1-\frac{Zr}{2a_o})e^{-Zr/2a_o}$$

$$\left|2_2^{(0)}\right\rangle = \left|1,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a_o}\cos\theta$$

$$\left|2_3^{(0)}\right\rangle = \left|1,-1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{64\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a_o}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$$

$$\left|2_4^{(0)}\right\rangle = \left|1,1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{64\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a_o}\sin\theta\, e^{i\varphi}$$

من ثم فإن المحدد العام سيحتوي على ١٦ تكاملاً! كما هو واضح بالمصفوفة التالية:

$$\begin{array}{c|cccc|l}
 & \left|0,0\right\rangle & \left|1,0\right\rangle & \left|1,-1\right\rangle & \left|1,1\right\rangle & \\
\left\langle 0,0\right| & H_{11}-\in_1 & H_{12} & H_{13} & H_{14} & \\
\left\langle 1,0\right| & H_{21} & H_{22}-\in_1 & H_{23} & H_{24} & =0 \\
\left\langle 1,-1\right| & H_{31} & H_{32} & H_{33}-\in_1 & H_{34} & \\
\left\langle 1,1\right| & H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44}-\in_1 &
\end{array}$$

حيث عناصر المصفوفة H_{ij} تعرف كالتالي:

$$H_{ij} = \left\langle 2_i^{(0)}\right|\hat{H}'\left|2_j^{(0)}\right\rangle$$

ولكن لا داعي للجزع، لأنه بنظرة متأنية لخواص الدوال المميزة للمستوى المثار الأول ($n=2$) نجد أن ١٤ من هذه التكاملات تؤول للصفر! كيف؟

دعونا نستعرض أولاً التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة $\in_1$ بالصورة:

$$H_{ik} = \left\langle i\right|\hat{H}'\left|k\right\rangle = e\left|\boldsymbol{E}\right|\left\langle r,\theta,\varphi\right|r\cos\theta\left|r,\theta,\varphi\right\rangle = e\left|\boldsymbol{E}\right|I_r I_\theta I_\varphi$$

والذي له الخواص التالية:

أ- التكامل للزاوية φ يعطي:

$$I_\varphi = \int_0^{\varphi} e^{-im\varphi}e^{ik\varphi}d\varphi = 2\pi\delta_{mk} = 2\pi\times\begin{cases}0 & \text{if } m\neq k\\ 1 & \text{if } m=k\end{cases}$$

ومنه نجد أن التكاملات الآتية تتساوى بالصفر:

$$H_{13}=H_{31}=H_{14}=H_{41}=H_{23}=H_{32}=H_{24}=H_{42}=H_{34}=H_{43}=0$$

ب- وعندما $m=m'$ و $l=l'$ نجد أن التكامل للزاوية θ يعطي:

$$I_\theta=\int_0^\pi P_{lm}(\cos\theta)\cos\theta P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta$$

وباستخدام التعويض $x=\cos\theta$ نجد أن:

$$I_\theta=\int_{-1}^{1}\left|P_{lm}\right|^2 x\,dx\ =0$$

حيث إن $\left|P_{lm}(x)\right|^2$ هي دالة زوجية للمتغير x. ومنه نجد أن التكاملات الآتية تتساوى بالصفر:

$$H_{11}=H_{22}=H_{33}=H_{44}=0$$

ويصبح المحدد العام بالصورة:

$$\begin{array}{c|cccc|}
 & |0,0\rangle & |1,0\rangle & |1,-1\rangle & |1,1\rangle \\
\langle 0,0| & -\in_1 & H_{12} & 0 & 0 \\
\langle 1,0| & H_{21} & -\in_1 & 0 & 0 \\
\langle 1,-1| & 0 & 0 & -\in_1 & 0 \\
\langle 1,1| & 0 & 0 & 0 & -\in_1
\end{array}=0$$

والقيم المميزة هي:

$$\in_1=0,0,\pm\left|H_{12}\right|$$

حيث:

$$H_{12}=H_{21}=\langle 1,0|\hat{H}'|0,0\rangle=e\,|E|\langle 1,0|r\cos\theta|0,0\rangle$$

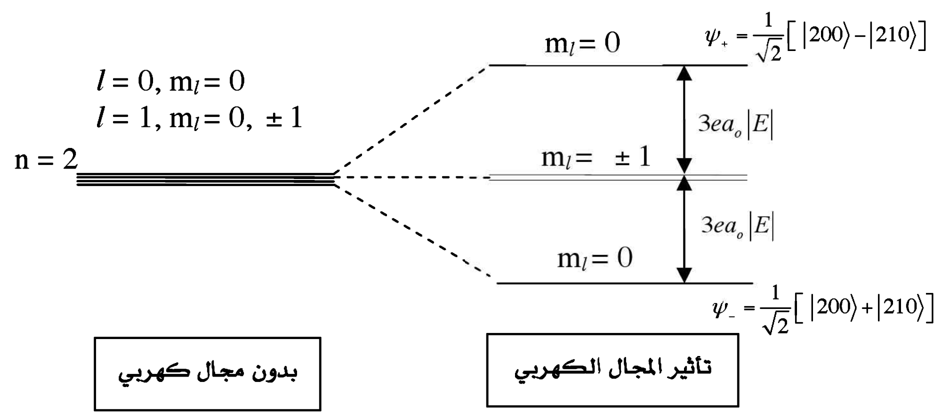
$$=\frac{e|E|Z^3}{16\pi a_o^3}\underbrace{\int_0^\infty dr\,r^3\left(\frac{Zr}{a_o}\right)\left(1-\frac{Zr}{2a_o}\right)e^{-Zr/a_o}}_{-\frac{36a_o^4}{Z^4}}\underbrace{\int_0^\pi \sin\theta\cos^2\theta d\theta}_{2/3}\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi}$$

$$=-3a_o e|E|/Z$$

ومن ثم فإن التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة $\in_1$ (وهو حل معادلة المحدد العام) يأخذ القيم:

$$\in_1 = 0, 0, \pm 3a_o e\left|E\right|/Z$$

وهذا معناه ببساطة أن المجال الكهربي الخارجي قد أزال "جزئياً" بعضاً من صفة الانتماء للمستوى المثار الأول (انظر الشكل ٢). من الشكل ٢ نجد أن الانقسام قد تم للدوال التي لها قيم l مختلفة ($l = 0$ و$l = 1$) ومتساويان في القيمة ($m_l = 0$). المستويات للقيم $l = 1$ و ($m_l = \pm 1$) تظل ثنائية الطي (أي لاتنقسم).



شكل 2 : انقسام المستوى المثار الأول ($n = 2$) لذرة الهيدروجين نتيجة لظاهرة شتارك الخطية.

ولإيجاد الدوال المميزة، يتوجب علينا الرجوع إلى المعادلة:

$$\begin{pmatrix} -\in_1 & H_{12} \\ H_{12} & -\in_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

وباستخدام القيمة $\in_1 = -3a_o e|E|$ نجد أن $c_1 = c_2$ والدالة المميزة المعيرة والمقابلة لها هي:

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|200\rangle + |210\rangle\right]$$

و القيمة الثانية $\in_1 = 3a_o e|E|$ تُعطي $c_1 = -c_2$ والدالة المميزة المعيرة والمقابلة لها هي:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|200\rangle - |210\rangle\right]$$

ملاحظات:

١- ظاهرة شتارك الخطية تعتمد أساساً على انقسام المستويات المختلفة نتيجة تأثير المجال الكهربي الخارجي. هذا الانقسام ناتج من الصفة الخاصة للجهد الكولومي، ومن ثم، فهو يطبق فقط على ذرة الهيدروجين.

٢- الانقسام ليس انقساماً كاملاً لجميع قيم الأعداد الكمية l و m_l ولكنهُ انقسام جزئي متماثل. ويظل المستوى $(m_l = \pm 1)$ ثنائي الطي، انظر الشكل ٤،٢.

٣- المستويات المنقسمة لن تصبح دوال ذاتية للمؤثر $\hat{L}^2$ ولكنها مازالت دوال ذاتية للمؤثر $\hat{L}_z$. وهذا معناه أن الاضطراب البسيط قد غير من شكل الهملتونيان، بحيث أصبح غير متلازم مع $\hat{L}^2$ وهذا ناتج من أن المجال الكهربي يأخذ اتجاهاً معيناً (اتجاه المحور z فرضاً) ومن ثم فإن النظام لن يصبح متماثلاً مع أي دوران اختياري، ولكن سيظل متماثلاً مع الدوران حول المحور z فقط، ومن ثم ستظل $\hat{L}_z$ متلازمة مع الهملتونيان الكلي.

واجب منزلي: أثبت أن:

$$\hat{L}^2\psi_{\pm} \neq \lambda\psi_{\pm}, \quad \hat{L}_z\psi_{\pm} = m_l\psi_{\pm}, \quad \left[\hat{L}^2, \hat{H}\right] \neq 0, \quad \left[\hat{L}_z, \hat{H}\right] = 0$$

٤- تطابقت النتائج النظرية التي تم الحصول عليها بناء على أساس التقريب الخطي بشكل جيد مع نتائج التجارب المعملية في المجالات الكهربائية الضعيفة فقط $(|E| << 10^4 \text{ V/cm})$ وعندما يبلغ المجال الكهربي القيمة $(|E| \approx 10^5 \text{ V/cm})$ يظهر انقسام إضافي. لا يلاحظ مفعول شتارك في المجالات التي تزيد عن (10^5 V/cm) وهذا ناتج من تأين الذرات (بمعنى انفصال الإلكترون عن الذرة).

واجب منزلي: ناقش وارسم المستويات (وبدون حل التكاملات) لتطبيق ظاهرة شتارك من الدرجة الأولى للمستوى $(n = 3)$.

واجب منزلي: أثبت أنه لا يوجد تصحيح من الدرجة الأولى $\in_1$ لظاهرة شتارك للمستوى $(n=1)$ لذرة الهيدروجين.

مثال: احسب التصحيح من الدرجة الثانية $\in_2$ لظاهرة شتارك للمستوى $(n=1)$ لذرة الهيدروجين.

الحل: نبدأ بتعريف التصحيح من الدرجة الثانية كالتالي:

$$\in_2 = e^2 |\boldsymbol{E}|^2 \sum_{nlm \neq 1,0,0} \frac{\left|\langle n,l,m|r\cos\theta|1,0,0\rangle\right|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

حيث ($d\tau = r^2 dr d\Omega$). والبسط يُحسب كالتالي:

$$\langle n,l,m|r\cos\theta|1,0,0\rangle = \int R_{nl}^* Y_{lm}^* (r\cos\theta) R_{10} Y_{00} d\tau$$

وباستخدام العلاقة:

$$Y_{00}\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}$$

نجد أن

$$\langle n,l,m|r\cos\theta|1,0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \underbrace{\int_0^\infty r^3 dr\, R_{nl}^* R_{10}}_{a_o\sqrt{\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}}} \underbrace{\int Y_{lm}^* Y_{10} d\Omega}_{\delta_{l,1}\delta_{m,0}}$$

ويأخذ البسط الشكل:

$$\left|\langle n,l,m|r\cos\theta|1,0,0\rangle\right|^2 = \frac{1}{3}\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} a_o^2$$
$$\equiv f(n) a_o^2$$

ويصبح التصحيح من الدرجة الثانية بالشكل:

$$\in_2 = e^2 |\boldsymbol{E}|^2 \sum_{n=2} \frac{f(n) a_o^2}{-\dfrac{e^2}{2a_o} + \dfrac{e^2}{2a_o n^2}} = -2a_o^3 |\boldsymbol{E}|^2 \sum_{n=2} \frac{f(n) n^2}{n^2 - 1}$$

$$= -2a_o^3 |\boldsymbol{E}|^2 (0.74 + 0.10 + \cdots)$$

$$\approx -2(0.91) a_o^3 |\boldsymbol{E}|^2$$

من ثم فإن عزم ثنائي القطب الكهربي المستحث (Induced electric dipole moment) نتيجة المجال الكهربي الخارجي يحسب من العلاقة:

$$d = -\frac{\partial \in_2}{\partial |\boldsymbol{E}|} = 4(0.91) a_o^3 |\boldsymbol{E}| = \alpha |\boldsymbol{E}|$$

حيث α هنا تعرف بالاستقطابية (قابلية الاستقطاب) (Polarizability)

الباب الخامس عشر

التقريب شبه التقليدي (WKB)

Semi-classical approximation (WKB)

الباب الخامس عشر
التقريب شبه التقليدي (WKB)

التقريب شبه التقليدي (WKB)، ينسب إلى العلماء Wentzel, Kramers و Brillouin ، وتطبيقاته متعددة في الفيزياء والرياضيات. بالرغم من أن بعض تقنياته قد ظهر في بداية القرن التاسع عشر، لكن تطويره لم يتم إلا بظهور نظرية ميكانيكا الكم، حيث يستخدم التقريب بنجاح في الحصول على حلول تقريبية شاملة للمعادلات التفاضلية الاعتيادية.

ويتميز التقريب شبه التقليدي بالصفات التالية:

١- يظهر أهميته عندما يستخدم معامل صغير القيمة، مثل ε ، كدليل لأعلى مشتقة بالمعادلة التفاضلية. في ميكانيكا الكم هذا المعامل الصغير ε يستعاض عنه بالثابت $\hbar$ والذي يُعرَف بثابت بلانك.

٢- حينما يطبق التقريب بمسائل ميكانيكا الكم فإنه يسمى بالطريقة شبه الكلاسيكية.

٣- يستخدم في حساب كل من القيم والدوال المميزة للنظام الكمي، وأيضاً معامل النفاذية، ويتم التحقق من صحة الحلول عند الحدود التقليدية، وذلك بمساواة الثابت $\hbar$ بالصفر.

٤- استخدامه لا يتطلب وجود هملتونيان له حل كامل، كما في نظرية الاضطراب غير الزمنية.

٥- يستخدم لإيجاد الحل التقريبي لنظام يتغير فيه الجهد تغيراً بطيئاً، بمعنى أن الجهد يظل ثابتاً تقريباً لمدى مكافئ لطول موجة الجسيم (طول موجة دى برولى). نذكر هنا أن النظام التقليدي يحقق هذه الفرضية، حيث إن الطول الموجي للنظام التقليدي يقترب من الصفر.

٦- يستخدم في المعادلات التفاضلية ذات البعد الأوحد، أو المعادلات التي يمكن تحويلها إلى معادلات ذات بعد واحد.

٧- يستخدم للأطوال الموجية القصيرة، بمعنى أن طول موجة دي برولي يكون صغيراً جداً بالنسبة للمنطقة التي تحدث فيها تغير الحركة.

٨- يعتبر الملاذ الأخير للحسابات، وهذا عندما تفشل الطرق الأخرى.

لتوضيح الصورة قبل الدخول في التفاصيل، فإننا نستطيع تشبيه حركة جسيم في مجال متغير بسلوك الضوء في سقوطه وحركته خلال وسط له معامل انكسار. إذا كان التغير في معامل الانكسار للوسط سريعاً وحاداً؛ فإننا نحصل على انعكاس للضوء. أما إذا كان التغير في معامل الانكسار للوسط تدريجياً فإن مسار الضوء لا يكون مستقيماً ولكن لا يحدث انعكاس. عدم الحصول على انعكاس يتم تحت الشرط أن التغير في الطول الموجي، "$\delta\lambda$" ، يجب أن يكون صغيراً مقارنةً بالطول الموجي "λ" للضوء الساقط نفسه، بمعنى أن $\lambda >> |\delta\lambda|$. بإمكاننا استخدام "$\delta\lambda$" كتغير في المسافة بحيث إن:

$$\left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\lambda\right| << \lambda \quad \Rightarrow \quad \left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right| << 1 \qquad \textbf{(i)}$$

هذا الشرط يمكن توليفه بميكانيكا الكم، حيث إن كمية الحركة الخطية التقليدية لجسيم، $p = 2m\sqrt{E - V(x)}$ ، ترتبط بالطول الموجي لدي-برولي "λ" بالعلاقة:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{2m\sqrt{E - V(x)}} \qquad \textbf{(ii)}$$

من ثم فإن هذا الشرط يمكن تحقيقه في منطقتين: الأولى هي المسموح بها تقليدياً، حيث "$E > V$" ، وتكون "λ" في هذه المنطقة كمية حقيقية، والثانية هي المنطقة المُحرمة كلاسيكياً، حيث "$E < V$" ، وتكون "λ" في هذه المنطقة كمية تخيلية. باستخدام المعادلة **(ii)** نجد أن الشرط **(i)** يؤول إلى:

$$\left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right| = \left|\frac{\hbar}{p}\frac{\partial p}{\partial x}\right| = \left|\frac{\hbar}{p}\frac{m\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}{2m(E - V)}\right| = \lambda\left|\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)\right| << \text{Kinetic energy}$$

١- المعالجة الرياضية

الهد ف من هذه الطريقة هو إيجاد حل تقريبي لمعادلة شرودنجر غير الزمنية التي تأخذ الصورة:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=E\psi \quad (١)$$

الفكرة عامةً بسيطة، ونبدأها من أنه عند ثبوت الجهد، فإن المعادلة (١) يصبح لها الحلول:

$$\psi=e^{\pm ikx}=e^{\pm ipx/\hbar}.$$

وهي دالة موجة مستوية تصف حركة الجسيم بالاتجاه الموجب أو السالب للمحور السيني. بالتشابه، هذا يجعلنا نقترح أنه بتغير الجهد تغيراً بطيئاً مع المسافة x، بإمكاننا محاولة إيجاد حل عام بالشكل التالي:

$$\psi=e^{iS(x)/\hbar} \quad (٢)$$

مع مراعاة أن $S(x)$ لن تصبح دالة خطية في المتغير x.

بتفاضل المعادلة (٢) نحصل على:

$$\frac{d\psi}{dx}=\left[\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\right]\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\left[\frac{i}{\hbar^2}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right]\psi \quad (٣)$$

بالتعويض من المعادلة (٣) في المعادلة (١) نجد أنها تؤول إلى:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}=2m(E-V) \quad (٤)$$

على ماذا تدل المعادلة (٤)؟ نلاحظ هنا أننا إذا وضعنا $\hbar=0$ فإن المعادلة تؤول إلى معادلة مشهورة بالميكانيكا التقليدية تسمى معادلة هاملتون-جاكوبي.

الآن، ولإيجاد حل تقريبي، يمكننا محاولة استخدام مفكوك $S(x)$ على هيئة متسلسلة قوى للوسيط $\hbar$ بالشكل:

$$S(x)=S_o(x)+\hbar S_1(x)+\frac{1}{2}\hbar^2 S_2(x)+\cdots \quad (٥)$$

ولنا هنا ملاحظة على المعادلة (٥)، فهي متسلسلة لا نهائية تباعدية لكن باستخدام الشرط $\hbar\to 0$ يجعلها تقاربية. عملياً نستخدم التقريب في الحالات التي لا تتطلب أكثر من حدين وهما S_o و S_1. بالتعويض من المعادلة (٥) في المعادلة (٤) نحصل على:

$$\left(S_o'(x)+\hbar S_1'((x)+\hbar^2 S_2'(x)+\cdots\right)^2-i\hbar\left(S_o''(x)+\hbar S_1''((x)+\hbar^2 S_2''(x)+\cdots\right)$$
$$=\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]$$

حيث الشرطة ' والشرطتان" بالدليل العلوي يدل على المشتقة الأولى والثانية للدالة S بالنسبة إلى المتغير x ، بالترتيب.

دعونا هنا نساوي المعاملات لأول ثلاث قوى للوسيط $\hbar$:

مساواة معاملات $\hbar^o$ تُعطي:

$$\left(\frac{dS_o}{dx}\right)^2 = \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]}$$

$$\Rightarrow S_o = \pm \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} \qquad (٦)$$

ومساواة معاملات $\hbar^1$ تُعطي:

$$2\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right) - i\,\frac{\partial^2 S_o}{\partial x^2} = 0 \qquad (٧)$$

التي يمكن كتابتها بالشكل:

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right) = \frac{i}{2}\frac{\left(\frac{\partial^2 S_o}{\partial x^2}\right)}{\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)} = i\,\frac{\partial}{\partial x}\ln\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_1 = \frac{i}{2}\ln\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)} \qquad (٨)$$

وباستخدام المعادلة (٦) فإن المعادلة (٨) تؤول إلى:

$$e^{-iS_1} = \left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)^{\frac{1}{2}} = 2m[E - V]^{\frac{1}{4}} = p^{\frac{1}{2}} \qquad (٩)$$

بالطبع يمكننا حساب S_2 ، لكننا سنكتفي بالتقريب إلى هذا الحد على أساس أنه تقريب تقليدي.

واجب منزلي: أثبت أن:

$$S_2 = \frac{1}{2}\frac{m\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}{\left[2m(E - V)\right]^{3/2}} - \frac{1}{4}\int \frac{m^2\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2}{\left[2m(E - V)\right]^{5/2}}\,dx$$

بالرجوع إلى المعادلة (٢) نجد أنها تؤول إلى:

$$\psi = e^{iS_1/\hbar}e^{iS_o/\hbar} = p^{-\frac{1}{2}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int\sqrt{2m(E - V)}\,dx}$$

من ثم فإن الحل العام يعتبر التجميع الخطي بالشكل:

$$\psi = e^{iS_1/\hbar} e^{iS_o/\hbar} = Ap^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p\, dx} + Bp^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p\, dx} \qquad (١٠)$$

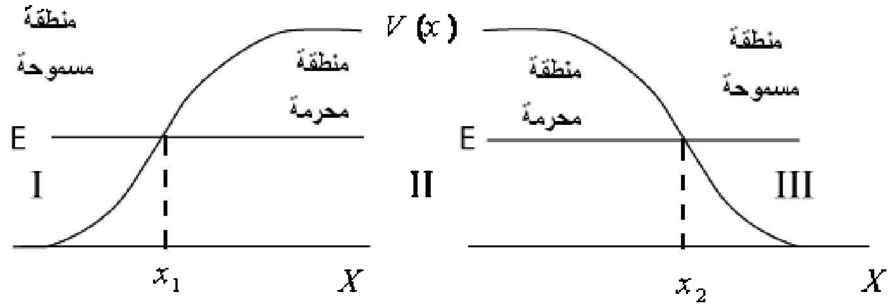
حيث A و B ثوابت تحدد بالشروط الحدودية. وفي الحالة $V(x) > E$ نجد أن الحل العام هو:

$$\psi = e^{iS_1/\hbar} e^{iS_o/\hbar} = C\, \not{p}^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{\hbar}\int \not{p}\, dx} + D\, \not{p}^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int \not{p}\, dx} \qquad (١١)$$

حيث C و D ثوابت و $\not{p} = 2m\sqrt{V(x) - E}$.

٢- نقاط الانقلاب (الانعطاف)

ولنا هنا وقفة للإيضاح. بالنظر إلى المعادلة (١٠) نجد أن الدالة ψ تؤول إلى ما لانهاية عندما تقترب كمية حركة الجسيم، $p \approx (E - V)$ ، من الصفر. وهذا التصرف الفردي (Singular) يتسبب في خلق مشكلة خطيرة لتقريب WKB المقترح، حيث إن تطبيقاته المهمة تحتوي على مناطق بينهما حائل. ونحن نعلم من ميكانيكا الكم أن الدالة ومشتقاتها يجب أن تكون متصلة عند نقاط الاتصال.



شكل (١) حائل يوضح المناطق المسموحة والمحرمة لحركة جسيم كلاسيكي

على سبيل المثال، الشكل (١) يوضح حركة جسيم تقليدي له الطاقة الكلية، E ، في اتجاه المحور السيني، ويمر على جهد $V(x)$. من الشكل نجد أن الجسيم سوف يكون له القيمة $[E - V(x_i)] = 0$ عند نقطتين (x_1, x_2) ، يقال عنهما نقاط انقلاب. نقاط الانقلاب هذه تعبر عن النقاط التي يصل الجسيم الكلاسيكي فيها إلى حالة السكون، بعدها يبدأ الحركة في الاتجاه المعاكس. من وجهة نظرية

ميكانيكـــا الكـــم نجـــد أن دالـــة الجـــسيم خـــارج الحائـــل حيـــث $E > V(x)$ ، بالمنطقتين (I) و (III) ، هي دوال تذبذبية تأخذ الشكل:

$$\psi_{E>V} = Ap^{-\frac{1}{2}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int p\, dx}$$

بالمنطقة (II) حيث $E < V(x)$ هي دوال تناقصية تأخذ الشكل:

$$\psi_{E<V} = C\ p^{-\frac{1}{2}} e^{\pm \frac{1}{\hbar}\int p\, dx}$$

راجع تطبيقات معادلة شرودنجر غير الزمنية لجسيم داخل وخارج حائل جهد. وعند الحائل الفاصل بين المناطق الثلاث، الذي لا يتحقق بالطبع عنده تقريب WKB ، يجب أن تكون الدوال ومشتقاتها متصلة.

للتغلب على هذه العقبة وجب أن تستبعد الدوال من المنطقة القريبة من نقاط الانقلاب وتكوين صيغة وصل (Connection formula) لربط الدالتين $\psi_{E>V}$ و $\psi_{E<V}$. اشتقاق صيغة الوصل تحتاج معالجة رياضية أعلى من مستوى هذا الكتاب. لذلك سوف نتعرض لهذه المعالجة باختصار ونذكر ما نحتاجه فقط. بجوار نقطة الانقلاب، فرضاً x_o ، نستطيع استخدام مفكوك تيلور لوضع الجهد كتقريب خطي على شكل متسلسلة تأخذ الصورة:

$$V(x) = V(x_o) + (x - x_o)\frac{\partial V}{\partial x} + \cdots$$

من ثم نجد أن:

$$p^2 = 2m\left[E(x_o) - V(x)\right] = 2m\left[\cancel{E(x_o)} - \cancel{V(x_o)} - (x - x_o)\frac{\partial V}{\partial x}\right]$$

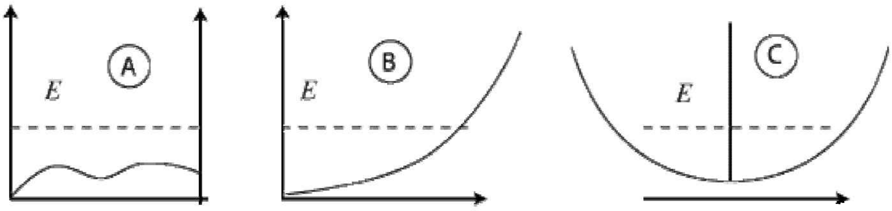
$$\approx -2m(x - x_o)\frac{\partial V}{\partial x}$$

بالتعويض في معادلة شرودنجر وبمساواة الدوال عند نقاط الانقلاب واستخدام ثوابت تقريبية للتكاملات نصل إلى العلاقة الشهيرة لشرط تكميم تقريب WKB وهي:

$$\int_{x_1}^{x_2} dy\, \sqrt{2m\left[E - V(y)\right]} = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar$$

حيث $n = 0,1,2,\cdots$. تمثل n عدد العقد (nodes) لدالة WKB بين نقطتي الانقلاب.

بعض الحالات توصلنا إلى الاستنتاجات للحالات التالية:



الحالة (A) لحائلين صلبين (غير نفاذين) (two hard shoulders) ،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = n\pi\hbar$$

الحالة (B) لحائل صلد (one hard shoulder) ،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = (n - \tfrac{1}{4})\pi\hbar$$

الحالة (C) لحائلين مرنين (two soft shoulders) ،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = (n - \tfrac{1}{2})\pi\hbar$$

حيث إن $n = 1,2,3,\cdots$.

ننهي هنا بوصفة بسيطة من عدة خطوات لاستخدام طريقة WKB في حل مسائل الحالات المقيدة. الخطوات كالتالي:

أ- أوجد قيم نقاط الانقلاب الكلاسيكية، مثلاً x_1 و x_2 ،

ب- أوجد قيمة التكامل:

$$\int_{x_1}^{x_2} dy p(y) = \int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(y)\right]}$$

ج- ساوِ قيمة التكامل، بالخطوة ٢، مع الشرط الصحيح للتكميم.

٣- أمثلة محلولة

مثال: باستخدام تقريب WKB أوجد طاقة جسيم، كتلته m ، يهتز في حركة توافقية بسيطة ذو بعد واحد، حيث يأخذ الجهد الشكل $V(x) = \frac{1}{2}\beta x^2$ ، $\beta = m\omega^2$.

الحل: المطلوب هنا أن نحسب نقطتي الانقلاب، اللتان تحققان شرط التكميم وهو:

$$\int_{x_1}^{x_2} dy\,\sqrt{2m\left[E - V(y)\right]} = (n+\frac{1}{2})\pi\hbar$$

حيث إن $n = 0,1,2,3,\cdots$.

وحيث إن $V(x) = \frac{1}{2}\beta x^2$ لذلك سنفترض أن الطاقة الكلية المكممة للجسيم تعطي بالعلاقة $E_n = \frac{1}{2}\beta x_n^2$ ومنها نجد أن:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_n - V(x)\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}\beta x_n^2 - \frac{1}{2}\beta x^2\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{k = \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}\left(x_n^2 - x^2\right)}}$$

وشرط التكميم يعطي:

$$\int_{-x_n}^{x_n} \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}\left(x_n^2 - x^2\right)}dx = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,$$

بحساب التكامل كالتالي:

$$\int_{-x_n}^{x_n} \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}\left(x_n^2 - x^2\right)}dx = 2\sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}}\underbrace{\int_0^{x_n}\sqrt{\left(x_n^2 - x^2\right)}dx}_{\frac{\pi}{4}x_n^2}$$

$$= \frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}}\,x_n^2$$

وباستخدامنا للتكامل القياسي $I = \int_{-b}^{b}(1-\frac{x^2}{b^2})dx = \frac{b\pi}{2}$ ، نجد أن:

$$\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}}\,x_n^2 = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$$

$$\Rightarrow x_n = \left(\sqrt{\frac{4\hbar^2}{m\beta}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right)^{1/2} = \left(\frac{4\hbar^2}{m\beta}\right)^{1/4}\left(n+\frac{1}{2}\right)^{1/2}$$

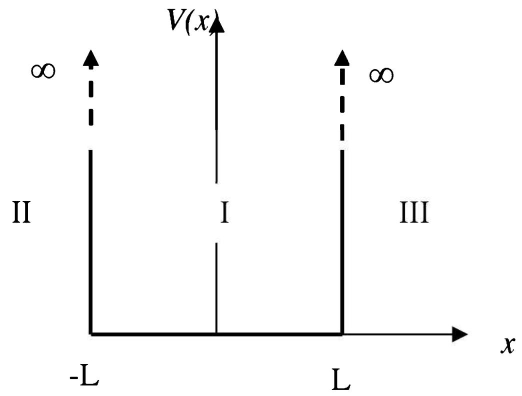
بتعويض المعادلة الأخيرة في الطاقة الكلية نحصل على:

$$E_n = \frac{1}{2}\beta x_n^2 = \frac{1}{2}\beta\left[\left(\frac{4\hbar^2}{m\beta}\right)^{1/4}\left(n+\frac{1}{2}\right)^{1/2}\right]^2$$

$$= \left(\frac{1}{m}\right)^{1/2}\underbrace{\beta}_{m\omega^2}{}^{1/2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

وهي نفس النتيجة التي حصلنا عليها باستخدام تطبيق معادلة شرودنجر على المتذبذب التوافقي البسيط سابقاً.

مثال: استخدام تقريب WKB لحساب طاقة جسيم داخل صندوق، متماثل حول نقطة الأصل، عرضه $2L$ لا نهائي الجهد بالشكل:



$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{for} \quad -L \le x \le +L \\ \infty & \text{elsewhere}\end{cases}$$

الحل: من الرسم يمكن إيجاد نقاط الانقلاب التقليدية، حيث إن النقاط هي حدود جداري الصندوق $x_2 = L$ و $x_1 = -L$. ومن شرط التكميم لجدارين غير نفاذين والذي يُعطى بالمعادلة:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(y)dy = n\pi\hbar$$

حيث التكامل بالمنطقة I يعطي:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x')dx' = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m\left(E_n - V(x')\right)}dx' = \int_{-L}^{L} \sqrt{2mE_n}dx'$$

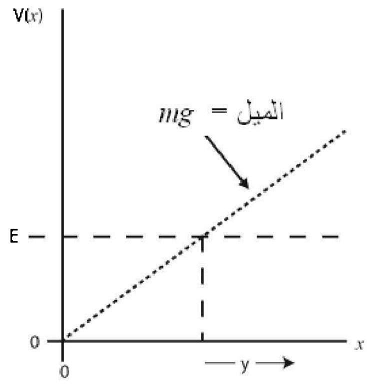
$$= \sqrt{2mE_n}\int_{-L}^{L} dx' = 2L\sqrt{2mE_n}$$

أخيراً نجد طاقة الجسيم تحقق المعادلة:

$$\boxed{E_n = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}}$$

وهي نفس النتيجة التي حصلنا عليها من حل معادلة شرودنجر لجسيم داخل صندوق لا نهائي الجهد. نلاحظ هنا أن طريقة WKB لم تعط قيمة تقريبية، لكنها أعطت قيمة كاملة (Exact). تطابق نتيجة شرودنجر وطريقة WKB ناتج من أن دالة موجة WKB هي دالة جيبية بسيطة.

مثال: استخدم تقريب WKB لحساب طاقة جسيم يتحرك فوق سطح الأرض تبعاً للجهد:



$$V(x) = \begin{cases} mgx & x > 0 \\ \infty & x \le 0 \end{cases}$$

الحل: لإيجاد نقاط الانقلاب التقليدية، نعلم أن النقطة الأولى هي سطح الأرض عندها $x_1 = 0$. النقطة الثانية تأتي من الشرط:

$$p(x) = \sqrt{2m\left(E - mgx_2\right)} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{x_2 = \frac{E}{mg}}$$

ومن شرط التكميم لحائل صلد،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy\, \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = (n - \tfrac{1}{4})\pi\hbar$$

وبحساب التكامل:

$$\int_0^{x_2} dx\, \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = \int_0^{E/mg} dx\, \sqrt{2m\left[E - mgx\right]}, \qquad u = \left(\frac{mg}{E}\right)x$$

$$= \frac{E}{mg}\int_0^1 \sqrt{2mE}\,\sqrt{1-u}\, du, \qquad y = 1-u$$

$$= \sqrt{\frac{E^3}{mg}}\underbrace{\int_0^1 \sqrt{y}\, dy}_{2/3}$$

نحصل على:

$$E_{\text{WKB}} = E = \left[\frac{9}{8}\pi^2\hbar^2 mg^2 (n - \tfrac{1}{4})^2\right]^{1/3}$$

يمكن حل هذه المسألة حلاً كاملاً كالتالي:

نبدأ بمعادلة شرودنجر اللازمنية:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-mgx)\psi=E\psi$$

مع وجوب الشرط الحدودي $\psi(0)=0$ ، نكتب المعادلة السابقة بطريقة أخرى بالشكل:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m^2g}{\hbar^2}(x-\frac{E}{mg})\psi$$

بإزاحة نقطة الأصل، وذلك باستخدام التعويض $y=x-E/mg$ ، نحصل على المعادلة:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2}=\frac{2m^2g}{\hbar^2}y\psi(y)$$

باستخدام المعامل z عديم الوحدات:

$$z=\left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3}y$$

نصل إلى المعادلة التفاضلية التالية:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2}=z\psi(z)$$

وحلها العام هو:

$$\psi(z)=a\ \mathrm{Ai}(z)+b\ \cancel{\mathrm{Bi}(z)}$$

حيث الدوال $\mathrm{Ai}(z)$ و $\mathrm{Bi}(z)$ تسمى دوال إيري (Airy functions). قد تم حذف الحد الثاني بالمعادلة السابقة حيث إنه لا يحقق الشرط الحدودي $\psi(0)=0$.

وبتطبيق الشرط الحدودي $\psi(0)=0$ نجد أن $y=-E/mg$ ، أي:

$$z=\left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(-\frac{E}{mg}\right)$$

وبتعبير آخر فإن الطاقة المميزة ترتبط بالحلول الصفرية للدالة $\mathrm{Ai}(z)$ بالمعادلة:

$$E_{\text{exact}}=-\left[\frac{1}{2}\hbar^2mg^2\right]^{1/3}z_o=-(3.766\times10^{-23}\ \text{Joule})\,z_o$$

الجدول التالي يوضح المقارنة بين الحل التقريبي E_{WKB} والحل الكامل E_{exact} لبعض قيم n.

n	z_o	$E_{\text{exact}}(10^{-23}$ Joule)	$E_{\text{WKB}}(10^{-23}$ Joule)
1	−2.336	8.805	8.738
2	−4.088	15.395	15.371
3	−5.521	20.791	20.777
4	−6.787	25.559	25.549
5	−7.944	29.916	29.910

مثال: استخدام تقريب WKB لحساب الطاقة الكلية لجسيم واقع تحت تأثير جهد كولوم. استخدم على سبيل المثال إلكترون بذرة الهيدروجين.

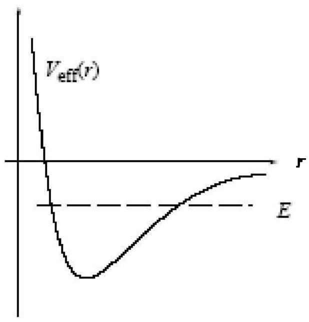
الحل: باستخدام الوحدات الذرية نجد أن الجهد المؤثر لإلكترون بذرة الهيدروجين $V_{\text{eff}}(r)$ و $p(r)$ ، هما:

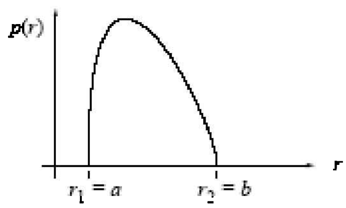
$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{1}{r} + \frac{1}{2}\frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$p(r) = \sqrt{2\left[E - V_{\text{eff}}(r)\right]} = \sqrt{2\left[E + \frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{2r^2}\right]}$$

$$= \frac{\sqrt{2(-E)}}{r}\sqrt{-r^2 + \frac{r}{(-E)} - \frac{l(l+1)}{2(-E)}}$$

ويمثلان بالشكل التالي:





نفضل هنا استخدام تعريف الثابت $(-E)$ وهو موجب بدلاً من (E). وقد تم فصل النقطة المتفردة بالمركز وهي $(\frac{1}{r})$.

نقاط الانقلاب تحسب من الشرط $p(r)=0$ ، وهو:

$$\left(-r^2+\frac{r}{(-E)}-\frac{l(l+1)}{2(-E)}\right)_{tp}=0$$

وهذه معادلة من الدرجة الثانية يمكن إيجاد حلولها وهي:

$$r_1=a=\frac{1-\sqrt{1-2l(l+1)(-E)}}{2(-E)},\qquad r_2=b=\frac{1+\sqrt{1-2l(l+1)(-E)}}{2(-E)},$$

وذلك يعني أن:

$$p(r)=\frac{\sqrt{2(-E)}}{r}\sqrt{(r-a)(r-b)}$$

والآن نحن بصدد حساب التكامل التالي:

$$\begin{aligned}\int_a^b p(r)dr &= \sqrt{2(-E)}\int_a^b \frac{1}{r}\sqrt{(r-a)(r-b)}dr\\ &= \sqrt{2(-E)}\frac{\pi}{2}\left(\sqrt{a}-\sqrt{b}\right)^2=\sqrt{2(-E)}\frac{\pi}{2}\left((a+b)-2\sqrt{ab}\right)\\ &= \sqrt{2(-E)}\frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{(-E)}-2\sqrt{\frac{l(l+1)}{2(-E)}}\right)=\frac{\pi}{2}\left(\sqrt{\frac{2}{(-E)}}-2\sqrt{l(l+1)}\right)\end{aligned}$$

وباستخدام الشرط:

$$\int_a^b p(r)dr=(n-\frac{1}{2})\pi$$

حيث $n=1,2,\cdots$ ، نجد أن:

$$E_n=-\frac{1}{2\left[(n-\frac{1}{2})-\sqrt{l(l+1)}\right]^2}\ \text{a.u.}$$

ملاحظة: يمكن حل المثال السابق بتحويل معادلة شرودنجر ذات الثلاثة أبعاد إلى معادلة في بعد واحد كما في المثال التالي.

مثال: استخدام تقريب WKB للتعامل مع مسائل الجهد ذي الثلاثة أبعاد.

الحل: نعلم أن المعادلة القطرية للمجال المركزي تعرف كالتالي:

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

بالرغم من تشابه هذه المعادلة مع معادلات البعد الواحد، لكننا لا نستطيع استخدام هذا التقريب هنا وذلك لوجود نقطة التفرد عند $r = 0$. لذا يجب علينا أن نحول المعادلة ذات الثلاثة أبعاد إلى معادلة في بعد واحد، بمعنى أننا يجب أن نحول التفرد من النقطة $r = 0$ إلى النقطة $x = -\infty$. لعمل هذا نستخدم التحويل $r = e^x$ لتصبح المعادلة الرئيسة بالشكل:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{du}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(e^x) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m}e^{-2x}\right]e^{2x}u = 0$$

ومرة أخرى للتحويل إلى بعد واحد نستخدم التعويض:

$$u(x) = \chi(x)e^{-x/2}$$

حيث تحقق المعادلة التفاضلية:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(e^x) - \frac{\hbar^2}{2m}(l+\tfrac{1}{2})^2 e^{-2x}\right]e^{2x}\chi = 0$$

وهي تمثل معادلة في بعد واحد، ومنها نستخدم الشرط:

$$\int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E - V(e^x) - \frac{\hbar^2}{2m}(l+\tfrac{1}{2})^2 e^{-2x}\right\}e^{2x}\right]^{1/2} = (n+\tfrac{1}{2})\pi, \quad n = 0,1,2,\cdots$$

والآن، نستخدم التعويضات: $r = e^x$ و $dr = e^x dx$ والجهد $V(r) = -\frac{1}{r}$ لنحصل على:

$$\int_{r_1}^{r_2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E+\frac{1}{r}-\frac{\hbar^2}{2mr^2}(l+\tfrac{1}{2})^2\right\}\right]^{1/2} dr=(n_r+\tfrac{1}{2})\pi$$

حيث $n_r = 0,1,2,\cdots$.

وبنفس طريقة المثال السابق نحصل على:

$$E=-\frac{1}{2n^2}\ \text{a.u.}$$

حيث يمثل $n=n_r+l+1$ العدد الكمي الأساسي.

٤- تمارين عامة

١- باستخدام تقريب WKB أوجد الطاقة المميزة لجسيم للجهود التالية:

أ- $$V=-V_o\,\text{sech}^2\left(\frac{x}{a}\right)$$

ب- $$V(x)=\begin{cases} V_o\left(\dfrac{x^2}{a^2}-1\right) & \text{for} \quad |x|<a \\ 0 & \text{for} \quad |x|>a \end{cases}$$

حيث V_o و a ثوابت.

الباب السادس عشر

نظرية الاضطراب الزمنية

(Time-Dependent Perturbation Theory)

الباب السادس عشر

نظرية الاضطراب الزمنية

حتى الآن تجنبنا التعامل مع المؤثرات التي تحتوي على الزمن صراحةً. ذلك لسبب بسيط وهو أن محاولة إيجاد حل متكامل لمعادلة شرودنجر الزمنية يعد بعيد المنال.

إن اعتماد الهملتونيان على الزمن يجعلنا لا نستطيع استخدام فصل المتغيرات للوصول إلى معادلة مميزة لها القيم والدوال الخاصة بها. وقد تعاملنا سابقاً مع معادلة شرودنجر بالصورة:

$$\hat{H}(r)\left|x,t\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|x,t\right\rangle$$

ومنها وجدنا بعد فصل المتغيرات أن:

$$\left|x,t\right\rangle = \left|x\right\rangle\left|t\right\rangle = \left|x\right\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

وبعد دراستنا للنظريات التقريبية نجد أنه بإضافة حدود صغيرة تعتمد على الزمن بالهملتونيان فإننا نستطيع التعامل معه من خلال نظرية الاضطراب.

نظرية الاضطراب الزمنية من الطرق الملائمة والقوية لدراسة تفاعل المواد مع الطاقة (Interaction of radiation with matter) (مثل الإشعاعات الكهرومغناطيسية) التي يظهر تأثيرها من خلال الفوتونات والإلكترونات. هذه الإشعاعات لها ترددات مختلفة، ومن ثم تتغير مع الزمن ولهذا نتعامل معها كاضطرابات زمنية. ونتيجة لهذه الاضطرابات الزمنية تصبح المستويات (الدوال) غير مستقرة؛ ولهذا تنتقل الإلكترونات من مستوى أعلى إلى مستوى أدنى عن طريق الانبعاث التلقائي (Spontaneous emission) **أو عن طريق الانبعاث** المحثوث (Stimulated emission) **وهو أساس لنظرية عمل الليزر**. وتنتقل الإلكترونات من مستوى أدنى إلى مستوى أعلى عن طريق الامتصاص المحثوث (القسري) **(Stimulated absorption).**

ودراستنا في هذا الباب ترتكز على تأثير الاضطرابات الصغيرة فقط، التي تضاف إلى الهملتونيان الابتدائي غير المعتمد على الزمن، وكما ذكرنا أننا عندما نتعامل مع مؤثر (هملتونيان) يعتمد على الزمن صراحةً، فإننا لن نحصل على حلول مستقرة (من ناحية الدوال والقيم المميزة)، ومن ثم فإنّ اختياراتنا المعتادة، التي تعتمد على الدوال المميزة (حلول المعادلات المميزة) كأساس لمفكوك أي دالة مجهولة تصبح غير عملية. وللتغلب على

هذه العقبة فقد اقترح العالم ديراك استخدام الدوال المميزة كمفكوك للدوال الزمنية المجهولة، ولكن مع استخدام معاملات تعتمد على الزمن.

ولتوضيح نظرية الاضطراب الزمنية بمثال من الحياة اليومية؛ نفترض أن الشمس تشرق عند الزمن t_o. **عند الزمن** $t \le t_o$ **أي قبل** شروق الشمس، تكون حالة السكون للأشخاص، ولنفترض أنها تعرف بالدالة الابتدائية $\langle \varphi_i|$. **عند الزمن** $t > t_o$، **أي بعد** شروق الشمس، تكون حالة الحركة للأشخاص، ولنفترض أنها تعرف بالدالة النهائية $|\varphi_f\rangle$. من ثم سوف نتعامل مع دالتين أساسيتين، الدالة الأولي الابتدائية وهى $\langle \varphi_i|$ **وتنتقل إلى (تترافق مع)** الدالة الثانية النهائية $|\varphi_f\rangle$ نتيجة للمؤثر $\hat{H}'$، وهو هنا شروق الشمس. وهنا يظهر السؤال كالتالي: ماهو احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle \varphi_i|$ إلى المستوى النهائي $|\varphi_f\rangle$ **في وجود المؤثر** $\hat{H}'$ ؟ وللإجابة عن هذا السؤال، سوف نتبع الشرح التالي.

١- معدل الانتقال للمستويات المنفصلة

للإجابة عن السؤال السابق دعونا نبدأ هنا بالهملتونيان الكلي $\hat{H}$، الذي يتكون من مجموع جزئين: الأول: هو الهملتونيان غير المضطرب $\hat{H}_o$ (وهو الجزء الذي يمكننا إيجاد حل كامل له تحليلياً) والثاني: $\hat{H}'$ سوف نعده جزءاً صغيراً جداً بالنسبة إلى $\hat{H}_o$، وهو المسؤول عن الاضطراب، ويعتمد على الزمن بشكل واضح، كالتالي:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \lambda \hat{H}'(t), \qquad \hat{H}'(t) \ll \hat{H}_o \tag{1}$$

وبافتراض وجود حل لمعادلة شرودنجر المميزة:

$$\hat{H}_o |\varphi_k\rangle = E_k |\varphi_k\rangle \tag{2}$$

والتي تظهر كمعادلة زمنية بالشكل:

$$\hat{H}_o |\psi_o\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_o\rangle \tag{3}$$

حيث

$$|\psi_o\rangle = \sum_k C_k^{(0)} e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle \tag{4}$$

حيث $C_k^{(0)}$ ثوابت لا تعتمد على الزمن. الكمية و $\left|C_k^{(0)}\right|^2$ تعبر هنا عن احتمالية وجود النظام في المستوى المستقر k قبل بدء الاضطراب. مع ملاحظة أن التجميع فى المعادلة (٤) يتم على جميع المستويات المنفصلة (discrete states) منها والمتصلة (contiuous states). وحيث إن الدوال $\langle\varphi_k|$ تكون مجموعة متكاملة، من ثم فإن الحل العام لمعادلة شرودنجر العامة الزمنية:

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle \tag{5}$$

يمكننا وضعه بالصورة:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle, \qquad \sum_k \left|C_k(t)\right|^2 = 1 \tag{6}$$

حيث افترض ديراك أن المعاملات $C_k(t)$ تعتمد صراحةً على الزمن. وإذا علمنا أن الدوال المميزة $\langle\varphi_k|$ لها خواص التعامد والمعايرة وأن الدالة $\langle\psi|$ لها خواص المعايرة، فإننا نجد أن الكمية $\left|C_k(t)\right|^2$ تعبر عن احتمالية وجود النظام في الحالة (المستوى) k عند الزمن المحدد t و تدل $C_k(t)$ على السعة الاحتمالية. وبمقارنة المعادلتين (٤) و(٦) نلاحظ أنه مع استخدام الشرط $\hat{H}'(t)=0$ فإن المعامل الزمني $C_k(t)$ يؤول إلى الثابت $C_k^{(0)}$. ولهذا تعده قيمة ابتدائية (شرط ابتدائي) للمعامل $C_k(t)$.

نلاحظ هنا تحولا جذرياً بالمسألة، فبدلاً من إيجاد قيم ودوال مميزة لمعادلة شرودنجر المميزة (٥)، فإننا من الآن فصاعدا سوف نبحث عن إيجاد قيم المعاملات $C_k(t)$. ولحل هذه المعضلة نقوم بالتعويض بالمعادلة (٦) في المعادلة (٥) مع استخدام المعادلتين (١) و(٢) لنجد:

$$i\hbar\sum_k \dot{C}_k(t)\left|\varphi_k\right\rangle e^{-iE_k t/\hbar} = \sum_k C_k(t)\lambda\hat{H}'(t)\left|\varphi_k\right\rangle e^{-iE_k t/\hbar} \tag{7}$$

حيث استخدمنا التفاضل الزمني $\dot{C}_k(t) = \dfrac{dC_k(t)}{dt}$.

مثال: اشتق العادلة (٨) باستخدام المعادلة:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle = (\hat{H}_o + \lambda\hat{H}')\sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle \tag{8}$$

الحل:

الطرف الأيسر من المعادلة (٨) يعطي:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_k C_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle = i\hbar\sum_k \dot{C}_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle + i\hbar(-\frac{i}{\hbar})\sum_k C_k(t)\,E_k e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle$$

الطرف الأيمن من المعادلة (٨) يعطي:

$$\begin{aligned}(\hat{H}_o+\lambda\hat{H}')\sum_k C_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle &= \sum_k C_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}\hat{H}_o\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda\sum_k C_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}\hat{H}'\left|\varphi_k\right\rangle \\ &= \sum_k C_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}E_k\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda\sum_k C_k(t)\,e^{-iE_kt/\hbar}\hat{H}'\left|\varphi_k\right\rangle\end{aligned}$$

وبمساواة الطرفين نحصل على المعادلة (٧).

باستخدام الضرب القياسي بواسطة $\left\langle\varphi_m\right|e^{iE_mt/\hbar}$ من اليسار بكلا الطرفين للمعادلة (٧) وإجراء التكامل على الفراغ بأكمله ومراعاة أن $\left\langle\varphi_m\middle|\varphi_k\right\rangle=\delta_{mk}$ نجد أن المعادلة (٧) تؤول إلى فئة من المعادلات التفاضلية المترافقة وهي:

$$\dot{C}_m(t)=\frac{1}{i\hbar}\sum_k C_k(t)\lambda\hat{H}'_{mk}(t)\,e^{i\omega_{mk}t} \tag{9}$$

حيث عرفنا عناصر المصفوفة $\hat{H}'_{mk}(t)$ بالشكل:

$$\hat{H}'_{mk}(t)=\left\langle\varphi_m\right|\hat{H}'(t)\left|\varphi_k\right\rangle \tag{10}$$

وعرفنا تردد بور الزاوي ω_{mk} كالتالي:

$$\omega_{mk}=\frac{E_m-E_k}{\hbar} \tag{11}$$

المعادلات التفاضلية المترافقة (٩)، للمعاملات $C_k(t)'s$، مكافئة تماماً لمعادلة شرودنجر الزمنية (٥) وبدون أي تقريب حتى الآن. ويمكننا وضع المعادلة (٩) بشكل المصفوفة التالي:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{C}_1\\ \dot{C}_2\\ \dot{C}_3\\ \cdot\\ \cdot\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{H}'_{11} & \hat{H}'_{12}e^{i\omega_{12}t} & \cdot & \cdot & \cdot\\ \hat{H}'_{21}e^{i\omega_{21}t} & \hat{H}'_{22} & \cdot & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & \hat{H}'_{33} & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & & & \\ & & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\\ C_3\\ \cdot\\ \cdot\end{pmatrix}$$

بحل هذه المعادلات المترافقة نحصل على المعاملات $C_k(t)'s$ ومنه نحسب احتمالية وجود النظام في حالة معينة في زمن معين.

مثال: ادرس حالة نظام ذي مستويين.

الحل: للحالة الخاصة لنظام ذي مستويين، أحدهما: أرضي، والآخر: مثار يؤثر عليه مجال متردد خارجي، سوف نجد أن مصفوفة المعادلات لها حل كامل. بالتأكيد،

إن النظام الفيزيائي الحقيقي، كما هو معلوم، يتكون من أكثر من مستويين، ولكن يوجد أيضاً أنظمة عديدة يكون فيها من هذه المستويات مستويان مهمان أساسيان. أشهر مثال على ذلك هو أمونيا الميزر.

لنظام ذي مستويين ١ و٢، يمكن وضع الدالة العامة له بالصورة:

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle + c_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle$$

والمعادلة التفاضلية للمعاملات $c_n(t)$'s هي:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1\\ \dot{c}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & Ve^{i\omega t}e^{i\omega_{12}t}\\ Ve^{-i\omega t}e^{-i\omega_{12}t} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}.$$

للتبسيط تم وضع $\hat{H}'_{11}=\hat{H}'_{22}=0$ ، $\hat{H}'_{12}=\hat{H}'_{21}=Ve^{i\alpha t}$ وكتابة $\omega+\omega_{12}=\alpha$. ومن المصفوفة السابقة نحصل على المعادلتين المترافقتين:

$$i\hbar\dot{c}_1 = Ve^{i\alpha t}c_2$$
$$i\hbar\dot{c}_2 = Ve^{-i\alpha t}c_1.$$

المعادلتان السابقتان من الدرجة الأولى يمكن تحويلهما إلى معادلة تفاضلية واحدة من الدرجة الثانية، وذلك بتفاضل المعادلة الثانية، والتعويض بالمتغير $\dot{c}_1$ من المعادلة الأولى و c_1 من المعادلة الثانية للحصول على:

$$\ddot{c}_2 = -i\alpha\dot{c}_2 - \frac{V^2}{\hbar^2}c_2.$$

هذه المعادلة التفاضلية المعروفة يمكن حلها باستخدام الحل التجريبي $c_2(t) = c_2(0)e^{i\Omega t}$. هذا الحل التجريبي يكون متحققاً في حالة إن $\Omega = -\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \frac{V^2}{\hbar^2}}$. وباستخدام قيمة Ω، فإن الحل العام يكون:

$$c_2(t) = e^{-i\frac{(\omega-\omega_{21})}{2}t}\left(Ae^{i\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\,t} + Be^{-i\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\,t}\right)$$

باستخدام الشروط الابتدائية $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$ نجد أن $A = -B$. باستخدام الفرض عند بداية الزمن $t = 0$:

$$\dot{c}_2(0) = \frac{V}{i\hbar}c_1(0) = \frac{V}{i\hbar}.$$

لذلك نجد أن احتمالية تواجد الجسيم بالمستوى المثار يتحقق بالمعادلة:

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\frac{V^2}{\hbar^2}}{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\sin^2\left(\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\;t\right).$$

من السهل إثبات أن

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2$$

هذه المعادلات تسمى صيغ رابي ***Rabi's formula*** .

لاحظ هنا أنه في الحالة الخاصة $\omega = \omega_{12}$ نجد أن:

$$|c_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{Vt}{\hbar}\right);$$

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{Vt}{\hbar}\right)$$

إذا اعتبرنا $E_2 > E_1$ وأن النظام بدايةً يتواجد في المستوى الأرضي $\langle 1|$، هذا يعني أنه بعد زمن مقداره $h/4V$ فإن النظام بالتأكيد سوف يتواجد بالمستوى المثار $\langle 2|$، ويتذبذب ذهاباً وإياباً بين المستويين بزمن دوري مقداره $h/2V$.

ماهو المعنى الفيزيائي لهذه المعادلة؟ المعنى هو أن المجال الخارجي المتذبذب يستطيع أن يحث (يدفع) جميع (معظم) الجزيئات التي هي في المستوى الأرضي إلى جزيئات بالمستوى المثار الأول وذلك باختيار زمن دوري دقيق للمجال. وكتطبيق لذلك فإن أمونيا الميزر تعمل بواسطة إرسال فيض من جزيئات الأمونيا، بسرعة معلومة بالمستوى الأرضي خلال أنبوب واقع في مجال خارجي متذبذب له زمن دوري محدد، ويخرج الأمونيا من نهاية الأنبوب وقد تمت إثارته إلى المستوى الأول. وباستخدام كمية صغيرة من الأشعة الكهرومغناطيسية لها نفس تردد الأمونيا الخارجة، فإنّ جزءاً كبيراً من الأمونيا المثارة سوف ينتقل إلى المستوى الأرضي، وينتج عنه أشعة طاقتها مرتفعة وتكون ترابطاً طورياً (coherent).

للبدأ في استخدام التقريب لحل المعادلة (٩)، سنفترض أن الاضطراب $\lambda \hat{H}'_{mk}$ يمثل كمية صغيرة وأيضاً مفكوك المعاملات C_k يتم بدلالة الوسيط λ بالمتسلسلة:

$$C_k = C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)} + \lambda^2 C_k^{(2)} + \cdots \qquad \textbf{(12)}$$

باستخدام المفكوك (١٢) في المعادلة (٩) ومساواة معاملات الوسيط λ (لنفس الدرجة) بكلا الطرفين، نجد أن:

مساواة معاملات λ^0 تعطي:

$$\dot{C}_m^{(0)} = 0, \qquad \textbf{(13a)}$$

ومساواة معاملات λ^1 تعطي:

$$\dot{C}_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_k \hat{H}'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} C_k^{(0)}, \qquad \textbf{(13b)}$$

وعامةً مساواة معاملات λ^s تعطي:

$$\dot{C}_m^{(s+1)} = (i\hbar)^{-1}\sum_k \hat{H}'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} C_k^{(s)} \quad , \quad s = 0,1,2,\cdots \qquad \textbf{(13c)}$$

نتوقف هنا لنسأل أنفسنا، ماذا تعني لنا المعادلات (**a-c١٣**)؟ الجواب ببساطة فهي: تعني أن المعادلة الأصلية (٧) قد انفصلت بطريقة ما إلى مجموعة من المعادلات ((**a-c١٣**) التي يمكن تكاملها لأي درجة. لكن المعادلات (**a-c١٣**) لا يمكن حلها حلاً تاماً، وذلك لارتباط معدل تغير كل معامل، مثلاً $\dot{C}_m^{(s+1)}$، مع المعاملات الأخرى، C_k^s. ولكن، لاضطرابات صغيرة نستطيع لدرجة جيدة من التقريب أن نفترض أن معدل تغير المعاملات صغير جداً، بحيث إن المعاملات تعامل على أنها ثوابت.

بالنظر للمعادلة (**13a**)، الشرط $\dot{C}_m^{(0)} = 0$ يؤكد ببساطة أن $\dot{C}_m^{(0)}$ هو معامل ثابت لا يعتمد على الزمن. وكما رأينا سابقاً أن $\dot{C}_m^{(0)}$ ما هو إلا شرط ابتدائي للمسألة. وفي شرحنا التالي سوف نفترض، فقط للتبسيط، أن النظام في حالته الابتدائية ($t \le t_o$) يعرف تماماً بالدالة المستقرة $\langle \varphi_k|$ وطاقتها المناظرة E_k. ولهذا:

$$C_k^{(0)} = \begin{cases} \delta_{km} & \text{for discrete states} \\ \delta(k-m) & \text{for continuous states} \end{cases} \qquad \textbf{(14)}$$

بالتعويض من (١٤) في المعادلة (**13b**) نجد أن التصحيح الأول يعطي:

$$\dot{C}_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1}\hat{H}'_{km}(t)\, e^{i\omega_{km}t} \qquad \textbf{(15)}$$

وبتكاملها نجد:

$$C_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1}\int_{t_o}^{t} \hat{H}'_{km}(t')\, e^{i\omega_{km}t'}dt' \qquad \textbf{(16)}$$

حيث ثابت التكامل اختير بحيث إن المعامل $C_m^{(1)}$ يؤول للصفر عند $t = t_o$، أي قبل أن يبدأ الاضطراب. سنكتفي هنا بالمعاملات من الدرجة الأولي حتى يتسنى لنا فهم تطبيقاتها.

للدرجة الأولى سنعرف احتمالية الانتقال (Transition probability) من المستوى الابتدائي $\langle \varphi_k|$ إلى المستوى النهائي $|\varphi_m\rangle$ بالعلاقة:

$$P_{km} = \left|C_m^{(1)}\right|^2 \qquad \textbf{(17)}$$

ومعدل الانتقال(Transition rate) $\Gamma_{k\,m}$ (ويعرف بأنه احتمالية الانتقال لوحدة الزمن) بالعلاقة:

$$\Gamma_{k\,m} = \frac{P_{k\,m}}{t} \tag{18}$$

ومن Γ نستطيع تعريف متوسط العمر الزمني للمستوى (Mean life time of the state) بالعلاقة:

$$\tau(\text{Mean life time}) = 1/\Gamma \tag{19}$$

وهو متوسط الزمن اللازم لانحلال المستوى.

مثال: اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور X بحيث إن الاضطراب هو:

$$.\hat{H}' = -qxE,$$

ويؤثر في الفترة الزمنية $0 < t < T$ فقط. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي ($n = 0$) في اللحظة $t \le 0$، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوى آخر في اللحظة $t \to T$.

الحل: نلاحظ هنا أن الاضطراب نفسه لا يعتمد على الزمن صراحةً، ولذلك نحصل على العنصر:

$$\hat{H}'_{mk} = \langle \varphi_m | \hat{H}' | \varphi_k \rangle = -qE \langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$$

ونجد أن تكاملاً من النوعية $\langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$، الذي لا يعتمد على الزمن، سوف نتعامل معه بكثرة بحساباتنا المستقبلية. ومن خواص هذا التكامل البسيط نستطيع أن نستنتج شروط (مدى سماحية) الانتقال من مستوى إلى مستوى آخر. هذه الشروط تسمى قواعد الاختيار(selection rules)، فدعونا نشق هذه القواعد.

من تعاملنا سابقا مع نظرية المؤثرات وجدنا أن التكامل $\langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$ يعطى بالشكل:

$$\langle m \,|\, x \,|\, n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1}\; \delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\; \delta_{m,n-1} \right]$$

وله قيمة غير صفرية بتحقق الشرط $m = n \pm 1$ فقط. وحيث إن $n = 0$ فإن m تأخذ القيمة ١ فقط، حيث إن القيم السالبة غير مسموح بها في هذا النظام الفيزيائي. من ثم نجد أن:

$$\langle 1 | x | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{0+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

وسعة الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$\begin{aligned}
C_m^{(1)} &= (i\hbar)^{-1}\int_{t_o}^{t} \hat{H}'_{mk}(t')\, e^{i\omega_{km}t'} dt' \\
&= (i\hbar)^{-1} qE \langle 1 | x | 0 \rangle \int_0^T e^{i\omega_{10}t'} dt' = \frac{qE}{i\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\frac{e^{i\omega_{10}t'}}{i\omega_{10}}\right]_0^T \\
&= -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[e^{i\omega_{10}T} - 1\right] = -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}e^{i\omega_{10}T/2}\left[e^{i\omega_{10}T/2} - e^{-i\omega_{10}T/2}\right] \\
&= -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}e^{i\omega_{10}T/2}\, 2i \sin(\frac{\omega_{10}T}{2})
\end{aligned}$$

واحتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$P_{01} = \left|C_1^{(1)}\right|^2 = \frac{2q^2E^2}{m\hbar\omega^3}\sin^2(\frac{\omega_{10}T}{2})$$

يتضح من المعادلة السابقة أن المستوى الابتدائي $\langle 0|$ سيظل كما هو بدون انتقال إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ طالما المجال الكهربي E صغيراً وسيظل احتمالية الانتقال P_{01} تتذبذب خلال زمن تأثير الاضطراب. نستطيع أن نؤكد هنا أيضاً أنه لو استخدمنا مجالاً كهربياً متذبذباً (متردداً) فإن احتمالية الانتقال P_{01} سوف تزداد إلى أن تصل إلى التردد الرنيني (Resonance frequency) المطلوب لبدء عملية الانتقال.

مثال: كما بالمثال السابق، اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور X بحيث إن:

$$\hat{H}'(t) = -qxE(t), \qquad E(t) = \varepsilon e^{-\gamma t}, \qquad \gamma = \frac{1}{\tau}$$

حيث ε و τ قيم ثابتة. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t \le 0$، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوى آخر في اللحظة $t \to \infty$.

الحل: من المثال السابق وجدنا أن الانتقال المسموح به يأتي من:

$$\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\hat{H}'_{10}(t) = \langle 1|\hat{H}'(t)|0\rangle = -qE(t)\langle 1|x|0\rangle$$

ومن ثم فإنّ احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هي:

$$P_{10}(t) = \left|C_0^{(1)}\right|^2 = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\left|\int_0^\infty e^{(i\omega-\gamma)t'}dt'\right|^2$$

$$= \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\left(\left[\frac{e^{i(\omega-\gamma)t'}}{i(\omega-\gamma)}\right]_0^t\right)^2 = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2+1}\left(e^{i(\omega-\gamma)t}-1\right)^2$$

ومنها نجد أن:

$$P_{10}(t\to\infty) = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2+1}$$

حيث استخدمنا التكامل القياسي $\left|\int e^{-br+i\omega r}dr\right|^2 = \frac{1}{b^2+\omega^2}$. يتضح من المعادلة السابقة أن P_{10} تؤول للصفر عندما $\tau = 0$ أي قبل بدء الاضطراب، و $P_{10} \propto \frac{1}{\omega^3}$ عندما $\tau \to \infty$.

مثال: لاضطراب صغير يعطى بالعلاقة:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} H' & 0 \le t \le \tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}$$

حيث H' مؤثر ثابت لا يعتمد علي الزمن. أثبت أن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n يعطى بالعلاقة:

$$P_{mn} = \frac{2\pi\tau}{\hbar}\left|H'_{nm}\right|^2 \delta(E_m - E_n) \qquad (20)$$

الحل: بالإمكان إيجاد P_{km} بالمعادلة (١٧) وذلك لأن H'_{km} مؤثر ثابت ولا يعتمد على الزمن، ومن ثم يمكن إخراجه من التكامل. حيث إن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n يعطى بالعلاقة

$$
\begin{aligned}
P_{mn} &= \left|C_n^{(1)}\right|^2 = \left|-\frac{i}{\hbar}\int_0^{\tau} \langle n|H'|m\rangle e^{i\omega_{nm}t}dt\right|^2 \\
&= \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\left|\int_0^{\tau} e^{i\omega_{nm}t}dt\right|^2 = \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\omega_{nm}\tau}-1}{i\omega_{nm}}\right|^2 \\
&= \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\left|\frac{2e^{i\omega_{nm}\tau/2}}{i\omega_{nm}}\left(\frac{e^{i\omega_{nm}\tau/2}-e^{-i\omega_{nm}\tau/2}}{2}\right)\right|^2 \\
&= \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\frac{\omega_{nm}\tau}{2})}{(\frac{\omega_{nm}}{2})^2} = \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}F(\omega,\tau)
\end{aligned}
$$

حيث استخدمنا $\omega = \frac{\omega_{nm}}{2} = \frac{E_n - E_m}{2\hbar}$. وباستخدام الملحق **16.A** والخاصية $\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$ نجد أن:

$$
\lim_{\tau\to\infty} F(\omega,\tau) \sim \pi\tau\delta(\frac{\omega_{nm}}{2}) = \pi\tau\delta(\frac{E_m - E_n}{2\hbar}) = 2\pi\tau\hbar\delta(E_m - E_n)
$$

ومنها نصل للنتيجة المطلوبة المعرفة بالمعادلة (20).

لنتوقف هنا لنسأل: ماذا نستنتج من المعادلة (20)؟ نستنتج التالي:

١- احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n تزداد بزيادة زمن الاضطراب τ.

٢- من خواص الدالة δ، فإن المعادلة (20) تعني أن الانتقال يحدث بين المستويين m و n فقط. من ثم فإنه لا يحدث أي تغيير في الطاقة الكلية للنظام، بمعنى أن الطاقة الكلية تظل محفوظة.

٣- من الخاصية السابقة نستنتج أن الاضطراب الزمني لا يغير من طاقة النظام الكلية، بمعنى أنه لا يضيف ولا ينقص من طاقة النظام.

ومعدل الانتقال يعطي بالعلاقة:

$$\Gamma_{nm} = \frac{P_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|H'_{nm}\right|^2 \delta(E_m - E_n)$$

وتسمى هذه العلاقة "قاعدة فيرمي الذهبية"

مثال: أوجد احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m الى المستوى النهائي n الناتج من اضطراب صغير توافقي يعطى بالعلاقة:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} 2H_1 \sin(\omega t) & 0 \le t \le \tau \\ 0 & \tau < \text{t} < 0 \end{cases}.$$

حيث H_1 مؤثر هيرميتي لا يعتمد على الزمن.

الحل: قبل أن نبدأ بحل المثال سنقوم بإعادة كتابة الاضطراب بشكل جديد يبسط الحسابات وهو:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} \frac{H_1}{i}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) & 0 \le t \le \tau \\ 0 & \tau < \text{t} < 0 \end{cases}$$

حيث استخدمنا المفكوك $\sin(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$. والآن سعة الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n تحسب كالتالي:

$$C_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\tau \langle n|2H_1 \sin(\omega t)|m\rangle e^{i\omega_{nm}t}dt = -\frac{\langle n|H_1|m\rangle}{\hbar}\int_0^\tau \left[e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right]e^{i\omega_{nm}t}dt$$

$$= -\frac{\langle n|H_1|m\rangle}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{nm}+\omega)\tau} - 1}{\omega_{nm} + \omega} - \frac{e^{i(\omega_{nm}-\omega)\tau} - 1}{\omega_{nm} - \omega}\right]$$

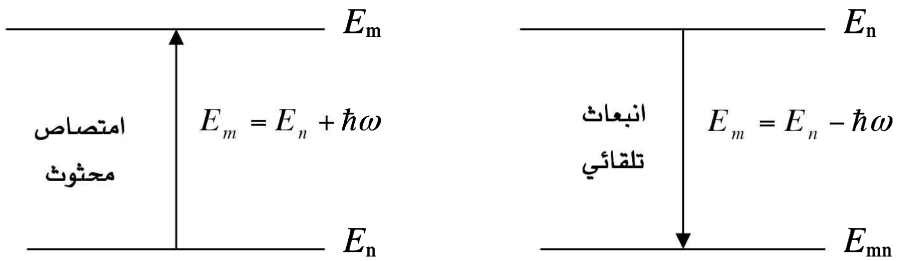
وقد افترضنا سابقاً أن عناصر مصفوفة التفاعل $\langle n|H_1|m\rangle$ صغيرة ومتماثلة، بمعنى أن $\langle m|H_1|n\rangle = \langle n|H_1|m\rangle$. ومن ثم نجد هنا أن سعة الانتقال تبلغ قيماً منفردة (singular) بحالتين اثنتين وهما:

الحالة الأولى: عند امتصاص طاقة كوانتمية absorption a quana of energy

$$\omega_{nm} - \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad E_m = E_n + \hbar\omega$$

الحالة الثانية: عند انبعاث طاقة كوانتمية emission a quana of energy

$$\omega_{nm} + \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad E_m = E_n - \hbar\omega$$



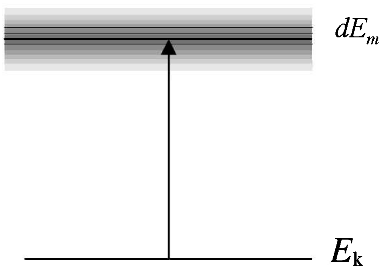
من ثم في الحالة الأولى، أي عند امتصاص طاقة كوانتمية، نجد أن معدل الانتقال (انظر المثال السابق):

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle m|H_1|n\rangle\right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega)$$

والحالة الثانية، أي عند انبعاث طاقة كوانتمية، نجد أن معدل الانتقال:

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle m|H_1|n\rangle\right|^2 \delta(E_m - E_n + \hbar\omega)$$

٢- معدل الانتقال للمستويات المتصلة:



غالباً ينصب اهتمامنا في تجميع معدلات الانتقال للمستويات النهائية القريبة جداً من بعضها البعض. لنفترض مثلاً أن عدد المستويات النهائية القريبة من بعضها لوحدة الطاقة وتسمى كثافة المستويات (density of states) ويعبر عنه بالرمز $\rho(E_m)$. من ثم فإن

$$\Gamma = \sum_{\Delta m} \Gamma_{k\to m} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \left| \langle m | H_1 | k \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_m) \rho(E_m) dE_m$$
$$= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{\left| \langle m | H_1 | k \rangle \right|^2} \rho(E_m) \Big|_{E_m = E_k \pm \hbar\omega}$$

وهي صورة أخرى من صور "قاعدة فيرمي الذهبية". مع ملاحظة أن عناصر المصفوفة $\overline{\left| \langle m | H_1 | k \rangle \right|^2}$ تعبر عن القيمة المتوسطة لجميع المستويات النهائية.

٣- تمارين عامة

١- اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور x بحيث إن:

$$\hat{H}'(t) = -xE(t), \qquad E(t) = \varepsilon e^{-t^2/\tau^2}.$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي $(n = 0)$ في اللحظة $t = -\infty$ ، أثبت أن احتمال أن يكون المتذبذب بالمستوى $n = 1$ في اللحظة $t = \infty$ هو $P_{10} = \dfrac{\pi\tau^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2\tau^2/2}$.

٢- اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور x بحيث إن:

$$\hat{H}'(t) = -qxE(t), \qquad E(t) = \varepsilon \frac{\tau}{t^2 + \tau^2}.$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي $(n = 0)$ في اللحظة $t = -\infty$ ، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوى آخر في اللحظة $t = \infty$. [استخدم التكامل القياسي $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} dt = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega\tau}$]

٣- وضعت ذرة هيدروجين تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور Z بحيث إن:

$$\hat{H}'(t) = -er\cos\theta E(t), \qquad E(t) = \frac{\varepsilon}{\pi}\frac{\tau}{t^2+\tau^2}$$

حيث ε و τ ثوابت. باعتبار أن ذرة الهيدروجين تتواجد بالمستوى الأرضي ($|1,0,0\rangle$) في اللحظة $t=-\infty$ ، أثبت أن احتمال أن يكون ذرة الهيدروجين بالمستوى $|2,1,0\rangle$ في اللحظة $t=\infty$ هو $P_{21} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{a_o^2 e^2 \varepsilon^2 2^{15}}{3^{10}} e^{-2\omega\tau}$. [استخدم $\langle 2,1,0|r\cos\theta|1,0,0\rangle = \frac{a_o 2^7\sqrt{2}}{3^5}$]

٤- جسيم كتلته m يتواجد بجهد أحادي البعد بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x < a \\ \infty & \text{everywhere else} \end{cases}$$

عند بداية الزمن $t = 0$ كان الجسيم بالحالة $\varphi_3(x)$ وتم وضع جهد اضطراب بالشكل:

$$H'(x) = \begin{cases} W_o & \frac{a}{4} \le x < \frac{3a}{4} \\ 0 & \text{everywhere else} \end{cases}$$

احسب احتمالية وجود الجسيم بالحالة $\varphi_1(x)$ عند الزمن T.

الحل: احتمالية وجود الجسيم بالحالة $\varphi_1(x)$ عند الزمن T تحسب من العلاقة:

$$P_{31} = \left|C^{(1)}\right|^2 = \frac{\left|\langle\varphi_1|H'|\varphi_3\rangle\right|^2}{(\hbar\omega_{13})^2} 4\sin^2(\tfrac{\omega_{13}T}{2}), \qquad \omega_{13} = -\frac{8\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$= \frac{m^2 a^4 W^2}{4\pi^6\hbar^4} 4\sin^2(\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}T)$$

٥- جسيم كتلته m يتواجد بالمستوى الأرضي لجهد أحادي البعد بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x < a \\ \infty & \text{everywhere else} \end{cases}$$

إذا تم التأثير على الجسيم باضطراب يعتمد على الزمن بالصورة:

$$H'(x) = C\cos(\frac{\pi x}{a})\delta(t) \qquad t > 0$$

احسب احتمالية وجود الجسيم بالمستوى الأول.

الحل: نعلم أن المستوى الأرضي والمستوى الأول لجسيم متواجد بجهد أحادي البعد هما:

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}x), \qquad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x), \qquad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

من ثم:

$$\hat{H}'_{mk}(t') = \langle\psi_2|H'(x)|\psi_1\rangle$$

$$= \frac{2}{a}C\underbrace{\int_0^a \sin(\frac{2\pi x}{a})\cos(\frac{\pi x}{a})\delta(t')\sin(\frac{\pi x}{a})dx}_{\frac{a}{4}\delta(t')} = \frac{C}{2}\delta(t')$$

وبالنسبة إلى الشروط الأولية لتواجد الجسيم نعرف أن:

$$C_b^{(1)}(-\infty) = 0, \qquad C_a^{(1)}(-\infty) = 1$$

لذلك:

$$C_b^{(1)} = (i\hbar)^{-1}\int_0^{\infty}\frac{C}{2}\delta(t')e^{i\omega_{21}t'}dt' = -\frac{i}{\hbar}\frac{C}{2}e^{i\omega_{21}\times 0} = -\frac{i}{\hbar}\frac{C}{2}$$

ومنها نحصل على احتمالية وجود الجسيم بالمستوى الأول وهي:

$$P = \left|C_b^{(1)}\right|^2 = \frac{C^2}{4\hbar^2}$$

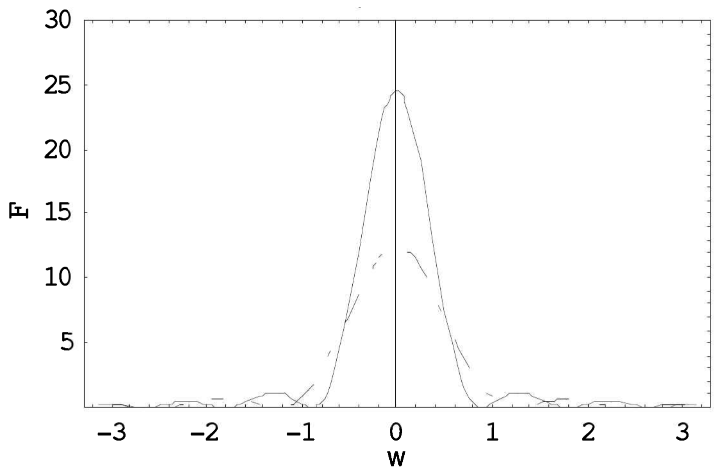
ملحق (16.A)

الدالة المترددة $F(\omega,t)$

تعرف الدالة $F(\omega,t)$ بالمعادلة:

$$F(\omega,t)=\frac{\left|e^{i\omega t}-1\right|^2}{\left|\omega\right|^2}=\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2}=\frac{\sin^2(\frac{\omega t}{2})}{(\frac{\omega t}{2})^2}$$

والرسم التالي يوضح شكل الدالة (عند قيمة ثابتة للزمن)، ومنه يتعين لها الخواص التالية:



الدالة $F(\omega,t)$ لقيم مختلفة للزمن، $F(\omega,7)$ للخط المستمر و $F(\omega,5)$ للخط المتقطع.

١- من الرسم نجد أن الدالة (عند قيمة ثابتة للزمن) يوجد لها قمة حادة حول القيمة $\omega=0$.

٢- ارتفاع القمة يتناسب مع t^2. وتحسب رياضياً كالتالي (باستخدام نظرية ليبنتز للنهايات):

$$\lim_{\omega\to 0}F(\omega,t)=\lim_{\omega\to 0}\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2}=\lim_{\omega\to 0}\frac{t\sin(\omega t)}{2\omega}=\lim_{\omega\to 0}\frac{t^2\cos(\omega t)}{2}=\frac{t^2}{2}$$

٣- عرض الدالة (اتساعها) يتناسب تقريبياً مع $\frac{2\pi}{t}$. هذا ناتج من استخدامنا للشرط:

$$F(\omega,t)=0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\omega t}{2}=n\pi$$
$$\Rightarrow \omega=\frac{2\pi n}{t}, \quad n=1,2,\cdots$$

٤- مساحة المنحني (area under the curve) تتناسب مع:

$$\text{Area} \propto t^2 \times \frac{2\pi}{t} \propto t$$

ومن ثم فإن المساحة تزداد مع الزمن وتكون أكبر مساحة مركزة حول القيمة $\omega=0$.
وعندما يزداد الزمن إلى قيمة لا نهائية، نجد أن الدالة تصبح دالة دلتا $\delta(\omega)$.

٥- باستخدام التعويض $x=\frac{\omega t}{2}$ نجد أن:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega,t)d\omega = t\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx = \pi t$$

حيث استخدمنا التكامل القياسي $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx=\pi$.

٦- من القمة الحادة حول القيمة $\omega=0$ نجد أن هناك تشابهاً مع الدالة دلتا $\delta(\omega)$ ، ومنه نجد:

$$\lim_{t\to\infty} F(\omega,t) \sim \pi t\,\delta(\omega)$$

الباب السابع عشر

تفاعل الإشعاع مع المادة

(Interaction of radiation with matter)

الباب السابع عشر

تفاعل الإشعاع مع المادة

تعاملنا سابقاً مع جسيمات مجهرية، إلكترونات مثلاً، تتحرك في الفراغ أو تتحرك تحت تأثير جهد خارجي ثابت، كولومب أو كهربي أو مغناطيسي. في هذا الباب سوف ندرس تأثير، أو تفاعل، مجال كهرومغناطيسي على الجسيمات، أو المادة.

لدراسة هذا التأثير يوجد عندنا طريقتان للدراسة؛ الأولى: أن نتعامل مع المجال الكهرومغناطيسي بطريقة شبه تقليدية، وذلك باستخدام قوانين ماكسويل، ومنها نحسب معدل الانبعاث والامتصاص. الطريقة الثانية: أصح وأقوى من الأولى، وهي أن نتعامل مع المجال الكهرومغناطيسي ككمات ومنه نحسب معدل الانبعاث والامتصاص. في كلتا الطريقتين يكون الجسم مكمماً. لكننا سوف نستخدم هنا الطريقة الأولى لأنها بسيطة، وتسمى "الطريقة شبه التقليدية".

في حالة تفاعل إلكترون الذرة مع الإشعاع الكهرومغناطيسي التقليدي (غير المكمم) نجد أن الهملتونيان هو:

$$\hat{H} = \hat{H}_m + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau + \hat{V}_{\text{int}} \qquad (1)$$

حيث: H_m هو الهملتونيان للجسيم، $\frac{1}{8\pi}\int\left(E^2+B^2\right)d\tau$ هو الهملتونيان للمجال الإشعاعي، V_{int} يمثل التفاعل بين الإشعاع والمادة.

على سبيل المثال فإن الهملتونيان لإلكترون تقليدي في مجال إشعاعي هو:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} + \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau + V(r) \qquad (2)$$

حيث إن الوصفة التقليدية للحصول على الهملتونيان لجسيم شحنته q في مجال كهرومغناطيسي خارجي يتأتى بوضع $\hat{p} - \frac{q}{c}\hat{A}$ بدلاً من $\hat{p}$، حيث $\hat{A}(\vec{r})$ هو الجهد المتجه و $V(r)$ هو طاقة الوضع للإلكترون.

المعادلة (2) يمكن كتابتها بالشكل:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau - \frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\cdot\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \qquad (3)$$

والتي تكتب كالتالي:

$$\left.\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}, \\ \hat{H}_o &= \hat{H}_m + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau, \\ \hat{H}_m &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\boldsymbol{r}); \\ V_{\text{int}} &= -\frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\cdot\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

هنا سوف نتعامل مع V_{int} على أنه اضطراب يعتمد على الزمن لندرس بواسطته الانتقال بين المستويات المميزة للمؤثر $\hat{H}_o$.

١- الطريقة شبه التقليدية

نبدأ بتبسيط الاضطراب كالتالي:

$$\begin{aligned} V_{\text{int}} &= -\frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\cdot\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \\ &\approx -\frac{e}{mc}\hat{p}\cdot\hat{A} = -\frac{e}{mc}\hat{A}\cdot\hat{p} \end{aligned} \qquad (5)$$

حيث تم إهمال الحد $\frac{e^2}{2mc^2}A^2$ نظراً لصغره، واستخدمنا المتطابقة:

$$\begin{aligned} \hat{p}.\left(\hat{A}\psi\right) &= \left(\hat{p}.\hat{A}\right)\psi + A_i P_i \psi \\ &= -i\hbar\underbrace{\left(\nabla\cdot\hat{A}\right)}_{=0}\psi + \hat{A}\cdot\left(\hat{p}\psi\right) \\ &= \hat{A}\cdot\left(\hat{p}\psi\right) \end{aligned} \qquad (6)$$

وذلك باستخدام مقياس كولومب وهو $\nabla\cdot\vec{A}=0$.

دعونا نفترض أن المستويان الابتدائي والنهائي لذرة يعرفان بالشكل $\left|i\right\rangle$ و $\left|f\right\rangle$، بالترتيب. لذلك نستطيع أن نكتب عناصر مصفوفة الانتقال بأي من الشكلين التاليين:

$$\left\langle f\left|V_{\text{int}}\right|i\right\rangle=-\frac{e}{mc}\left\langle f\left|\hat{p}\cdot\hat{A}\right|i\right\rangle \qquad \text{for absorption} \qquad (7.a)$$

$$=-\frac{e}{mc}\left\langle f\left|\hat{A}\cdot\hat{p}\right|i\right\rangle \qquad \text{for emission} \qquad (7.b)$$

تعليق: بالرغم من أن المعادلتين تعدان مبدئياً متشابهتان، ولكن المعادلة الأولى تصف حالة امتصاص الأشعة، والثانية تصف انبعاثها. المعادلة الأولى يمكن اعتبار أن $\hat{A}\left|i\right\rangle$ يمثل المستوى الابتدائي (يصف حالة الإشعاع مع الذرة) و $\left\langle f\right|$ هو المستوى النهائي و $-\frac{e}{mc}\hat{p}$ هو المؤثر المسئول عن الانتقال. بالمثل، يمكن وصف المعادلة الثانية كالتالي: يمكن اعتبار أن $\left\langle f\right|\hat{A}$ يمثل المستوى النهائي (يصف حالة الإشعاع مع المستوى النهائي للذرة) و $\left|i\right\rangle$ هو المستوى الابتدائي و $-\frac{e}{mc}\hat{p}$ هو المؤثر المسئول عن الانتقال.

٢- حساب الجهد المتجهي $\hat{A}$

نفترض أن الجهد المتجهي يأخذ الشكل:

$$\hat{A}=\hat{e}\,A_o\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t) \qquad (8)$$

حيث $\hat{e}$ يمثل متجه الوحدة (اتجاه الاستقطاب) باتجاه $\hat{A}$، و $\boldsymbol{k}=\frac{\omega}{\mathbf{c}}\hat{k}$. $\hat{k}$ تمثل متجه الوحدة باتجاه انتشار الإشعاع. باستخدام مقياس كولومب $\nabla\cdot\vec{A}=0$ يتحقق الشرط:

$$\hat{e}\cdot\boldsymbol{k}=0 \qquad (9)$$

وهذا يعني أن متجه الوحدة $\hat{e}$ يكون متعامداً على اتجاه انتشار الإشعاع.

نستطيع أيضاً حساب المجال الكهربي من العلاقة:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\frac{\omega}{c}\hat{e}\, A_o \sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \tag{10}$$

وأيضاً كثافة الطاقة (الطاقة لوحدة الحجوم) تعرف بالعلاقة:

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{\frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau}{V} = \frac{1}{8\pi}\left(E^2 + B^2\right) \\ &= \frac{E^2}{4\pi}, \qquad\qquad |E| = |B| \\ &= \frac{\omega^2 A_o^2}{4\pi c^2}\sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

ومنها نجد أن كثافة الطاقة المتوسطة هي:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\omega^2 A_o^2}{4\pi c^2}\underbrace{\left\langle \sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)\right\rangle}_{\frac{1}{2}} = \frac{\omega^2 A_o^2}{8\pi c^2} \tag{12}$$

لكن لفوتون وحيد يوجد بالحجم V، نعلم أن:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\hbar\omega}{V} \tag{13}$$

بمساواة المعادلتين (١٢) أو (١٣) نحصل على القيمة القياسية:

$$A_o = \left[\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2} \tag{14}$$

ومنها نجد:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{e}\left[\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2} \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \\ &= \hat{e}\left[\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2} \left\{e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)} + e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)}\right\} \end{aligned} \tag{15}$$

من العلاقات السابقة نجد أن السعة الاحتمالية للانتقال من المستوى الابتدائي $\left|i\right\rangle$ إلى المستوى النهائي $\left|f\right\rangle$ يعطى بالمعادلة:

$$C_{fi} = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f|V_{\text{int}}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t}dt; \qquad (16)$$

حيث $\omega_{fi} = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$ و

$$\langle f|V_{\text{int}}|i\rangle = -\frac{e}{mc}\left[\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2}\left\{\langle f|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i\omega t} + \langle f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{i\omega t}\right\} \qquad (17)$$

وبإجراء التكامل على الزمن في المعادلة (16) نحصل على:

$$C_{fi} = \frac{i}{\hbar}\frac{e}{m}\left[\frac{2\pi\hbar}{\omega V}\right]^{1/2}\left\{\langle f|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega-\omega_{fi})t/2}\frac{\sin[(\omega-\omega_{fi})t/2]}{(\omega-\omega_{fi})t/2} + \langle f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega+\omega_{fi})t/2}\frac{\sin[(\omega+\omega_{fi})t/2]}{(\omega+\omega_{fi})t/2}\right\} \qquad (18)$$

بالمعادلة (18)، عندما يأخذ الزمن $t \to \infty$ فإن الحد الأول يأخذ قيم عظمى حول القيمة $\omega = \omega_{fi}$ والحد الثاني يأخذ قيم عظمى حول القيمة $\omega = -\omega_{fi}$. من الواضح أنه في حالة الامتصاص يكون $E_f > E_i$ و $\omega_{fi} > 0$ ؛ من ثم يصبح الحد الأول معبراً عن حالة الامتصاص والحد الثاني يكون منعدماً. في حالة الانبعاث يكون $E_f < E_i$ و $\omega_{fi} < 0$ ؛ من ثم يصبح الحد الثاني معبراً عن حالة الانبعاث، والحد الأول يكون منعدماً

دعونا الآن نعتبر حالة انبعاث الإشعاع من الذرة، لذلك:

$$C_{fi} = \frac{i}{\hbar}\frac{e}{m}\left[\frac{2\pi\hbar}{\omega V}\right]^{1/2}\langle f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega+\omega_{fi})t/2}\frac{\sin[(\omega+\omega_{fi})t/2]}{(\omega+\omega_{fi})t/2}$$

أو

$$C_{fi}=\frac{i}{\hbar}\frac{e}{m}\left[\frac{2\pi\hbar}{\omega V}\right]^{1/2}\left\langle f\left|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}\right|i\right\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega-\omega_{if})t/2}\frac{\sin\left[\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2\right]}{\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2};$$
$$\omega_{if}=\frac{E_i-E_f}{\hbar}$$

٣- تقريب ثنائي القطب

الحد $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ يلعب دوراً أساسياً في مصفوفة الانتقال، ولكن من الصعب حساب قيم المصفوفة بهذا الحد في هذه الصورة. لذلك نلجأ إلى التقريب

$$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=1-i\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\frac{\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right)^2}{2!}+\cdots$$
$$\approx 1$$

ويسمى تقريب "*ثنائي القطب الكهربائي*". وقد تم إهمال الحدود العليا من المتسلسلة وذلك من معرفتنا بأبعاد الذرة التي تكون بحدود القيمة $r \sim 10^{-8}$ cm والطول الموجي للضوء المرئي يكون:

$$k\left(=\frac{2\pi}{\lambda}\right)\sim 10^{5}\ \text{cm}^{-1}$$

من ثم في مدى التكامل يكون $kr << 1$ ، ويمكن استخدام التقريب:

$$\left\langle f\left|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}\right|i\right\rangle\approx\left\langle f\left|\hat{\boldsymbol{p}}\right|i\right\rangle$$

مثال: أثبت أن $\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{H}_0\right]$ حيث $\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(\boldsymbol{r})$.

الحل: بفرض أن المستويين $\left|i\right\rangle$ و $\left|f\right\rangle$ هما مستويات مميزة للهملتونيان $\hat{H}_o$ ، بمعنى أن:

$$\hat{H}_o\left|f\right\rangle=E_f\left|f\right\rangle;$$
$$\hat{H}_o\left|i\right\rangle=E_i\left|i\right\rangle$$

نجد أن:

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{x},\hat{H}_0\right] &= \left[\hat{x},\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m}+\hat{V}(\boldsymbol{r})\right] \\
&= \frac{1}{2m}\left[\hat{x},\hat{p}_x^2\right]+\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\hat{x},\hat{p}_y^2\right]}_{=0}+\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\hat{x},\hat{p}_z^2\right]}_{=0}+\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\hat{x},\hat{V}(\boldsymbol{r})\right]}_{=0} \\
&= \frac{1}{2m}\left\{\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\hat{p}_x+\hat{p}_x\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\right\} \\
&= \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x
\end{aligned}
$$

من هنا نستنتج أن:

$$
\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{H}_0\right]
$$

مثال: أثبت أن $\langle f|\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle = \frac{m}{i}\omega_{if}\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle$.

الحل: من المثال السابق نستطيع تبسيط المصفوفة $\langle f|\boldsymbol{p}|i\rangle$ كالتالي:

$$
\begin{aligned}
\langle f|\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle &= \frac{m}{i\hbar}\left\langle f\left|\left[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{H}_0\right]\right|i\right\rangle = \frac{m}{i\hbar}\left\langle f\left|\hat{\boldsymbol{r}}\hat{H}_0-\hat{H}_0\hat{\boldsymbol{r}}\right|i\right\rangle \\
&= \frac{m}{i\hbar}\left\{E_i\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle - E_f\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\right\} \\
&= \frac{m}{i\hbar}\left(E_i-E_f\right)\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle \\
&= \frac{m}{i}\omega_{if}\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle
\end{aligned}
$$

تعليق: من هذا المثال نجد أنه قد تم تحويل المؤثر التفاضلي $\hat{\boldsymbol{p}}$ إلى مؤثر المسافة $\hat{\boldsymbol{r}}$ ، ويرتبط الأخير بعزم ثنائي القطب $\vec{\mu} = q\vec{r}$.

أخيراً نجد أن:

$$
C_{fi} = e\omega_{if}\left[\frac{2\pi}{\omega\hbar V}\right]^{1/2}\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega-\omega_{if})t/2}\frac{\sin\left[\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2\right]}{\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2}
$$

و

$$\left|C_{fi}\right|^2 = \left(e\,\omega_{if}\right)^2 \left[\frac{2\pi}{\omega\hbar V}\right] \left|\langle f\,|\hat{\boldsymbol{r}}|\,i\rangle\cdot\hat{e}\right|^2 \frac{\sin^2\left[\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2\right]}{\left[\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2\right]^2}$$

أو

$$\left|C_{fi}\right|^2 = \left(e\,\omega_{if}\right)^2 \left[\frac{2\pi}{\omega\hbar V}\right] \left|\langle f\,|\hat{\boldsymbol{r}}|\,i\rangle\cdot\hat{e}\right|^2 2\pi\hbar t\,\delta\left[E-(E_i-E_f)\right]$$

حيث استخدمنا نتائج الباب السابق. من المعادلة الأخيرة نجد أن الاحتمالية لوحدة الزمن للانبعاث الإشعاعي هي:

$$\Gamma = \frac{\left(2\pi e\right)^2\omega}{V}\left|\langle f\,|\hat{\boldsymbol{r}}|\,i\rangle\cdot\hat{e}\right|^2\rho(E)$$

حيث $\rho(E)$ هي كثافة المستويات النهائية، التي تعبر عن الفوتون المنبعث و

$$E = E_i - E_f = \hbar\omega$$

٤- كثافة المستويات

إذا اعتبرنا الزاوية المجسمة $d\Omega$، فإن عدد المستويات dn التي يكون فيها تردد الفوتون بين ω و $\omega+d\omega$ تكون:

$$dn = \frac{V}{\left(2\pi\hbar\right)^3}p^2\,dp\,d\Omega = \frac{V}{\left(2\pi c\right)^3}\omega^2\,d\omega\,d\Omega$$

حيث استخدمنا العلاقات:

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$$

و V هو حجم الصندوق. لذلك:

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{V\,\omega^2}{\left(2\pi c\right)^3\hbar}\,d\Omega$$

ومنها نجد:

$$\Gamma = \frac{(2\pi e)^2 \omega}{V} \left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 \frac{V \omega^2}{(2\pi c)^3 \hbar} d\Omega$$
$$= \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 d\Omega$$

نلاحظ هنا أن $\hat{e}$ متجه يعبر عن استقطاب الإشعاع. من ثم إذا أردنا أن نحسب الاحتمال الكلي للانتقال الإشعاعي يجب أن نجمع قيمة الاستقطابين ونكامل على الزاوية المجسمة. اعتبر أن اتجاه $\boldsymbol{k}$ هو $\hat{z}$، لذلك فإن المتجه $\hat{e}$ يأخذ الاتجاه $\hat{x}$ أو $\hat{y}$. لذلك إذا تم تجميع $\left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2$ لاتجاهي الاستقطاب نحصل على:

$$\left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 = \left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \cdot \hat{x} \right|^2 + \left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \cdot \hat{y} \right|^2$$
$$= p_x^2 + p_y^2 = p^2 - p_z^2 = p^2 - p^2 \cos^2 \theta$$
$$= p^2 \sin^2 \theta$$

حيث عرفنا $\hat{\boldsymbol{p}} \equiv \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle$ وتسمى مصفوفة انتقال ثنائي القطب و θ هي الزاوية بين p والمحور z. أخيراً بالتكامل على الزاوية المجسمة نحصل على:

$$\Gamma = \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left| \langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle \right|^2 \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$
$$= \frac{4}{3} \alpha \frac{\omega^3}{c^2} |\hat{\boldsymbol{r}}_{fi}|^2 = \frac{4}{3} \alpha \frac{\omega^3}{c^2} \left\{ |x_{fi}|^2 + |y_{fi}|^2 + |z_{fi}|^2 \right\}, \qquad |x_{fi}|^2 \equiv \left| \langle f | x | i \rangle \right|^2$$

و $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ هو ثابت التركيب الدقيق.

٥- قواعد الاختيار لمصفوفة انتقال ثنائي القطب

تم سابقاً، في تأثير "شتارك"، التحدث عن قواعد الاختيار. وعلى نفس الخطوات سوف نشتق قواعد الاختيار لمصفوفة انتقال ثنائي القطب $\langle f | \hat{\boldsymbol{r}} | i \rangle$. دعونا نأخذ اتجاه استقطاب ثنائي القطب باتجاه المحور Z. باعتبار الأعداد الكمية ℓ_1, m_1 و ℓ_2, m_2 تمثل المستوى الابتدائي i والنهائي f بالترتيب.

باستخدام الجزء الزاوي بالمستوى الابتدائي والنهائي دالة في الدالة التوافقية الكروية بالصورة:

$$z = r\cos\theta = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}$$

بحيث نجد أن التكامل الزاوي بمصفوفة انتقال ثنائي القطب $\langle 2|z|1\rangle$ يأخذ الشكل:

$$\int Y^*_{\ell_2,m_2}Y_{1,0}Y_{\ell_1,m_1}d\Omega$$

نجد أن التكامل ينعدم إلا إذا تحقق الشرط:

$$\ell_2 = |\ell_1 - 1| \text{ or } \ell_1 + 1 \Rightarrow \underline{\Delta\ell = \pm 1};$$
$$m_1 = m_2 \Rightarrow \underline{\Delta m = 0}$$

إذا افترضنا أن اتجاه استقطاب ثنائي القطب باتجاه المحور X فإننا نتعامل مع تكامل بالصورة $\langle 1|x|2\rangle$ ولكن من الأفضل استخدام الصورة $\langle 1|x+iy|2\rangle$ حيث:

$$x + iy = r\sin\theta e^{\pm i\varphi} \propto Y_{1,\pm 1}$$

من ثم فإن التكامل الزاوي بمصفوفة انتقال ثنائي القطب يأخذ الشكل:

$$\int Y^*_{\ell_2,m_2}Y_{1,\pm 1}Y_{\ell_1,m_1}d\Omega$$

ومنه نجد أن التكامل ينعدم إلا إذا تحقق الشرط:

$$\ell_2 = |\ell_1 - 1| \text{ or } \ell_1 + 1 \Rightarrow \underline{\Delta\ell = \pm 1};$$
$$\underline{\Delta m = \pm 1}$$

من هنا نستطيع أن نضع قواعد الاختيار العامة لمصفوفة انتقال ثنائي القطب $\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle$ وهي:

$$\Delta\ell = \pm 1;$$
$$\Delta m = 0, \pm 1$$

من ثم فإن الانتقال يجب أن يكون مصحوباً بتغير في الندية. مثال على ذلك: إلكترون بالمستوى $2P$ ، ذي الندية الفردية، مسموح له الانتقال إلى المستوى $1S$ ، ذي الندية الزوجية. بالطبع يوجد احتمالية للانتقال إلى المستوى $2S$ ولكن ذلك ضعيف جداً

مقارنةً بالانتقال $2P \rightarrow 1S$. الانتقال من المستوى $2S$ إلى المستوى $1S$ غير مسموح به ويسمى انتقال محرم (Forbidden transition).

الانتقال المحرم ليس محرماً قطعياً، بمعنى أنه يمكن حدوثه، ولكن بمعدل ضعيف جداً بالنسبة للانتقال المسموح، تبعاً لتقريب ثنائي القطب الكهربي. بعد تقريب ثنائي القطب الكهربي، يأتي انتقال ثنائي القطب المغناطيسي (Magnetic dipole transition) الناتج من تفاعل مغزل الإلكترون مع المركبة المغناطيسية المتذبذبة للإشعاع الكهرومغناطيسي الساقط. حدوث الانتقال ثنائي القطب المغناطيسي يقل بمقدار 10^{-5} عن انتقال ثنائي القطب الكهربي. بعد ذلك يظهر انتقال رباعي القطب الكهربي (Electric quadrupole transitions) ولكن يقل بمقدار 10^{-8} عن انتقال ثنائي القطب الكهربي. لانتقالات ثنائي القطب المغناطيسي و رباعي القطب الكهربي تظهر بعض قواعد الاختيار الأخرى، بحيث إنه إذا انعدم الانتقال تبعاً لتقريب ثنائي القطب الكهربي فإنه يمكن أن يكون مسموحاً تبعاً لتقريب رباعي القطب الكهربي.

مثال: احسب زمن العمر (Life-time) لإلكترون بالمستوى $2P$ لذرة الهيدروجين.

الحل: المستوى $2P$ له $m_\ell = 0, \pm 1, \ell = 1$ والانتقال التلقائي المسموح به، والعالي الاحتمالية، هو الانتقال $2P \rightarrow 1S$ حيث المستوى $1S$ له $m_\ell = 0, \ell = 0$.

لحساب المصفوفة $|r_{fi}|^2$ نعرف الدوال المميزة للمستويين، وهما:

$$|i\rangle \equiv |2P\rangle = R_{21} Y_{1,m}; \qquad R_{21} = \left(\frac{Z}{2a_o}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_o\sqrt{3}} e^{-\frac{Zr}{2a_o}};$$

$$|f\rangle \equiv |1S\rangle = R_{10} Y_{0,0}; \qquad R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_o}}$$

نحتاج الآن إلى عناصر مصفوفة ثنائية القطب وهي x_{fi}، y_{fi} و z_{fi}. لحسابهما سوف نستخدم التعريفات التالية:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}r\left(-Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right);$$

$$x = r\sin\theta\sin\varphi = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}r\left(Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right);$$

$$z = r\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,0}$$

واجب منزلي: تحقق من نتيجة التكامل القطري التالي:

$$\int_0^\infty R_{10}^* r^3 R_{21} dr = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^4 \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3Zr}{2a_o}} dr$$

$$= 4\sqrt{6}\left(\frac{2}{3}\right)^5 \frac{a_o}{Z}$$

أما التكاملات التي تعتمد على الزاوية فيمكن حسابها لكل حد على حدة كالتالي:

أ- للحد x_{fi}

$$\int Y_{0,0}^*\left(-Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right)Y_{1,m}d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\left(Y_{1,-1}^* - Y_{1,1}^*\right)Y_{1,m}d\Omega$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(-\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}\right)$$

ب- للحد y_{fi}

$$\int Y_{0,0}^*\left(Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right)Y_{1,m}d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\left(Y_{1,-1}^* + Y_{1,1}^*\right)Y_{1,m}d\Omega$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}\right)$$

ج- للحد z_{fi}

$$\int Y_{0,0}^*\left(Y_{1,0}\right)Y_{1,m}d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\left(Y_{1,0}^*\right)Y_{1,m}d\Omega$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\delta_{m,0}\right)$$

باستخدام التكامل القياسي $\int_0^\infty e^{-ar} r^n dr = \dfrac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}$ ، نجد:

$$x_{fi} = \frac{1}{6a_o^4}\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_o}} dr\left(-\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right) = 4\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_o\left(-\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right);$$

$$y_{fi} = -\frac{i}{6a_o^4}\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_o}} dr\left(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right) = -4i\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_o\left(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right);$$

$$z_{fi} = \frac{1}{3\sqrt{2}a_o^4}\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_o}} dr\left(\delta_{m,0}\right) = 4\sqrt{2}\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_o\left(\delta_{m,0}\right)$$

من السهل التحقق من أنه لكل حالة من الحالات $m = 0, \pm 1$ فإن المجموع $|x_{fi}|^2 + |y_{fi}|^2 + |z_{fi}|^2$ هو نفسه ويساوي $2^5\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_o}{Z}\right)^2$. من هنا نجد أن المعدل هو (مع اعتبار أن جميع القيم للحالات m متساوية الاحتمال)

$$\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{4}{3}\alpha\frac{\omega^3}{c^2}|\boldsymbol{r_{fi}}|^2 = \frac{2^7}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_o}{Z}\right)^2\alpha\frac{\omega^3}{c^2}\left\{\delta_{m,0}+\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right\}$$

إذا كان المستوى الابتدائي $2P$ غير مستقطب (بمعنى أنه لا يأخذ اتجاه معين) فيجب أن نحسب المتوسط للنتيجة النهائية، على قيم m. حيث إن التجميع هنا لا يعتمد على m ماعدا كرونكر دلتا، وحيث إن:

$$\frac{1}{3}\sum_m\left\{\delta_{m,0}+\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right\} = 1$$

فإننا نحصل على:

$$\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{2^7}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_o}{Z}\right)^2\alpha\frac{\omega^3}{c^2}$$

لكن

$$\left(\hbar\omega\right)_{2P\to 1S} = E_{2P} - E_{1S} = \left[\frac{1}{2\times 2^2}-\frac{1}{2}\right]\frac{Z^2e^2}{a_o} = \frac{3}{8}\frac{Z^2e^2}{a_o};$$

حيث $a_o = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$.بعد أن نقوم بتبسيط القيم نحصل على:

$$\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{2^7}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^8 \frac{m\,e^{10}}{c^3\,\hbar^6} Z^4 \approx 6\times 10^8 Z^4 \ \mathrm{s}^{-1}$$

و

$$\tau = 1/\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{2^7}{3}\left(\frac{3}{2}\right)^8 \left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^3 \frac{\hbar^3}{m\,e^4} \approx 1.6\times 10^{-9} Z^{-4} \ \mathrm{s.}$$

وتتطابق هذه النتيجة مع القيم العملية لهذا الانتقال.

تعليق: الانبعاث التلقائي هنا يكون له عرض محدد لخطوط الطيف، حيث يمكن حسابه من مبدأ عدم اليقين وهو $\Delta E \sim \dfrac{\hbar}{\tau}$. عملياً فإن عرض خطوط الطيف تكون أكبر من حساباتنا النظرية وذلك ناتج عن عدة عوامل منها: ظاهرة "دوبلر"، والتصادمات، والتفاعل مع الذرات المحيطة والقريبة.

ملحق (17.A)

حركة جسيم في مجال كهرومغناطيسي

في هـذا الملحـق سـوف نـشتق صـيغة للـهملتونيان لجـسيم يتحـرك في مجـال كهرومغناطيسي.

أ- تكوين الهملتونيان

افرض أنَّ جسيماً نقطياً كتلته m ، وشحنته q ، يتحرك في مجال كهرومغناطيسي خارجي. القوة الكلية المؤثرة على الجسيم تعطى بتعبير "لورنتز" بالشكل:

$$\vec{F} = q[\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}] \qquad (1)$$

حيث $\vec{E}$ و $\vec{B}$ هما شدة المجال الكهربي والمغناطيسي بالترتيب و $\vec{v}$ هي سرعة الجسيم. المجالان الكهربي والمغناطيسي يحققان معادلات "ماكسويل" التي تأخذ الصور التالية، وذلك باستخدام نظام "جاوس":

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \qquad (2.a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\,\rho, \qquad (2.b)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}, \qquad (2.c)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \qquad (2.d)$$

حيث $\vec{j}$ هي شدة التيار و ρ هي كثافة الشحنات. من المعادلة $(2.d)$ والمتطابقة $\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\right) = 0$ ، حيث $\vec{A}$ سوف يدعى الجهد المتجهي، نجد أن $\vec{B}$ يمكن التعبير عنها بدلالة المتجه $\vec{A}$ بالصورة:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \qquad (3)$$

مثال: من المعادلة (٣) نجد أن المعادلة $(2.a)$ تحتفظ بصورتها العامة ولا تتغير، بمعنى أن:

$$\vec{\nabla}\times\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}=\vec{\nabla}\times\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)=\vec{\nabla}\times\left(\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right)=0$$

من المعادلة $(2.a)$ واستخدام المتطابقة $\vec{\nabla}\times(\nabla\varphi)=0$ ، حيث φ يدعى الجهد القياسي، نستطيع وضع شدة المجال الكهربي $\vec{E}$ بالشكل:

$$\vec{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\nabla\varphi \qquad (4)$$

. بمعرفة الجهدين $\vec{A}$ و φ نجد أن قوة "لورنتز" تأخذ الشكل:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt}=\vec{F}=q\left[-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\nabla\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\times\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)\right] \qquad (5)$$

باستخدام التعريف:

$$\begin{aligned}\left(\vec{v}\times\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)_x&=v_y\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)-v_z\left(\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\\&=\frac{\partial}{\partial x}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)-\frac{dA_x}{dt}+\frac{\partial A_x}{\partial t}\end{aligned} \qquad (6)$$

حيث استخدمنا العلاقة:

$$\frac{dA_x}{dt}=\frac{\partial A_x}{\partial t}+\left(v_x\frac{\partial A_x}{\partial x}+v_y\frac{\partial A_x}{\partial y}+v_z\frac{\partial A_x}{\partial z}\right) \qquad (7)$$

لذلك نجد أن القوة في اتجاه المحور x تأخذ الشكل:

$$F_x=m\frac{dv_x}{dt}=q\left[-\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}-\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \qquad (8)$$

أو بشكل آخر:

$$\frac{d}{dt}\left(mv_x+\frac{q}{c}A_x\right)=q\frac{\partial}{\partial x}\left[-\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \qquad (9)$$

بالطبع يمكن استنتاج معادلات شبيهة بالمعادلة السابقة في الاتجاهين y و z .
المعادلات الثلاث يمكن وضعهنّ بالشكل المبسط المتجهي التالي:

$$\frac{d}{dt}\left(m\vec{v}+\frac{q}{c}\vec{A}\right)=q\nabla\left[-\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \qquad (10)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial v_j}\left[-q\varphi+\frac{q}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right]\right)=\nabla\left[-q\varphi+\frac{q}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \qquad (10a)$$

المعادلة السابقة يمكن وضعها في صورة "لاجرانجيان" التي هي بالشكل:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}\right)=\frac{\partial L}{\partial x_j}; \qquad j\equiv 1,2,3 \qquad (11)$$

حيث L هو "لاجرانجيان" الذي يعرف من المعادلات السابقة بالمعادلة:

$$L=\frac{1}{2}m\vec{v}\cdot\vec{v}-q\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{A}\cdot\vec{v}\right) \qquad (12)$$

وكمية الحركة المرافقة تعطى بالشكل:

$$p_x=\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=mv_x+\frac{q}{c}A_x$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{p}=m\vec{v}+\frac{q}{c}\vec{A}} \qquad (13)$$

ويصبح الهملتونيان التقليدي بالشكل:

$$\begin{aligned} H &= \vec{p}\cdot\vec{v}-L \\ &= \vec{p}\cdot\left[\frac{1}{m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)\right]-\frac{m}{2}\left[\frac{1}{m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)\right]^2+q\varphi-\frac{q}{mc}\vec{A}\cdot\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right) \\ &= \frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\varphi \end{aligned} \qquad (14)$$

تدل المعادلة (١٤) على الهملتونيان للحركة غير النسبية لجسيم مشحون في مجال كهرومغناطيسي يتأتى بوضع $\hat{p}-\frac{q}{c}\hat{A}$ بدلاً من $\hat{p}$. أخيراً نستطيع التحويل من الصيغة التقليدية إلى الصيغة الكمية بتحويل المتغيرات إلى مؤثرات لنحصل على:

$$\boxed{\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\varphi} \tag{15}$$

ب- حركة جسيم مشحون في مجال كهرومغناطيسي ثابت

في حالة حركة جسيم، كتلته m وشحنته q، في مجال كهرومغناطيسي ثابت نجد أن الزمن يظهر بمعادلة شرودنجر خلال الحد $e^{-iEt/\hbar}$، وتصبح معادلة شرودنجر كالتالي:

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2\psi+q\varphi\psi=E\psi \tag{1}$$

أو

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{iq\hbar}{2mc}\left[\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)\psi+\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi\right]+\frac{q^2}{2mc^2}A^2\psi+q\varphi\psi=E\psi \tag{2}$$

باستخدام المتطابقة:

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{A}\psi\right)=\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)\psi+\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi \tag{3}$$

وباعتبار المجال المغناطيسي منتظم (متماثل) فإن هذا المجال يمكن التعبير عنه بالجهد المتجهي:

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\left(\vec{B}\times\hat{r}\right) \tag{4}$$

واجب منزلي: تحقق من الحسابات التالية:

$$1-\ \vec{\nabla}\times\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{\nabla}\times\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{r}\right)\vec{B}-\left(\vec{B}\cdot\vec{\nabla}\right)\vec{r}\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left[3\vec{B}-\vec{B}\right]=\vec{B} \tag{5}$$

$$2-\ \vec{\nabla}\cdot\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{B}\times\hat{r}\right)=\frac{1}{2}\left[\hat{r}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\vec{B}\right)-\vec{B}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\hat{r}\right)\right]=0 \tag{6}$$

$$3-\ \frac{iq\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi=\frac{iq\hbar}{2mc}\left(\vec{B}\times\hat{r}\right)\cdot\vec{\nabla}\psi=-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\left\{\vec{r}-i\hbar\vec{\nabla}\right\}\psi$$

$$=-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\left\{\underbrace{\vec{r}\times\vec{p}}_{\vec{L}}\right\}\psi$$

$$=-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{L}\,\psi \qquad (7)$$

من الواجب المنزلي السابق نجد أن معادلة شرودنجر تبسط إلى:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{L}\,\psi+\frac{q^2}{8mc^2}\left(\vec{B}\times\hat{r}\right)^2\psi+q\varphi\psi=E\psi \qquad (8)$$

من معلوماتنا السابقة، نعلم أن طاقة الوضع لعزم ثنائي القطب $\vec{\mu}$ في مجال خارجي متماثل يعطى بالعلاقة:

$$U=-\vec{\mu}\cdot\vec{B} \qquad (9)$$

من ثم فإن الحد الثاني بمعادلة شرودنجر يمكن وصفه على أنه طاقة التفاعل المغناطيسية مع عزم ثنائي القطب $\vec{\mu}$، حيث

$$\vec{\mu}=\frac{q}{2mc}\vec{L} \qquad (10)$$

من السهل تفهم هذا التعريف تقليدياً إذا افترضنا الجسيم يتحرك بسرعة v في مسار دائري نصف قطره r. لذلك فإن كمية الحركة الزاوية للجسيم تعرف بالمعادلة $L=mvr$. الشحنة المتحركة ينشأ عنها تيار يعرف بالقيمة وينساب في حلقة مساحتها πr^2. لهذا فإن هذا التيار يلازمه عزم ثنائي القطب وهو:

$$\mu=\frac{I}{c}\pi r^2=\frac{qv}{2\pi rmc}\pi r^2=\frac{q}{2mc}L \qquad (11)$$

وهو نفس القانون المشتق سابقاً، المعادلة (١٠)، بواسطة ميكانيكا الكم.

الحد الثالث من معادلة شرودنجر لها أيضاً تفسير فيزيائي ولكن يتطلب بعض المصطلحات الخارجة عن نطاق هذا الكتاب. عامةً في معظم المسائل الفيزيائية يكون

المجال المغناطيسي الخارجي صغير بحيث نستطيع أن نحتفظ بالحد الخطي للمجال وهو $\vec{B}$ ونُهمل حدود المجال ذي القوى التربيعية.

الباب الثامن عشر

نظرية التشتت

(Scattering Theory)

الباب الثامن عشر

نظرية التشتت

إلى الآن لم نطّبق ميكانيكا الكم إلا على مسائل الحالات المقيدة، حيث إن $(E < 0)$. والأمثلة على ذلك عديدة، مثل جسيم في بئر جهد، ذرة الهيدروجين، المتذبذب التوافقي، $\cdots$. ونحن الآن بصدد تطبيق نظرية ميكانيكا الكم على الحالات التي تعرف فيها الطاقة الكلية للنظام ككمية موجبة من البداية، مثال على ذلك ظاهرة التشتت.

تحدث ظاهرة التشتت، بمعنى تغير المسار، للجسيم عند تصادمه بجسيم آخر ثابت، يمكن اعتباره حائلاً أو هدفاً. وينقسم التشتت إلى نوعين رئيسين. النوع الأول: التشتت المرن (elastic collision) ، الذي يحدث عندما لا يتغير كنه الجسيم القادم أو خواصه الداخلية، وفيه تتساوى السرعتان الابتدائية والنهائية، ويظل الحائل بدون تغير أيضاً. والنوع الثاني: التشتت غير المرن (inelastic collision) وفيه تحدث تغيرات إما بالجسيم القادم (كتغير السرعة النهائية عن الابتدائية)، أو بالحائل أو بكليهما.

وتعد دراسة التشتت من أكثر المواضيع التي تلقى اهتماماً بالغاً في الأبحاث المعملية والنظرية؛ لأنها تعطي معلومات عن مكونات أو تفاعل المواد (ذرية-نووية-جزيئية ...الخ) مع بعضها البعض. ونود أن نذكر هنا بعض التجارب التي غيرت من نظرتنا للتركيب الدقيق للمادة، وهي:

١- تجربة راذرفورد لتشتت جسيمات- α بالنواة التي أدت إلى فرض وجود النواة بالذرة. وأدت هذه التجربة إلى تطوير نموذج بوهر للذرة وأيضاً ميكانيكا الكم.

٢- تشتت النيكلونات (البروتونات والنيترونات) ذات الطاقات المختلفة من أنوية الذرات أدى إلى زيادة معلوماتنا بمدى شدة القوى النووية المختلفة.

٣- تشتت الإلكترونات ذات السرعات العالية من الأنوية والنيكلونات ساعد في تعيين توزيع الشحنات في الأنوية وحتى النيكلونات.

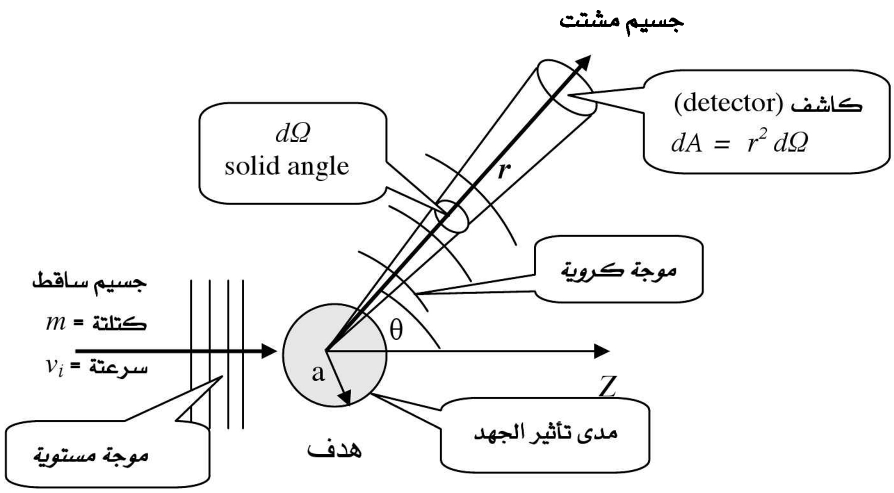
٤- تشتت النيترونات من الأنوية أظهر الخواص المغناطيسية للأنوية.

يوجد عدة طرق نظرية لدراسة ظاهرة التشتت، سوف نستعرض منها طريقتين فقط. الأولى: هي التقريب الأول لبورن (Born) ، والثانية: هي تحليل الموجات الجزئية.

وقبل أن نبدأ دراسة ظاهرة التشتت بتعمق، دعونا نضع بعض الفروض، وذلك لتبسط الأمر فقط، وهي:

- سوف نقوم بدراسة التشتت المرن فقط.
- لن نأخذ في الاعتبار الحركة المغزلية للجسيم الساقط أو أي جسيم بالهدف.
- أن يكون الهدف رقيقاً جداً بحيث يمكن إهمال التشتت المتعدد. بمعنى أن الجسيم الساقط يتشتت من مركز وحيد للجهد ولا يتشتت عدة مرات.
- جهد التفاعل بين الجسيم الساقط ومركز الجهد يعتمد فقط على المسافة بينهما.

١- نظرية التشتت في ميكانيكا الكم



شكل (١) استخدام الإحداثيات القطبية لوصف ظاهرة التشتت.

في أي تجربة معملية للتشتت (انظر الشكل ١) يكون هناك جسيم ساقط (incident particle)، كتلته m وسرعته الابتدائية هي v_i، قادم من بَعْيد $(Z \equiv -\infty)$ ويتحرك في الاتجاه الموجب للمحور Z بطاقة حركة ابتدائية:

$$E_i = \frac{p_i^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$$

ويوصف بالموجة المستوية (plane wave) :

$$\varphi_i = e^{ik_i z} \equiv e^{i \vec{p}_i . \vec{r}/\hbar} \equiv e^{i \vec{k}_i . \vec{r}} \equiv e^{i \vec{k}_i . \hat{r} r}$$

حيث k_i هو العدد الموجي الابتدائي. ويتشتت الجسيم بواسطة حائل (أو هدف كتلته M) يمثل رياضياً بواسطة جهد قصير المدى $V(r)$ (مثل القوى النووية)، بمعنى أنهُ يضمحل بسرعة بعد مدى قصير "a" من الهدف، وتمثل رياضياً بالمعادلة $|\int_0^\infty r^2 V(r)\, dr| < \infty$. وليس شرطاً هنا أن يكون المجال متماثلاً كرويا (spherical symmetry). ونتيجةً لتأثير الجهد على الجسيم الساقط سوف نحصل على موجة كروية مشتتة (outgoing spherical wave) تصف الجسيم المشتت وتوصف رياضياً بالعلاقة:

$$\psi_{sc} = f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \equiv f(\hat{r})\frac{e^{ikr}}{r}$$

وتُعرف الدالة $f(\hat{r})$ بسعة التشتت (scattering amplitude) ولها وحدة الطول. وتعد الدالة $f(\hat{r})$ هي حجر الأساس في حساباتنا القادمة، حيث إن مربعها يدل على احتمالية أن الجسيم الساقط سوف يظهر لنا (يتشتت)، في الاتجاه $\hat{r}$، نتيجةً للتصادم.

الدالة الموجية الكلية، $\Psi(\mathbf{r})$، التي يجب أن تصف الموجات الساقطة والمشتتة معاً، يجب أن تحقق بعض الشروط الحدودية، وهي كالتالي:

أ- يجب أن تكون حلاً لمعادلة شرودنجر:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\,\Psi(\mathbf{r}) \qquad (١)$$

ب- يجب أن تؤول إلى الحل التقاربي (asymptotic solution)، بمعنى:

$$\Psi(\mathbf{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \underbrace{e^{ik_i z}}_{\varphi_i} + \underbrace{f(\theta,\varphi)\frac{e^{ik_f r}}{r}}_{\psi_{sc}} \qquad (٢)$$

هذه الشروط تضمن لنا حلولاً فيزيائية مقبولة للدالة الموجية الكلية $\Psi(\mathbf{r})$. من الصعب إيجاد حل متكامل للمعادلة التفاضلية (١)، وذلك نظراً لوجود الجهد $V(r)$، لذا

سوف نلجأ لحلول تقريبية. وقبل أن نستعرض الحلول التقريبية دعونا نعرف كمية فيزيائية مهمة، حيث يمكن قياسها معملياً ألا وهي المقطع المستعرض التفاضلي.

٢- المقطع المستعرض التفاضلي $\sigma(\theta,\varphi)$

عملياً يهتم الباحثون بقياس المقطع المستعرض التفاضلي للتشتت (والذي يدل على احتمالية حدوث التشتت) ويعرف كالتالي:

المقطع المستعرض التفاضلي = (عدد الجسيمات المشتتة (ΔN) التي تمر بالمساحة dA في وحدة الزمن) / (عدد الجسيمات القادمة (N) والمارة بوحدة المساحات في وحدة الزمن)

وتكتب رياضياً بالصورة:

$$\sigma(\theta,\varphi) = \lim_{\Delta\Omega\to 0}\frac{\Delta N\ /\Delta\Omega}{N} = \lim_{\Delta\Omega\to 0}\frac{\Delta N\ /N}{\Delta\Omega} \qquad (٣)$$

أحيانا تكتب $\sigma(\theta,\varphi)$ بالصورة $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. ويقاس عدد الجسيمات المشتتة عملياً بواسطة كاشف (detector) يوضع على مسافة r، حيث ($r >> a$)، (انظر الشكل ١) من الهدف وله مساحة مقطع dA بزاوية (θ,φ) للزاوية المجسمة $d\Omega = dA/r^2$. ومن تناسب عدد الجسيمات المشتتة " ΔN" مع عدد الجسيمات القادمة " N" والزاوية المجسمة " $d\Omega$" لذلك نجد أن:

$$\Delta N\ = \sigma(\theta,\varphi)N\ d\Omega \qquad (٤)$$

حيث إن $\sigma(\theta,\varphi)$ هو ثابت التناسب. وبالرجوع إلى معادلة (١) نجد أن:

كثافة التيار الساقط يعبر عنها بالشكل:

$$J_i = v_i\left|\varphi_i\right|^2 = v_i\ |e^{ik_i z}\ |^2 = v_i$$

وكثافة التيار المشتت يعبر عنها بالشكل:

$$J_f = v_f\left|\psi_{sc}\right|^2 = v_f\ |f\ (\theta,\varphi)\frac{e^{ik_f r}}{r}|^2 = v_f\ |\frac{f\ (\theta,\varphi)}{r}|^2$$

و منهما نحصل على:

$$\Delta N = J_f dA = \frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2} v_f r^2 \Delta\Omega \qquad (٥)$$

ومنها نجد أن:

$$\sigma(\theta,\varphi) = \lim_{\Delta\Omega\to 0} \frac{\Delta N / N}{\Delta\Omega} = \frac{v_f}{v_i} | f(\theta,\varphi)|^2 = | f(\theta,\varphi)|^2 \qquad (٦)$$

وذلك في حالة التشتت المرن، حيث استخدمنا $v_i = v_f$. ويعرف المقطع المستعرض الكلي بالمعادلة:

$$\sigma_{total} = \int \sigma(\theta,\varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} |f(\theta,\varphi)|^2 \, d\cos\theta \qquad (٧)$$

مثال: إذا كانت $f_B(\theta) = a\cos\theta$ احسب المقطع المستعرض الكلي σ_{total}.

الحل: بتطبيق المعادلة (٧)

$$\sigma_{total} = \int |f(\theta)|^2 \, d\Omega, \quad d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$= 2\pi a^2 \int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta = \frac{4\pi a^2}{3}$$

وقد استخدمنا التكامل: $\int \cos^2\theta \sin\theta d\theta = -\frac{\cos\theta}{4} - \frac{1}{12}\cos[3\theta]$

٣- التقريب الأول لبورن

نعود مرة أخرى للمعادلة التفاضلية (١) التي يمكن وضعها بالصورة:

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\Psi(\mathbf{r}) = U(r)\Psi(\mathbf{r}),$$

حيث استخدمنا التعويضات $U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)$, $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}E$. وباستخدام دالة جرين

للجسيم الحر وهي $G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\dfrac{1}{4\pi}\dfrac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ (انظر الملحق A) نحصل على الحل العام (والكامل) بالشكل:

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')U(r')\Psi(\mathbf{r}')d^3r'$$
$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(r')\Psi(\mathbf{r}')d^3r', \qquad (٨)$$

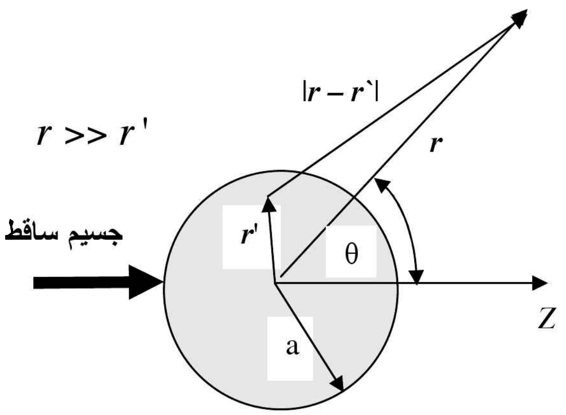
بالرغم من أن المعادلة (٨) هي الحل الكامل للمعادلة (١) ولكن هذا الحل حولنا من معادلة تفاضلية إلى تكامل يحتوي على الدالة نفسها في كلا الطرفين. ولحل هذه المعضلة سوف نفترض أن الجهد $V(r)$ لا يؤثر تأثيراً كبيراً على الدالة الموجية الساقطة (يحدث هذا عند الطاقات العالية للمقذوف) بحيث نستطيع أن نستخدم المفكوك:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \varphi(r) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')U(r')d^3r'\left[\varphi_i(r') + \int G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')U(r'')\cdots\right] \qquad (٩)$$

وإذا اكتفينا بالحد الأول في القوس فإننا نحصّل على التقريب الأول لبورن بالصورة:

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(r) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')U(r')\varphi_i(r')d^3r' \qquad (١٠)$$

حيث وضعنا $\Psi(\mathbf{r}') \approx \varphi(r')$ بالتكامل. لكن هذا أيضاً لم يبسط المسألة كما نعتقد، لذلك سوف نستخدم خواص قصر المدى للجهد $U(r)$ لتبسيط دالة جرين.



شكل (٢) العلاقة الهندسية التي تربط المتجهات التي تستخدم لحساب سعة التشتت بواسطة تقريب بورن.

الحالة $r >> r'$ (انظر شكل ٢) ينتج عنها التالي:

$$|\vec{r}-\vec{r}\,'|=\sqrt{\vec{r}^{\,2}+\vec{r}\,'^2-2\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}=r\left(1-2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2}+\frac{\vec{r}\,'^2}{r^2}\right)^{1/2}$$
$$\xrightarrow[r\to\infty]{} r\left(1-\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2}\right)\approx r-\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{r}\,'\approx r-\hat{r}\cdot\vec{r}\,', \qquad \text{(a11)}$$

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}=\frac{1}{r}\left(1-2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2}+\frac{\vec{r}\,'^2}{r^2}\right)^{-1/2}\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{1}{r}\left(1+\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2}\right)\approx\frac{1}{r} \qquad \text{(b11)}$$

ومن المعادلتين (a11) و (b11) نجد:

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\approx\frac{e^{i(r-\hat{r}\cdot\vec{r}\,')}}{r}=\frac{e^{ikr}e^{-ik(\hat{r}\cdot\vec{r}\,')}}{r}=\frac{e^{ikr}}{r}e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'}$$

ولذا تأخذ المعادلة (١٠) الشكل:

$$\Psi(r)\approx\varphi_i(r)+\left\{-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'}}{r}U(r')\varphi_i(r')d^3r'\right\}\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (١٢)$$

بمقارنة المعادلتين (٢) و (١٢) نجد أن سعة التشتت تأخذ الشكل:

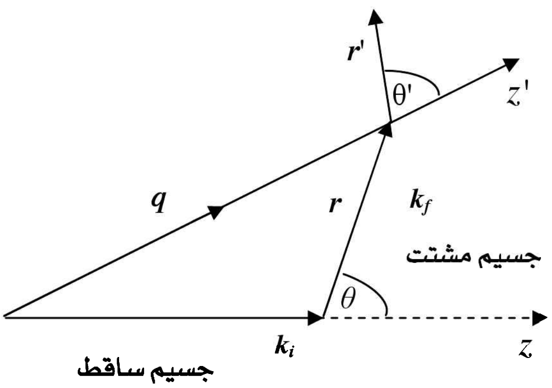
$$f_B(\theta,\varphi)=-\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{r}\,'}U(r')\varphi_i(r')d^3r'=-\frac{1}{4\pi}<\varphi_f\,|U|\,\varphi_i> \qquad (١٣)$$

المعادلة (١٣) تدل على أن سعة التشتت ماهو إلا مصفوفة الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle\varphi_i|$ إلى المستوى النهائي $|\varphi_f\rangle$. باستخدام الدالة $\varphi(r')=e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{r}\,'}$ فإن سعة التشتت تأخذ الشكل التقريبي النهائي:

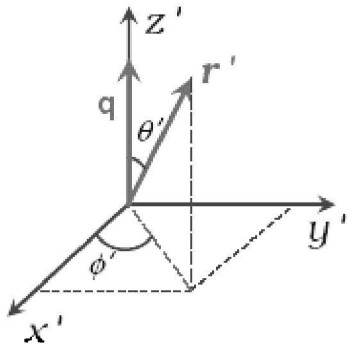
$$f_B(\theta,\varphi)=-\frac{1}{4\pi}\int e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}U(r')d^3r', \qquad \boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_f \qquad (١٤)$$

$\hbar\boldsymbol{q}$ تسمى كمية الحركة المنقولة (momentum transfer) (انظر شكل ٣). وفي حالة التشتت المرن ($k_i=k_f$) نجد أن:

$$|\boldsymbol{q}|^2=\left(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_f\right)^2=k_i^2+k_f^2-2k_ik_f\cos\theta=2k^2\left(1-\cos\theta\right)$$
$$=4k^2\sin^2(\theta/2)$$



شكل (٣) العلاقة بين k_i للجسيم الساقط و k_f للجسيم المشتت.



مثال: استخدم العلاقة $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'=qr'\cos\theta'$ ، كما بالشكل المقابل، وافترض أن الجهد المركزي (central potential) متماثل كروياً (بمعنى أنه لا يعتمد على الزاوية φ') لإثبات أن المعادلة (١٤) تؤول إلى:

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu}{q\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\sin(qr)rdr \qquad (١٥)$$

المعادلة (١٥) هي الشكل المميز للتقريب الأول لبورن.

الحل: بإجراء التكامل على الزوايا (θ',φ') واعتبار أن المتجه $\boldsymbol{q}$ في اتجاه المحور z' نجد أن:

$$\begin{aligned}
f_B(\theta)&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}V(r')d^3r'\\
&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty V(r')r'^2dr'\underbrace{\int_0^{2\pi}d\varphi'}_{2\pi}\underbrace{\int_{-1}^{1}e^{iqr'\cos\theta'}d\cos\theta'}_{\frac{2\sin(qr')}{qr'}}\\
&=-\frac{2\mu}{q\hbar^2}\int_0^\infty V(r')\sin(qr')r'dr'
\end{aligned}$$

وهنا نستطيع تبديل المتغير r' إلى r لأنه متغير شكلي فقط.

مثـــال: احـــسب $f_B(\theta)$ لجهـــد يوكـــاوا (Yukawa potential) الـــذي يعـــرف بالـــصورة $V(r) = V_0 \frac{e^{-ar}}{r}$، حيث يكون الجهد جاذباً (Attractive) عندما $V_o < 0$ ومتنافراً (Repulsive) عندما $V_o > 0$.

الحل: باستخدام المعادلة (١٤) نجد أن:

$$f_B(\theta) = -\frac{\mu V_o}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{-ar}}{r} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r = \frac{2\mu_o}{\hbar^2}\frac{V_o}{q^2 + a^2}$$

ولجهد رازرفورد (كولومب)

$$\lim_{a\to 0} f_B(\theta) = \frac{2\mu_o}{\hbar^2}\frac{V_o}{q^2}$$

وقد استخدمنا التكامل المعرف: $I_1(q,a) = \int \frac{e^{iq.r \pm ar}}{r} d^3r = \frac{4\pi}{q^2 + a^2}$ حيث $q.r = q\ r \cos\theta$

واجب منزلي: استخدم المعادلة (١٥) للتحقق من النتيجة السابقة.

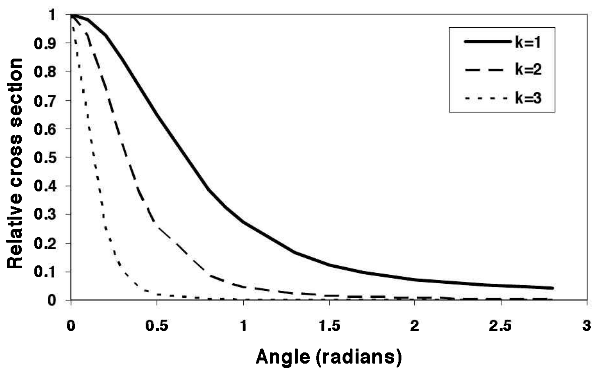
دعونا نعلق على هذا المثال:

١- عند رسم مساحة المقطع النسبي (Relative cross section)

$$\frac{\sigma(\theta)}{\sigma(\theta = 0, a = 1)} = \frac{1}{\left[1 + \left(2k \sin\frac{\theta}{2}\right)^2\right]^2}$$

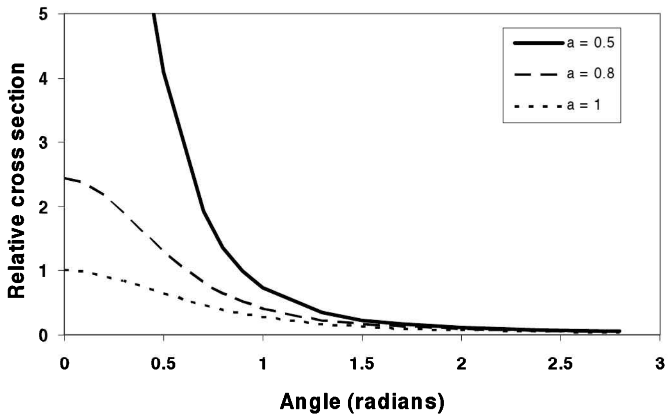
مع $\theta(\text{rad})$ لقيم مختلفة للمتغير k، ومع ثبوت a نجد أن (انظر الشكل التالي):

أ- عند الطاقات العالية، $k > 1$، نجد أن التشتت في الاتجاه الأمامي (Forward direction)، بمعنى أن $(\theta = 0)$، يكون هو المفضل. بالطبع فإن هذا السلوك متوقع، حيث إن تأثير الجهد يقل مع زيادة طاقة الجسيم الساقط، ومن ثم فإن الجسيم ذا السرعة العالية ينحرف قليلاً عندما يمر خلال منطقة الجهد.



ب- عند الطاقات المنخفضة، $k < 1$، نجد أن تأثير الجهد يكون واضحاً من تشتت الجسيمات في جميع الاتجاهات.

٢- عند رسم مساحة المقطع النسبي $\frac{\sigma(\theta)}{\sigma(\theta=0,k=1)}=\frac{1}{\left[a^2+\left(2\sin\frac{\theta}{2}\right)^2\right]^2}$ مع $\theta(\text{rad})$ لقيم مختلفة للمتغير a، كما بالشكل التالي، وعند ثبوت k، نجد الآتي: إنه عندما تقل قيمة a فإن شدة تشتت الجسيمات في الاتجاه الأمامي تزداد زيادةً كبيرة. مع ملاحظة أن قيمة $a=0$ تعطينا الجهد الكولومي، وهو جهد طويل المدى.



ونلاحظ أيضاً أن تأثير الجهد بعيداً عن منطقة التشتت تزداد كثيراً، بحيث تزداد معه مساحة المقطع التفاضلي مما يؤدي إلى ازدياد مساحة المقطع الكلي.

ملحوظة مهمة: وهي أن جهد يوكاوا يؤول إلى جهد راذرفورد (Rathurford potential)، أي جهد (كولومب) عندما $a \to 0$.

دعونا الآن نعد الحالة الخاصة وهي قيمة مساحة المقطع التفاضلي عندما $a \to 0$ ، وهي معلومة لدينا. ولربطها بنظام فيزيائي سوف نعوض بالمعادلة $V_o = Z_1 Z_2 e^2$ ، لنجد أن مساحة المقطع الكولومي تصبح:

$$\sigma_{coul}(\theta)\frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{4\hbar^2 k^4 \sin^2(\frac{\theta}{2})}$$

وهي نتيجة مشهورة حسبت أولاً بواسطة العالم رازدرفورد وسميت "صيغة تشتت رازدرفورد". ولنا تعليق مهم وهو بالرغم من أن الجهد الكولومي لا يحقق أهم شرط، وهو أنه يجب أن يكون قصير المدى، فإن الصيغة الناتجة من التقريب الأول لبورن تتطابق تماماً مع صيغة رازدرفورد. غير أن هذا التقريب لا يعطينا الأملَ في صلاحيته لأي جهدٍ، ولذا يجب الحذر عند استخدامه مع الجهد الطويل المدى.

ملحوظة: من صيغة تشتت رازدرفورد نجد أن مساحة المقطع الكولومي تصبح ما لا نهاية عند $\theta = 0$. فمن الواضح أن استخدام الجهد الكولومي للمدى $[0,\infty]$ غير صحيح تماماً، لماذا؟ نعلم أنه عند اقتراب شحنتين متشابهتين بعضهما من بعض تحصل بينهما قوة طاردة. ولهذا فإن مساحة المقطع الكولومي لن تكون ما لا نهاية عند $\theta = 0$.

مثال: باستخدام العلاقة $q^2 = 2k^2(1-\cos\theta)$ ، احسب σ_{total}.

الحل: باستخدام نتيجة المثال السابق حيث $f_B(\theta) = \frac{2\mu_o}{\hbar^2}\frac{V_o}{q^2+a^2}$ نجد:

$$\sigma_{total} = \int |f(\theta)|^2 \, d\Omega, \quad d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$= \frac{8\pi\mu^2 V_o^2}{\hbar^2}\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta d\theta}{\left[a^2 + 2k^2(1-\cos\theta)\right]^2} = \frac{8\pi\mu^2 V_o^2}{\hbar^2}\frac{2}{a^4 + 4a^2 k^2}$$

وتصبح ما لا نهاية عندما $\theta = 0$.

وقد استخدمنا هنا التكامل القياسي: $\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\left[a^2 + k^2(1-x)\right]^2} = \frac{2}{a^4 + 2a^2 k^2}$.

مثال: احسب $f_B(\theta)$ للجهد الآسي(exponential potential) الذي يعرف بالصورة $U(r) = U_0 e^{-ar}$.

الحل: باستخدام المعادلة (١٤) نجد أن:

$$f_B(\theta) = -\frac{U_o}{4\pi}\int e^{-ar} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r = -\frac{2U_o a}{\left(q^2 + a^2\right)^2}$$

وقد استخدمنا التكامل القياسي:

$$I_2(\boldsymbol{q}, a) = \int e^{iq.r \pm ar} d^3r = -\frac{\partial I_1}{\partial a} = \frac{8\pi a}{\left(q^2 + a^2\right)^2},$$

واجب منزلي: احسب σ_{total} للجهد الآسي بالمثال السابق .

٤- مدى صلاحية تقريب بورن

ليس من السهل دراسة تحقيق التقريب الأول لبورن، ولهذا فسوف نتعامل معه بفرض أن الجهد المسؤول عن التشتت، $V(r)$ ، ماهو إلا اضطراب صغير. من ثم سنفترض أن:

١- جهد التشتت $V(r)$ يجب أن يكون أصغر من طاقة الجسيم الساقط، بمعنى أن $V(r) << E_i$. هذا يعني أن طاقة الجسيم الساقط يجب أن تكون كبيرة مقارنةً بجهد التشتت بحيث إن دالة الجسيم المشتت لا تتأثر كثيراً بجهد التشتت، ونتعامل معها كموجة مشتتة مستوية.

٢- سعة الموجة الكروية المشتتة يجب أن تكون أصغر بكثير من سعة الموجة المستوية الساقطة. ولتطبيق نظرية الاضطراب فإن التصحيح للدالة الكلية، وهو الموجة المشتتة والناتجة عن جهد التشتت، يجب أن يكون صغيراً بالمقارنة بالدالة الساقطة.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \underbrace{\varphi(r)}_{\psi^{(0)}} \underbrace{- \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(r')\varphi(\mathbf{r}')d^3r'}_{\psi^{(1)}} \quad \Rightarrow \quad \psi^{(1)} << \psi^{(0)}$$

رياضياً يعرف التحقيق بالمعادلة:

$$\left|\frac{\psi^{(1)}(r=0)}{\psi^{(0)}(r=0)}\right| = \left|\frac{-\dfrac{\mu}{2\pi\hbar^2}\displaystyle\int \frac{e^{\pm ikr'}}{r'}V(r')\varphi(r')d^3r'}{1}\right| << 1$$

مثال: أثبت أن تحقيق التقريب الأول لبورن للجهد المركزي يتأتى بالعلاقة:

$$\left|\frac{2\mu}{q\hbar^2}\int V(r)e^{ikr}\sin(kr)dr\right| << 1$$

الحل:

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ikr'}}{r'}V(r')e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}d^3r' = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty r'^2dr'\int_0^{2\pi}d\varphi'\int \sin\theta' d\theta' \frac{e^{ikr'}}{r'}V(r')e^{ikr'\cos\theta'}$$
$$= \frac{2\mu}{k\hbar^2}\int V(r')e^{ikr'}\sin(kr')dr'$$

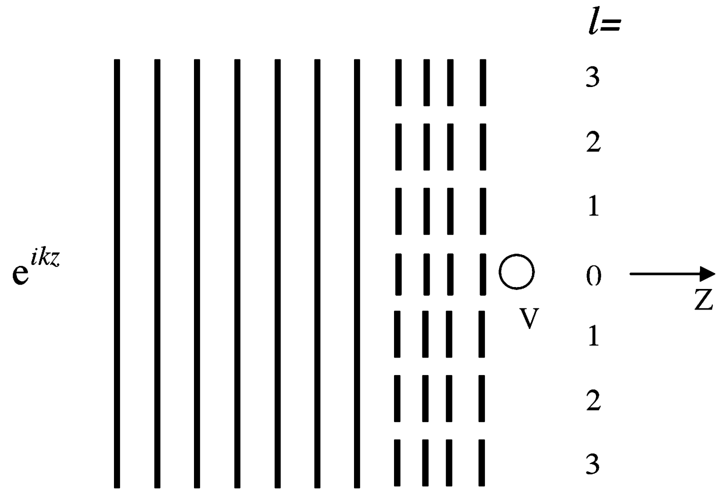
واجب منزلي: أثبت أن تحقيق التقريب الأول لبورن للجهد $V(r) = V_0e^{-ar}$ حيث $a > 0$ يتأتى بالعلاقة:

$$\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{a^2V_o}{\sqrt{1+4k^2a^2}}\right| << 1$$

وللجسيمات البطيئة ($ka << 1$) نجد أن $|V_o| << \dfrac{\hbar^2}{2\mu a}$.

وللجسيمات السريعة ($ka >> 1$) نجد أن $|V_o| << \dfrac{\hbar^2 k}{\mu a} \approx \dfrac{\hbar^2}{\mu a^2}(ka)$.

٥- تحليل الموجات الجزئية



شكل (٤) القيم المختلفة للعزم الزاوي (ℓ) التي تتأثر بمجال الجهد الكروي V.

بالرغم من سهولة تطبيق تقريب بورن، فإنه لا يزال قاصراً وخصوصاً عندما يصبح الجهد المركزي كبيراً ومؤثراً. ونحن الآن بصدد التعرف على طريقة تعد أكثر دقة، وهي طريقة تحليل الموجات الجزئية. ويظهر الاسم نتيجة لأنه عندما يكون المجال المسبب للتشتت متماثلاً كروياً تكون كمية الحركة الزاوية (ℓ (هي إحدى ثوابت الحركة. ولهذا سوف يظهر تأثير كل قيمة من القيم المختلفة لكمية الحركة الزاوية بصورة مستقلة في التشتت (انظر الشكل ٤). ولذلك نتعامل مع الموجات القادمة (وأيضاً المشتتة) كتراكب لأمواج جزئية. وسوف نتخذ المحور Z منطبقاً على اتجاه الموجات القادمة. ولهذا فإن الموجة القادمة بعدد موجي ($k_i = k$) سوف تكتب بالصورة:

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell} i^{\ell}\left(2\ell+1\right) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos\theta)$$

$$\underset{r\to\infty}{\approx} \frac{1}{kr}\sum_{\ell} i^{\ell}\left(2\ell+1\right)\sin(kr-\frac{\ell\pi}{2})P_{\ell}(\cos\theta) \qquad (١٦)$$

حيث $P_l(\cos\theta)$ هي دالة ليجيندر. وقد استخدمنا الصورة التقاربية لدالة بيسيل الكروية وهي $j_{\ell}(\rho) \underset{r\to\infty}{\approx} \frac{1}{\rho}\sin(\rho-\frac{\ell\pi}{2})$. وهنا يجب أن نضيف شرطاً حدودياً آخر

بالنسبة لمجال الجهد $V(r)$، وهو أن يكون المجال متماثلاً كروياً، بمعنى أنه يعتمد على r فقط، ولا يعتمد على الزاوية السمتية φ.

سنبدأ بفرض الحل العام للمعادلة (١) بالشكل:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_{\ell,0} R_\ell(r) P_\ell(\cos\theta) \tag{١٧}$$

حيث $R_\ell(r)$ هو حل المعادلة القطرية:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right] R_\ell(r) = E R_\ell(r) \tag{١٨}$$

وبعيداً عن مجال التشتت، حيث $V(r) \to 0$، وباستخدام $k^2 = 2\mu E / \hbar^2$ و $\rho = kr$ فإن المعادلة (١٨) تؤول إلى:

$$\frac{d^2 R_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_\ell(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] R_\ell(\rho) = 0, \tag{١٩}$$

ومن ثم فإن الدالة الموجية بعيدة عن الهدف بالإمكان كتابتها على الصورة العامة:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\ell=0}^{\infty}\left\{a_\ell j_\ell(kr) + b_\ell \eta_\ell(kr)\right\} P_\ell(\cos\theta) \\ &\underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho}\sum_{\ell=0}^{\infty}\left\{a_l \sin(\rho - \frac{\ell\pi}{2}) + b_\ell \cos(\rho - \frac{\ell\pi}{2})\right\} P_\ell(\cos\theta) \\ &\underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho}\sum_{\ell=0}^{\infty}\left\{A_\ell \sin(\rho - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell)\right\} P_\ell(\cos\theta)\end{aligned} \tag{٢٠}$$

حيث استخدمنا التعويضات $a_\ell = A_\ell \cos\delta_\ell, \quad b_\ell = -A_\ell \sin\delta_l$ وتقريب دالة نيومان الكروية التقاربي $\eta_\ell \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho}\cos(\rho - \frac{\ell\pi}{2})$. δ_ℓ تشير إلى التغير الطوري للقيمة ℓ ومنها نستدل على تأثير المجال الخارجي على الجسيمات المشتتة. والآن فإن المسألة تتلخص في إيجاد الثوابت غير المعلومة في المعادلة (٢٠) وهما A_ℓ و δ_ℓ وذلك بمقارناتها بالمعادلة التقريبية (٢) التي تأخذ الشكل:

$$\Psi(\mathbf{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho}\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1)\sin(kr - \frac{\ell\pi}{2}) P_\ell(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{٢١}$$

حيث اعتبرنا حالة التصادم المرن وفيها $k_i = k_f = k$. لإيجاد الثوابت فإننا نقارن بين المعادلتين (٢٠) و(٢١) بإتباع التالي:

أ- نستعمل مفكوك الدالتين $\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$ و $\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}$ بالمعادلتين (٢٠) و(٢١).

ب- نساوي المعاملات للدالة الكروية $\frac{e^{-ikr}}{r}$ فنحصل على:

$$A_\ell = \sqrt{4\pi}\, i^\ell \sqrt{2l+1}\, e^{i\delta_\ell} \tag{٢٢}$$

ج- نساوي المعاملات للدالة الكروية $\frac{e^{ikr}}{r}$ ونستخدم العلاقة

$$e^{-i\ell\pi/2} = \left(e^{-i\pi/2}\right)^\ell = \left[\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\right]^\ell = i^{-\ell}$$

فنحصل على:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(e^{2i\delta_\ell}-1\right) \\ &= \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell P_\ell(\cos\theta), \end{aligned} \tag{٢٣}$$

ومنها نجد أن:

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\, e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell\right|^2 \tag{٢٤}$$

$$\sigma_{total} = 2\pi\int_{-1}^{1}|f(\theta)|^2\, d\cos\theta = \sum_l \sigma_\ell, \tag{٢٥}$$

حيث $\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell$ هي الموجات الجزئية للمقطع المستعرض، المناظرة للقيمة l. وهنا استخدمنا خاصية التكامل:

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(\cos\theta)\, P_{\ell'}(\cos\theta)\, d\cos\theta = \frac{2}{2l+1}\delta_{\ell\ell'}$$

بالإمكان حساب المجموع الكلي بطريقة أخرى وهي أن نبدأ بالمعادلة (٢٣) ونضع $\theta = 0$ فنحصل على:

$$f\,(0) = \frac{1}{k}\sum_{\ell 0}^{\infty}(2\ell+1)\underbrace{P_{\ell}(\cos 0)}_{=1}e^{i\delta_{\ell}}\sin\delta_{\ell} \qquad (٢٦)$$

ومنها نجد:

$$\mathrm{Im} f\,(0) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_{\ell} \qquad (٢٧)$$

و بالمقارنة بالمعادلة (٢٥) نستنتج أن:

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f\,(0) \qquad (٢٨)$$

المعادلة (٢٨) هي علاقة بين المقطع المستعرض الكلي والجزء التخيلي لسعة التشتت المرن بالاتجاه الأمامي. هذه العلاقة تسمى "النظرية الضوئية". ويمكن فهم هذه العلاقة بدلالة الفيض المزال من الموجة المستوية القادمة. لأنه كما هو معلوم يوجد عندنا موجتان إحداهما: هي الموجة المستوية القادمة، والأخرى: الموجة الكروية المشتتة. ويكون ارتباط المقطع المستعرض الكلي بالفيض المزال من الموجة المستوية القادمة فقط.

تعليق:

١- يظهر التداخل جلياً في $\sigma(\theta,\varphi)$ ، انظر: المعادلة (٢٤)، ولكن لا يظهر في σ_{total} ، انظر: المعادلة (٢٨)، لأننا أجرينا التكامل على الزوايا.

٢- عند حسابنا للمقطع المستعرض الكلي، فإن القيم (ℓ) الصغيرة هي التي تُعطي أعلى قيم عند الطاقات المنخفضة.

مثال: احسب المقطع المستعرض الكلي σ_{total} (باستخدام ثلاثة حدود فقط من المتسلسلة) إذا علمت أن $k = 1/a, \quad \delta_{\ell} = \dfrac{1}{(\ell+1)^4}$ rad

الحل: باستخدام الجدول التالي:

ℓ	δ_ℓ(rad)	$\sin^2\delta_\ell$
0	1.0	7.1×10^{-1}
1	6.3×10^{-2}	4.0×10^{-3}
2	1.2×10^{-2}	1.4×10^{-4}

نجد أن:

$$\begin{aligned}\sigma_{total} &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_\ell (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \approx 4\pi a^2\left[\sin^2\delta_o + 3\sin^2\delta_1 + 5\sin^2\delta_2\right]\\ &= 4\pi a^2\left[7.1\times10^{-1} + 3\times4.0\times10^{-3} + 5\times1.4\times10^{-4}\right]\\ &= 4\pi a^2(7.2\times10^{-1})\end{aligned}$$

مثال: استخدم النظرية الضوئية لحساب المقطع المستعرض الكلي للتشتت إذا علمت أن $\delta_0 = ka$.

الحل: حيث إن المسألة أعطتنا δ_0 فهذا يعني أن $\ell = 0$ ، ولذلك سوف نكتفي بالحد الأول من المتسلسلة.

$$\begin{aligned}\mathrm{Im} f(0) &= \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \approx \frac{1}{k}\sin^2\delta_0 \approx \frac{1}{k}\delta_0^2\\ &= \frac{1}{k}\left[k^2a^2\right],\end{aligned}$$

ومن ثم فإن

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f(0) = \frac{4\pi}{k}\left\{\frac{1}{k}\left[k^2a^2\right]\right\} = 4\pi a^2$$

مثال: احسب σ_{total} إذا علمت أن $f(\theta) = e^{-\theta}/\sqrt{\sin\theta}$.

الحل:

$$\sigma_{total}(\theta,\varphi)=\int |f(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta\, d\theta d\varphi = 2\pi\int_0^{\pi}\frac{e^{-2\theta}}{\sin\theta}\sin\theta\, d\theta = 2\pi\int_0^{\pi} e^{-2\theta} d\theta$$

$$=2\pi\left[\frac{1}{2}-\frac{e^{-2\pi}}{2}\right]=\pi(1-e^{-2\pi})$$

٦- أمثلة عامة

مثال: باستخدام التقريب الأول لبورن احسب σ_{total} عند الطاقات المنخفضة للجهد التنافري التالي:

$$V(r)=\begin{cases} V_o, & r\le R \\ 0, & r>R \end{cases}$$

الحل: باستخدام التقريب الأول لبورن نستطيع حساب سعة التشتت كالتالي:

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu}{q\hbar^2}\int_0^{\infty} V(r)\sin(qr)r dr$$

$$=-\frac{2\mu V_o}{q\hbar^2}\left[\int_0^{R}\sin(qr)r dr\right]=-\frac{2\mu V_o}{q\hbar^2}\left[\frac{\sin(qR)-qR\cos(qR)}{q^2}\right]$$

ومنها نجد المقطع المستعرض التفاضلي:

$$\sigma(\theta)=\left|f_B(\theta)\right|^2=\left(\frac{2\mu V_o R^3}{\hbar^2}\right)^2 g(x)$$

حيث

$$g(x)=\left[\frac{\sin x - x\cos x}{x^3}\right]^2,\quad x=qR=2kR\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

وعند الطاقات المنخفضة نجد أن $\lim\limits_{x\to 0} g(x)=\frac{1}{9}$ والمقطع المستعرض التفاضلي:

$$\sigma=\lim_{x\ll 1}\sigma(\theta)=\left|f_B(\theta)\right|^2=\left(\frac{2\mu V_o R^3}{3\hbar^2}\right)^2$$

وهو لا يعتمد على زاوية التشتت.

يحسب المقطع المستعرض الكلي من التكامل:

$$\sigma_{total} = \int \left| f_B(\theta) \right|^2 d\Omega = 4\pi \left| f_B(\theta) \right|^2 = 4\pi \left(\frac{2\mu V_o R^3}{3\hbar^2} \right)^2$$

مثال: باستخدام تحليل الموجات الجزئية احسب قيمة المقطع المستعرض الكلي (σ_{total}) للتشتت من مجال جهد يعرف بجهد الكرة الصلبة كالتالي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & r > a \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

الحل: نبدأ بالمعادلة القطرية:

$$\frac{d^2 R_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_\ell(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R_\ell(\rho) = 0$$

وحلها العام هو:

$$R_\ell(kr) = a_\ell j_\ell(kr) + b_\ell \eta_\ell(kr)$$

مع الشرط الحدودي: $R_l(a) = 0,$ نتيجة للجهد،

$$a_\ell j_\ell(ka) + b_\ell \eta_\ell(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad \tan\delta_\ell = \frac{j_\ell(ka)}{\eta_\ell(ka)}$$

حيث استخدمنا $a_\ell = A_\ell \cos\delta_\ell, \quad b_\ell = -A_\ell \sin\delta_\ell$. هنا تظهر حالتان للدراسة:

أ- <u>التشتت عند الطاقات المنخفضة</u> $ka << 1$

نستخدم التقريب التالي

$$j_\ell(ka) \underset{k\to 0}{\approx} (ka)^\ell, \qquad \eta_\ell(ka) \underset{k\to 0}{\approx} -(ka)^{-\ell-1}$$

ومنه ينتج أن

$$\tan\delta_\ell = \frac{j_\ell(ka)}{\eta_\ell(ka)} = -(ka)^{2\ell+1}$$

ونلاحظ أن δ_ℓ تقل بسرعة مع زيادة قيم ℓ ومن ثم فإن الموجة s المقابلة للقيمة $\ell = 0$ هي القيمة الدائمة

$$\tan\delta_0 = \frac{j_0(ka)}{\eta_0(ka)} = -ka$$

من هنا يتضح جلياً سبب الإزاحة الطورية. حيث إن الموجات لا تستطيع اختراق حاجز الجهد عندما $ka << 1$. ويحدث للموجة إزاحة للخارج.

المقطع المستعرض الكلي للتشتت يحسب بالمعادلة:

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = 4\pi a^2$$

نجد هنا أن قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت أربعة أمثال القيمة الكلاسيكية πa^2. هذا يرجع للخواص الموجية للجسيمات ومنها ظاهرة الحيود.

بالنسبة إلى سعة التشتت:

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell P_\ell(\cos\theta) = \frac{\delta_0}{k} = -a$$

ومنها نجد أن سعة التشتت لا تعتمد على الزوايا (θ, φ).

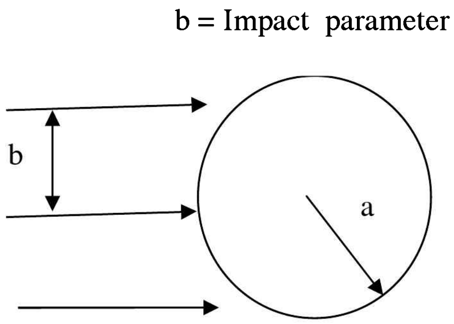
ب- التشتت عند الطاقات العالية $ka >> 1$

$$\tan\delta_l = -\frac{j_l(ka)}{\eta_l(ka)} \approx -\frac{\sin(ka - l\pi/2)}{\cos(ka - l\pi/2)} = -\tan(ka - l\pi/2)$$

$$\Rightarrow \quad \delta_l = -(ka - l\pi/2)$$

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l,$$

عند الطاقات العالية فإن التشتت لا يحدث للجسيمات البعيدة عن المركز، $b > a$، ولكن يحدث للجسيمات القريبة، $b < a$، انظر: الشكل المرافق، وحيث إن كمية الحركة



الزاوية مكممة، بمعنى أن $\underbrace{mv}_{\hbar k} b = \ell\hbar$ فإن $\ell_{\max} \approx ka$ ، إذاً:

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \approx \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}(2\ell+1)\frac{\left[1-2\cos(ka-\ell\pi/2)\right]}{2}$$

$$\approx \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}(2\ell+1) - \frac{2\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}(2\ell+1)\underbrace{\cos(ka-\ell\pi/2)}_{(-1)^l}$$

$$\approx \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}(2\ell+1) \approx \frac{2\pi}{k^2}(\ell_{\max}+1)^2 \approx \frac{2\pi}{k^2}\ell_{\max}^2 \approx 2\pi a^2$$

ملاحظات:

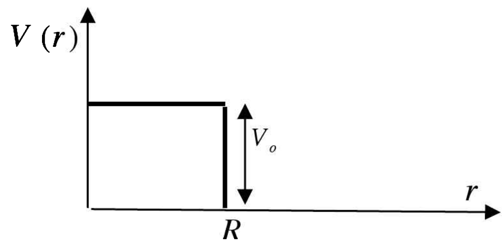
١- تم إهمال الجزء $(-1)^\ell$ $\cos(ka-\ell\pi/2)=(-1)^\ell$ حيث إنه يتذبذب بين قيم موجبة وسالبة، ومن ثم فإن مجموعه النهائي يصبح كمية منعدمة.

٢- استخدمنا العلاقة التجميعية $\sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}}\ell = \ell_{\max}(\ell_{\max}+1)/2$ بالخطوة الأخيرة.

٣- نجد هنا أيضاً أن قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت ضعف القيمة الكلاسيكية πa^2.

مثال: لبئر ذي جهد تنافري يعرف بالشكل كالتالي:

$$V(r)=\begin{cases} V_o, & r\le R \\ 0, & r>R \end{cases}$$



احسب قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت للموجة s عندما تكون طاقة الجسيم الساقط هي $E=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$. استخدم الرموز التالية: $K^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}V_o$ ، $\beta^2=k^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}E$.

الحل :

سوف نتعرض هنا لحالتين، وهما:

١- الحالة الأولى $E > V_o$

في هذه الحالة نجد أن معادلة شرودنجر داخل وخارج البئر الجهدي، للموجة s ، تعرف بالمعادلتين:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\alpha^2\right]R_{\text{int}}(r)=0, \qquad r<R,$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\beta^2\right]R_{\text{ext}}(r)=0, \qquad r>R,$$

حيث:

$$.\ \alpha^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_o)=\beta^2-K^2$$

يجب أن يحقق الحل بداخل البئر، $R_{\text{int}}(r)$ ، الشرط الحدودي $R_{\text{int}}(0)=0$. الحل العام لمعادلتي شرودنجر يمكن وضعهما بالصورة:

$$R_{\text{int}}(r)=A\sin(\alpha r)+C\cos(\alpha r),$$
$$R_{\text{ext}}(r)=B\sin(\beta r+\delta_o)$$

ومن الشرط الحدودي $R_{\text{int}}(0)=0$ نجد أن C يجب أن تنعدم.

باستخدام شرط استمرارية التفاضل اللوغاريتمي عند الحد الفاصل نحصل على:

$$\left.\frac{\dfrac{dR_{\text{int}}(r)}{dr}}{R_{\text{int}}(r)}\right|_{r=R}=\left.\frac{\dfrac{dR_{\text{ext}}(r)}{dr}}{R_{\text{ext}}(r)}\right|_{r=R}\Rightarrow\frac{A\alpha\cos(\alpha R)}{A\sin(\alpha R)}=\frac{B\beta\cos(\beta R+\delta_o)}{B\sin(\beta R+\delta_o)}$$

ومنها نعين الإزاحة الطورية كالتالي:

$$\frac{1}{\beta}\tan\left(\beta R+\delta_o\right)=\frac{1}{\alpha}\tan(\alpha R)$$

$$\Rightarrow \delta_o=\tan^{-1}\left[\frac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R)\right]-\beta R$$

من هذا التعريف يمكن حساب قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت للموجة s من العلاقة:

$$\sigma_{total}=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_o\approx\frac{4\pi}{k^2}\delta_o^2$$

ولنا هنا ملاحظة عندما تكون $\beta << K$ فإننا نستطيع أن نهمل القيمة K لنجد أن $\alpha=\beta$. لذلك ينعدم التغير الطوري كالتالي:

$$\delta_o\approx\tan^{-1}\left[\frac{\beta}{\beta}\tan(\beta R)\right]-\beta R=0$$

وهذا يفسر على أن طاقة الجسيم العالية لن تهتم بأي جهد صغير، من ثم لن يكون هناك تشتت لأنّ الموجات الجزئية للمقطع المستعرض $\sigma_\ell\propto\delta_\ell$ سوف تنعدم.

ب- الحالة الثانية $E<V_o$

الحل العام لمعادلتي شرودنجر يمكن وضعهما بالصورة:

$$R_{\text{int}}(r)=A\sinh(\alpha r),$$
$$R_{\text{ext}}(r)=B\sinh(\beta r+\delta_o)$$

وبإتباع الطريقة السابقة نحصل على:

$$\frac{1}{\beta}\tanh\left(\beta R+\delta_o\right)=\frac{1}{\alpha}\tanh(\alpha R),$$

$$\delta_o=\tanh^{-1}\left[\frac{\beta}{K}\tanh(\alpha R)\right]-\beta R$$

$$\approx\beta R\left[\frac{1}{KR}\tanh(KR)-1\right],\qquad \beta<<K$$

القيمة بين القوسين تنحصر بين القيمتين ٠ و ١، من ثم سيكون قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت مشابهة للكرة الصلبة. نشير هنا إلى نقطة مهمة وهي أن δ_o تبدأ خطياً مع تغير β عند الطاقات الصغيرة، ويكون الميل سالباً. هذه نتيجة عامة للجهد التنافري.

هناك كمية أخرى وهي "طول التشتت **scattering length**" وتعريفها كالتالي:

$$a_o = -\lim_{\beta\to 0}\frac{d\,\delta_o}{d\,\beta}$$

هذه الكمية تقيس مدى قيمة الهدف الكمية. وتكون قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت $4\pi a_o^2$ عندما $\beta \to 0$. بالنسبة للكرة الصلبة فإن طول التشتت هو نصف قطر الكرة.

مثال: باستخدام المعادلة:

$$\delta_o = \tan^{-1}\left[\frac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R)\right] - \beta R$$

احسب مصفوفة التشتت $S = e^{2i\delta_o}$.

الحل: بترتيب بسيط يمكن وضع المعادلة السابقة في الصورة:

$$\frac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R) = \tan(\beta R + \delta_o) = -i\,\frac{e^{i(\beta R+\delta_o)} - e^{-i(\beta R+\delta_o)}}{e^{i(\beta R+\delta_o)} + e^{-i(\beta R+\delta_o)}}$$
$$= -i\,\frac{e^{i\beta R}e^{2i\delta_o} - e^{-i\beta R}}{e^{i\beta R}e^{2i\delta_o} + e^{-i\beta R}}$$

وبتبسيط أكثر نجد أن:

$$i\,\frac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R)\left(e^{i\beta R}e^{2i\delta_o} + e^{-i\beta R}\right) = e^{i\beta R}e^{2i\delta_o} - e^{-i\beta R},$$
$$e^{i\beta R}e^{2i\delta_o}\left(i\,\frac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R) - 1\right) = \left(-i\,\frac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R) - 1\right)e^{-i\beta R},$$

لذلك:

$$S = e^{2i\delta_o} = e^{-i\beta R}\,\frac{1 + i\,\dfrac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R)}{1 - i\,\dfrac{\beta}{\alpha}\tan(\alpha R)}$$

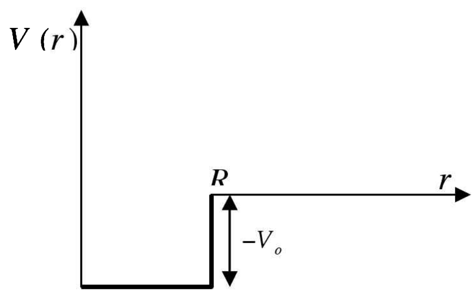
٧- تمارين عامة

١- باستخدام ماثيماتيكا تحقق من النتائج بالجدول التالي.

$U(r)$	$f_B(\theta)$	σ_{total}	$\sigma_{total} \underset{E\to\infty}{\simeq} AE^{-1}$
$U_o \dfrac{e^{-ar}}{r}$	$-\dfrac{U_o}{q^2+a^2}$	$\dfrac{4\pi U_o^2}{a^4+4a^2k^2}$	$A=\dfrac{\pi\hbar^2U_o^2}{2ma^2}$
$U_o e^{-ar}$	$-\dfrac{2aU_o}{(a^2+q^2)^2}$	$\dfrac{16\pi U_o^2}{3}\dfrac{16k^4+12a^2k^2+3a^4}{a^4(a^2+4k^2)^3}$	$A=\dfrac{2\pi\hbar^2U_o^2}{3ma^2}$
$U_o e^{-a^2r^2}$	$-U_o\dfrac{\sqrt{\pi}}{4a^3}e^{-q^2/4a^2}$	$\dfrac{\pi^2U_o^2}{8a^4k^2}\left[1-e^{-2k^2/a^2}\right]$	$A=\dfrac{\pi^2\hbar^2U_o^2}{16ma^4}$
$\begin{cases}U_o, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$	$-\dfrac{U_o}{a^3}(\sin qa-qa\cos qa)$	$\dfrac{8\pi U_o^2a^6}{4x^2}\left(1-\dfrac{1}{x^2}+\dfrac{\sin 2x}{x^3}-\dfrac{\sin^2 x}{x^4}\right),$ $x=2ka$	$A=\dfrac{\pi^2\hbar^2a^4U_o^2}{4m}$
$\dfrac{U_o}{r^2+a^2}$	$-\dfrac{\pi U_o}{4a}e^{-qa}$	$\dfrac{\pi^3U_o^2}{32a^4k^2}\left[1-(4kd+1)e^{-4ka}\right]$	$A=\dfrac{\pi^3\hbar^2U_o^2}{64ma^4}$

٢- لبئر ذي جهد تجاذبي يعرف بالشكل كالتالي:

$$V(r)=\begin{cases}-V_o, & r\le R\\ 0, & r>R\end{cases}$$



احسب قيمة المقطع المستعرض الكلي للتشتت للموجة s عندما تكون طاقة الجسيم الساقط هي $E=\dfrac{\hbar^2}{2m}k^2$.

ملحق (18.A)

دالة جرين

رياضياً تستخدم دالة جرين(Green) لحل المعادلات التفاضلية غير المتجانسة التي تخضع لشروط حدودية معينة. استخدامات دالة جرين في الفيزياء لا تعد وخصوصاً في حل المعادلات التفاضلية ذات القيم المميزة. على سبيل المثال في علم الكهروستاتيكا تعبر دالة جرين عن الجهد عند نقطة، سميها (x)، الناتج من شحنة موضوعة عند النقطة (y)، وهي تعتمد على المسافة بين النقطتين فقط. في هذا الملحق سوف نستعرض طريقة جرين لحل المعادلة التفاضلية المرتبطة بالتشتت.

المعادلة التفاضلية:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\,\Psi(\mathbf{r}) \qquad (1)$$

يمكن حلها حلاً متكاملاً باستخدام دالة جرين للجسيم الحر كالتالي:

١- نضع ا لمعادلة (1) على الصورة:

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\Psi(\mathbf{r}) = U(r)\Psi(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

حيث استخدمنا التعويضات التالية: $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}E, \quad U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)$

٢- تعرف دالة جرين للجسيم الحر $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ من خلال المعادلة التفاضلية:

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \qquad (3)$$

حيث $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ هي دالة ديراك ذات الأبعاد الثلاثة (انظر ملحق B)

٣- تعرف دالة الجسيم الحر $\varphi(r) = e^{ikr}$ بالمعادلة:

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\varphi(r) = 0, \qquad (4)$$

٤- يصبح حل المعادلة (1) هو:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \varphi(r) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')U(r')\Psi(\mathbf{r}')d^3r', \tag{5}$$

حيث إن وحدة الحجم $d^3r' = r'^2 \sin\theta' d\theta' d\varphi' dr'$.

واجب منزلي: أثبت أن الدالة (5) هي حل المعادلة (2).

دالة جرين للجسيم الحر $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ تحل بواسطة المتغيرات المركبة وتأخذ الصورة:

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik\rho}}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \tag{6}$$

حيث إن الإشارة (-) ترمز إلى الدالة القادمة (Ingoing wave) و(+) ترمز إلى الدالة المنصرفة (Outgoing wave).

الملاحق

Appendices

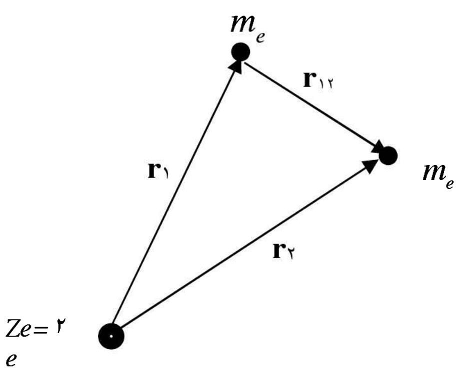
ملحق (A)

نظام الوحدات الذرية

يستخدم نظام الوحدات الذرية بإسهاب في الحسابات الخاصة بميكانيكا الكم، وذلك لمساواة الثوابت الخاصة (مثال لذلك شحنة الإلكترون e وثابت بلانك المعدل $\hbar = h/2\pi$) بالواحد الصحيح. لنأخذ مثالاً على ذلك بالهملتونيان الخاص بإلكتروني ذرة الهيليوم، الذي يعبر عنه بالمعادلة، انظر الشكل (i.)، (مع إهمال حركة النواة):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + k\frac{e^2}{r_{12}} \qquad \text{(i.)}$$

حيث m_e هي كتلة الإلكترون، k ثابت قانون كولومب، و Ze هي شحنة النواة وتساوي $2e$ في حالة الهيليوم.



شكل (i.) إحداثيات تستخدم لوصف ذرة الهيليوم

دعنا نعرف هنا قيم الوحدات الخاصة بحيث إن $\hbar = 1, m_e = 1, e = 1, k = 1/4\pi\varepsilon_o = 1$ فتأخذ المعادلة السابقة الشكل:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \qquad \text{(ii.)}$$

ولا تعتمد على أي ثابت فيزيائي. ونتيجةً لهذا التبسيط فإننا نستطيع أن نبسط جميع الكميات الفيزيائية الأخرى مثل نصف قطر بور a_o :

$$a_o = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 1 \quad \text{(atomic units)} \qquad \text{(iii.)}$$

وتسمى وحدة الأطوال الذرية بالاسم بور.

وتعرف أيضاً الطاقة كالتالي:

$$E = \frac{ke^2}{a_o} = 1 \quad \text{(atomic units)} \qquad \textbf{(iv.)}$$

وتسمى وحدة الطاقة الذرية باسم العالم هارتري (Hartree) ويرمز لها بالرمز $H \equiv$ Hartree.

باستخدام وحدة الطاقة الذرية نجد أن طاقة المستوى الأرضي لذرة الهيدروجين = 0.5- هارتري. الجدول التالي يحتوي على عدد من أسماء القيم الفيزيائية المهمة والقيم المكافئة لها في النظام القياسي.

جدول الوحدات الذرية (باستخدام ثابت التركيب الدقيق α، $\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} = 1/137.036$ وسرعة الضوء في الفراغ c ، $c = 2.99792\times10^8$ m/s)

الكمية ومدلولها الفيزيائي	الوحدات الذرية	الوحدات القياسية
الكتلة (كتلة الإلكترون)	$m_e = 1$	9.1091×10^{-31} kg
الشحنة (شحنة الإلكترون)	$\lvert e \rvert = 1$	1.6021×10^{-19} C
المسافة (نصف قطر المدار الأول لذرة الهيدروجين)	$a_o = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 1$	5.2916×10^{-11} m
العزم الزاوي (ثابت بلانك المعدل)	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1$	1.0545×10^{-34} J.s
السرعة (مقدار سرعة الإلكترون بأول مدار لبور)	$v_o = \alpha c = 1$	2.18769×10^{6} m/s
الطاقة (ضعف طاقة تأين ذرة الهيدروجين)	$E = \frac{ke^2}{a_o} = 1$	4.3594×10^{-18} J = 27.2116 eV
الزمن (الزمن الدوري لحركة الإلكترون بأول مدار لبور)	$\frac{a_o}{v_o} = 1$	2.4189×10^{-17} s

واجب منزلي: احسب القيمة المكافئة للطاقة ١ هارتري في النظام القياسي.

$$1\ \text{Hartree} = \frac{k^2 me^2}{\hbar^2} = \frac{me^2}{(4\pi\varepsilon_o)^2\hbar^2}$$
$$= \frac{(9.1091\text{x}10^{-31}\text{kg})(1.6021\text{x}10^{-19}\text{C})^4}{(1.1126\text{x}10^{-10}\text{C}^2.\text{J}^{-1}.\text{m}^{-1})^2(1.0545\text{x}10^{-34}\text{J.s})^2}$$
$$= 4.3595\times10^{-18}\ \text{J}$$

ومن ثم

$$1\ \text{Hartree}\ (1\ \text{H}) = 4.3595\times10^{-18}\ \text{J}$$
$$= 27.2\ \text{eV} = 2\ \text{Ry}$$

حيث $1\ \text{Ry} = 13.6\ \text{eV}$ هي وحدة أخرى للطاقة، ويقال عنها: وحدة ريدبرج.

تحول الوحدة $1\ \text{Hartree}\ (1\ \text{H}) = 4.3595\times10^{-18}\ \text{J}$ إلى التعريفات التالية:

١- بضربها بعدد أفوجادرو نحصل على

$$1\ \text{Hartree} = 2625\ \text{kJmol}^{-1}$$

٢- لدراسة الأطياف الذرية نلجأ لحساب فرق الطاقة بين المستويات المختلفة باستخدام وحدة معكوس الطول الموجي $\bar{\nu}$ ونستنتج من العلاقة ($E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = hc\bar{\nu}$)

$$\bar{\nu} = \frac{1\ \text{Hartree}}{hc} = \frac{4.36\times10^{-18}\ \text{J}}{(6.626\times10^{-34}\ \text{J.s})(3.0\times10^{8}\ \text{m/s})}$$
$$= 2.195\times10^{7}\ \text{m}^{-1}$$
$$= 2.195\times10^{5}\ \text{cm}^{-1}$$

ملحق (B)

بعض الدوال الرياضية وخواصها

Some Mathematical Functions and their Properties

١- دالة جاما (Gamma Function Γ(n))

إذا بدأنا بالتكامل المعرف:

$$\int_0^\infty e^{-qx}dx = q^{-1} \qquad \text{(i)}$$

وبتفاضل الطرفان بالنسبة للقيمة الثابتة q لعدد n من المرات، فسوف نجد أن:

$$\int_0^\infty x^n e^{-qx}dx = (n!)q^{-(n+1)} \qquad \text{(ii)}$$

وبوضع الثابت $q = 1$، نجد أننا سوف نحصل على تعريفاً للقيمة $n!$ بواسطة التكامل التالي:

$$n! = \int_0^\infty x^n e^{-x}dx \qquad \text{(iii)}$$

ومنه سوف نعرف دالة جاما بالعلاقة:

$$\Gamma(n) \equiv \int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx \qquad n > 0$$

ومن تعرف جاما نحصل على:

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) = n!$$

ولقيم $n < 0$ نستطيع استخدام العلاقة:

$$\Gamma(n) = \frac{\Gamma(n+1)}{n}$$

قيم خاصة لدالة جاما:

$$\Gamma(1) = \Gamma(2) = 1; \qquad \Gamma(\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\pi}, \qquad \Gamma(\tfrac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\Gamma(m + \tfrac{1}{2}) = \frac{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2m-1)}{2^m}\sqrt{\pi}, \qquad m = 1,2,3,\cdots$$

$$\Gamma(-m + \tfrac{1}{2}) = \frac{(-1)^m\, 2^m \cdot 3\cdot 5\cdots(2m-1)}{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2m-1)}\sqrt{\pi}, \qquad m = 1,2,3,\cdots$$

٢- دالة "هيرمت" كثيرة الحدود (Hermite Polynomials $H_n(x)$)

المعادلة التفاضلية لدالة "هيرمت" Differential equation

$$\frac{d^2H_n(x)}{dx^2} - 2x\frac{dH_n(x)}{dx} + 2nH_n(x) = 0$$

تعريف Definition

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right); \qquad n = 0,1,2,3,\cdots$$

تعد الدالة $H_n(x)$ زوجيةً أو فرديةً إذا كان العدد n يأخذ قيماً زوجيةً أو فرديةً بالترتيب:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$$

دالة مولدة Generating function

$$e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{\Gamma(n+1)}H_n(x) \qquad |t|<1$$

علاقات ارتدادية Recurrence relations

$$\frac{dH_n}{dx} = 2nH_{n-1}$$

$$\frac{dH_n}{dx} = 2xH_n - H_{n-1}$$

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}$$

علاقة التعامد Orthogonality relation

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} = \sqrt{\pi} 2^n \Gamma(n+1) \delta_{mn}$$

جدول لبعض القيم

n	$H_n(x)$	n	$H_n(x)$
٠	١	٣	$8x^3 - 12x$
١	$2x$	٤	$16x^4 - 48x^2 + 12$
٢	$4x^2 - 1$	٥	$32x^5 - 160x^3 + 120x$

٣- دالة "ليجندر" كثيرة الحدود (Legendre Polynomials $P_n(x)$)

تعريف Definition

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(x^2 - 1\right)^n ; \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

المعادلة التفاضلية Differential equation

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P_n(x)}{dx^2} - 2x \frac{dP_n(x)}{dx} + n(n+1) P_n(x) = 0$$

دالة مولدة Generating function

$$(1 + 2tx + x^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} t^n H_n(x); \qquad |t| < 1$$

علاقات ارتدادية Recurrence relations

$$(n+1) P_{n+1}(x) = (2n+1) x P_n(x) - n P_{n-1}(x);$$

علاقة التعامد Orthogonality relation

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}$$

جدول لبعض القيم

n	$P_n(x)$	x^n
٠	١	$P_0(x)$
١	$x = \cos\theta$	$P_1(x)$
٢	$\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right)=\frac{1}{4}\left(3\cos 2\theta+1\right)$	$\frac{1}{3}\left(2P_2(x)+1\right)$

٤- دالة "ليجندر" المرافقة كثيرة الحدود Associated Legendre Polynomials

المعادلة التفاضلية Differential equation

$$\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}+\left\{n(n+1)-\frac{m^2}{(1-x^2)}\right\}\right]P_n^m(x)=0$$

تعريف Definition

$$P_n^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_n(x); \qquad n=0,1,2,3,\cdots$$

$$m=0,1,2,\cdots,n$$

$$P_n^0(x)=P_n(x), \qquad P_n^{-m}(x)=P_n^m(x)$$

$$P_n^m(-x)=(-1)^{n+m}P_n^m(x)$$

$$P_n^m(x)=0 \qquad \text{if } m>n$$

دالة مولدة Generating function

$$g(x,h)=(2m-1)!!\frac{(1-x^2)^{m/2}h^m}{\left(1-2xh+h^2\right)^{m+1/2}}=\sum_{n=0}^{\infty}h^n P_n^m(x), \qquad |h|<1, \quad |x|\le +1$$

علاقات ارتدادية Recurrence relations

$$(2n+1)xP_n^m(x)=(n+m)P_{n-1}^m(x)+\left(n-m+1\right)P_{n+1}^m(x);$$

$$(2n+1)\sqrt{1-x^2}P_n^m(x)=P_{n-1}^{m+1}(x)-P_{n-1}^{m+1}(x)(x);$$

علاقة التعامد Orthogonality relation

$$\int_{-1}^{1} P_n^m(x) P_\ell^m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \frac{\Gamma(n+m+1)}{\Gamma(n-m+1)} \delta_{n\ell}$$

جدول لبعض القيم

m	n	$P_n^m(x)$
١	١	$\sqrt{1-x^2} = \sin\theta$
١	٢	$3x\sqrt{1-x^2} = 3\cos\theta\sin\theta$
٢	٢	$3\left(1-x^2\right) = 3\sin^2\theta$
١	٣	$\frac{3}{2}\left(5x^2-1\right)\sqrt{1-x^2} = \frac{3}{2}\left(5\cos^2\theta-1\right)\sin\theta$

٥- دالة "لاجير" كثيرة الحدود (Laguerre Polynomials $L_n(x)$)

المعادلة التفاضلية Differential equation

$$\left[x\frac{d^2}{dx^2} - (1-x)\frac{d}{dx} + n\right] L_n(x) = 0$$

تعريف Definition

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^n\right), \qquad n = 0,1,2,3,\cdots$$

دالة مولدة Generating function

$$\frac{e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n+1)} L_n(x); \qquad |t| < 1$$

علاقات ارتدادية Recurrence relations

$$L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x);$$

$$x\frac{d}{dx}L_n(x) = nL_n(x) - n^2 L_{n-1}(x)$$

علاقة التعامد Orthogonality relation

$$\int_0^\infty e^{-x} L_n(x) L_m(x)dx = \left(\Gamma(n+1)\right)^2 \delta_{mn}$$

جدول لبعض القيم

n	$L_n(x)$	n	$L_n(x)$
٠	1	٢	$x^2 - 4x + 2$
١	$-x+1$	٣	$-x^3 + 9x^2 - 18x + 6$

٦- دالة "لاجير" المرافقة كثيرة الحدود (Associated Laguerre Polynomials $L_n^k(x)$)

المعادلة التفاضلية Differential equation

$$\left[x\frac{d^2}{dx^2} - (m+1-x)\frac{d}{dx} + (n-m)\right] L_n^k(x) = 0$$

تعريف Definition

$$L_n^m(x) = \frac{d^m}{dx^m}\left[L_n(x)\right] \qquad \text{k},n = 0,1,2,3,\cdots$$

$$L_n^0(x) = L_n(x); \qquad L_n^m(x) = 0 \qquad \text{if } m > n$$

دالة مولدة Generating function

$$\frac{(-1)^m t^m}{(1-t)^{m+1}} e^{-xt/(1-t)} = \sum_{n=m}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n+1)} L_n^m(x); \qquad |t| < 1$$

علاقات ارتدادية Recurrence relations

$$\frac{(n-m+1)}{n+1} L_{n+1}^m(x) = (2n-m+1-x)L_n^m(x) - n^2 L_{n-1}^k(x);$$

$$x\frac{d}{dx} L_n^m(x) = (x-m)L_n^m(x) - (m-n-1)L_n^{m-1}(x)$$

$$\frac{d}{dx} L_n^m(x) = L_n^{m+1}(x)$$

علاقة التعامد Orthogonality relation

$$\int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx = \frac{\left[\Gamma(n+1)\right]^3}{\Gamma(n-m+1)} \delta_{mn}$$

جدول لبعض القيم

$$L_0^k(x) = 1; \quad L_1^k(x) = -x + k + 1;$$

$$L_2^k(x) = \frac{x^2}{2} - (k+2)x + \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

$$L_n^k(0) = \frac{(n+k)!}{n!k!}$$

n	m	$L_n^m(x)$	n	m	$L_n^m(x)$
١	١	١-	٣	١	$-3x^2 + 18x - 18$
٢	١	$2x - 4$	٣	٢	$-6x + 18$
٢	٢	2	٣	٣	-6

٧- دوال "بيسيل" من النوع الأول (Bessel Functions of the First Kind $J_\ell(x)$)

المعادلة التفاضلية Differential equation

$$\left[x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + \left(x^2 - \ell^2\right)\right] J_\ell(x) = 0, \qquad \ell \ge 0$$

حلول هذه المعادلة تسمى دوال بيسيل من الدرجة ℓ .

تعريف Definition

$$J_\ell(x) = \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\ell+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\ell+2k};$$

$$J_{-\ell}(x) = \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{\Gamma(k+1)\Gamma(k-\ell+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\ell+2k}$$

$$J_{-\ell}(x) = (-1)^n J_\ell(x); \qquad \ell = 0, 1, 2, \cdots$$

$J_\ell(x)$ تسمى دوال بيسيل من النوع الأول.

إذا كانت $\ell \neq 0,1,2,\cdots$ نجد أن الدوال $J_\ell(x)$ و $J_{-\ell}(x)$ هي دوال خطية مستقلة، وتكون الدوال $J_\ell(x)$ محدودة عند نقطة الأصل، بينما تكون الدوال $J_{-\ell}(x)$ غير محدودة.

دالة مولدة Generating function

$$\frac{e^{-\frac{x}{2}(t-\frac{1}{t})}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} t^\ell J_\ell(x)$$

علاقات ارتدادية Recurrence relations

$$J_{\ell+1}(x) = \frac{2n}{x} J_\ell(x) - J_{\ell-1}(x);$$
$$\frac{d}{dx} J_\ell(x) = \frac{1}{2}\left\{J_{\ell-1}(x) - J_{\ell+1}(x)\right\}$$

جدول لبعض القيم

ℓ	$J_\ell(x)$	$J_{-\ell}(x)$
$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin x$	$\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos x$
$\frac{3}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left[\frac{\sin x}{x} - \cos x\right]$	$\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left[\frac{\cos x}{x} + \sin x\right]$
$\frac{5}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left\{\left(\frac{3}{x^2}-1\right)\sin x - \frac{3}{x}\cos x\right\}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left\{\left(\frac{3}{x^2}-1\right)\cos x + \frac{3}{x}\sin x\right\}$

النوع الثاني من الدرجة ℓ تسمى دوال نيومان، التي تعرف كالتالي:

$$N_\ell(x) = \frac{1}{\pi}\left[2\ln\frac{x}{2} + 2\gamma - \sum_{k=1}^{\ell}\frac{1}{k}\right] J_\ell(x) - \frac{1}{\pi}\sum_{k=0}^{\ell-1}\frac{(\ell-k+1)!}{k!}\left(\frac{x}{2}\right)^{-\ell+2k};$$
$$-\frac{1}{\pi}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(k+\ell)!k!}\left\{\sum_{r=1}^{k}\left(\frac{1}{r}+\frac{1}{r+\ell}\right)\right\}\left(\frac{x}{2}\right)^{\ell+2k}$$
$$N_{-\ell}(x) = (-1)^n N_\ell(x); \qquad \ell = 0,1,2,\cdots$$

وهي غير محدودة عند نقطة الأصل. الرمز γ هو ثابت "أويلر" ويعطى بالقيمة:

$$\gamma = 0.5772156649 = -\psi(1);$$
$$\psi(z) = \frac{d \ln \Gamma(z)}{dz}$$

التجميعات التالية:

$$H_\ell^{(1)} = J_\ell(x) + iN_\ell(x)$$
$$H_\ell^{(2)} = J_\ell(x) - iN_\ell(x)$$

تسمى دوال "هنكل" من النوع الأول والثاني بالترتيب.

٨- دوال "بيسيل" الكروية (Spherical Bessel Functions $j_\ell(x), n_\ell(x)$)

دوال بيسيل الكروية هي حل المعادلة التفاضلية:

$$r^2 \frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + \left[k^2r^2 - \ell(\ell+1)\right]R = 0$$

الحل العام للمعادلة السابقة هو:

$$R(kr) = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(x)$$

حيث A_ℓ و B_ℓ ثوابت اختيارية ودوال بيسيل الكروية تعرف كالتالي:

$$j_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, J_{\ell+\frac{1}{2}}(x)$$
$$n_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, N_{\ell+\frac{1}{2}}(x)$$

و تعرف أيضاً دوال هنكل الكروية كالتالي:

$$h_\ell^{(1)} = j_\ell(x) + in_\ell(x)$$
$$h_\ell^{(2)} = j_\ell(x) - in_\ell(x)$$

$$j_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \left(\frac{\sin x}{x}\right)$$
$$n_\ell(x) = -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \left(\frac{\cos x}{x}\right)$$

جدول لبعض القيم

ℓ	$j_\ell(x)$	$n_\ell(x)$
٠	$\frac{\sin x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x}$
١	$\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x}$	$-\frac{\cos x}{x^2}-\frac{\sin x}{x}$
٢	$\left(\frac{3}{x^3}-\frac{1}{x}\right)\sin x-\frac{3}{x^2}\cos x$	$-\left(\frac{3}{x^3}-\frac{1}{x}\right)\cos x-\frac{3}{x^2}\sin x$

السلوك التقاربي عندما $x \to \infty$ و $x \to 0$ هو

الشرط	$j_\ell(x)$	$n_\ell(x)$
$x \to 0$	$\frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!}$	$\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}$
$x \to \infty$	$\frac{1}{x}\sin\left(x-\frac{\pi}{2}\ell\right)$	$-\frac{1}{x}\cos\left(x-\frac{\pi}{2}\ell\right)$

حيث $(2\ell+1)!!=(2\ell+1)(2\ell-1)(2\ell-3)\cdots 4\cdot 3\cdot 1$

٩- دالة التوافقيات الكروية (Spherical Harmonic Function $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$)

لأي جهد كروي التماثل، $[V=V(r)]$ ، نجد أن الدالة الكلية تأخذ الشكل $R_{n,\ell}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ ، حيث $R_{n,\ell}(r)$ تعرف بأنها الجزء القطري للدالة و $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ تعرف بأنها الدالة التوافقية الكروية.

تعريف Definition

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=(-1)^m\left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}\right]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi}; \qquad m\ge 0$$
$$Y_{\ell,-m}(\theta,\varphi)=(-1)^m Y^*_{\ell,m}(\theta,\varphi);$$
$$\ell=0,1,2,\cdots; \quad m=-\ell,-\ell+1,\cdots,+\ell$$

Differential equation المعادلة التفاضلية

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\ell(\ell+1)\right]Y_{l,m}(\theta,\varphi)=0$$

Orthogonality relation علاقة التعامد

$$\langle \ell m|\ell' m'\rangle=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta\, Y^*_{\ell,m}(\theta,\varphi)Y_{\ell',m'}(\theta,\varphi)=\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

جدول لبعض القيم

l	m	$Y_{lm}(\theta,\varphi)$
٠	٠	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
١	٠	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
١	±1	$\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$
٢	٠	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right)$
٢	±1	$\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi}$
٢	±2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi}$

Recurrence relations علاقات ارتدادية

$$\cos\theta Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=\left[\frac{(\ell+1+m)(\ell+1-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2}Y_{\ell+1,m}(\theta,\varphi)$$
$$+\left[\frac{(\ell+m)(\ell-m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}\right]^{1/2}Y_{\ell-1,m}(\theta,\varphi);$$

$$\sin\theta Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=\left[\frac{(\ell+1-m)(\ell+2-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2}Y_{\ell+1,m-1}(\theta,\varphi)$$
$$+\left\{\left[\frac{(\ell+m)(\ell+m-1)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}\right]^{1/2}Y_{\ell-1,m-1}(\theta,\varphi)\right\}e^{i\varphi}$$

واجب منزلي: تحقق من أن:

$$Y_{l,0}=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$$

مثال: تحقق من الآتي:

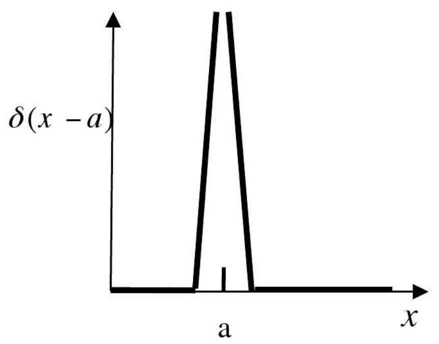
الحل:

$$Y_{3,0}=\sqrt{\frac{7}{4\pi}}P_3(\cos\theta)=\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\frac{1}{2}(5\cos^2\theta-3\cos\theta)$$
$$=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\cos\theta(5\cos\theta-3)$$
$$=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\frac{z}{r}(5\frac{z^2}{r}-3)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\frac{z}{r^3}\left(5z^2-3r^2\right)$$

واجب منزلي: تحقق من الآتي:

$$\psi=x+iy=r\sin\theta\,(\cos\varphi+i\,\sin\varphi)=r\sin\theta\,e^{i\varphi}$$
$$=-\sqrt{\frac{8\pi}{3}}rY_{1,1}$$

١٠- دالة دلتا لديراك (Dirac Delta Function $\delta(x)$)



دالة دلتا لديراك

هذه ليست دالة بالمعنى المتعارف عليه رياضياً، ولهذا فهي تسمى توزيعاً وأيضاً دالة نبضية (Impulse function) . وهي تستخدم للدوال المتصلة وتعرف كالتالي:

$$\delta(x-a)=\begin{cases}0, & x\neq a\\ \infty, & x=a\end{cases}, \qquad (1)$$

لها الخواص التالية (في بعد واحد):

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)dx=1 \qquad (2)$$

ومن المعادلة (٢) نستطيع حساب التكامل:

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x-a)dx=f(a) \qquad (3)$$

وتأخذ الدالة دلتا صوراً وأشكالاً أخرى ولكن المعادلات ٣،٢،١ تكفي لدراستنا.

بعض الخواص الهامة:

- ☞ $\delta(-x)=\delta(x)$ it is an even function دالة زوجية
- ☞ $\delta^*(x)=\delta(x)$ it is a real function
- ☞ $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)dx=1$ It is normalized صفة المعايرة
- ☞ $\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x)dx=f(0)$
- ☞ $f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$
- ☞ $\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)$
- ☞ $\frac{d^2|x|}{dx^2}=2\delta(x)$

ملحق (C)

تكامل كولم

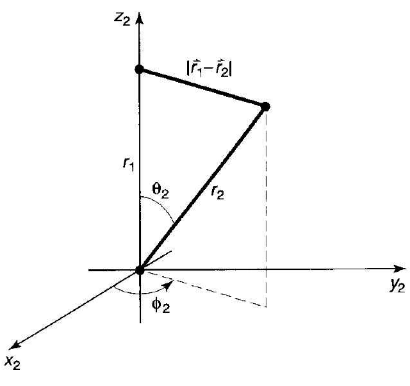
في هذا الملحق سنستعرض تكامل كولم $I(Z)$ ونثبت أن:

$$I(Z) = \int\int \psi_{1s}^{*}(r_1)\psi_{1s}^{*}(r_2)\frac{1}{|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|}\psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 = \frac{5}{8}Z \qquad \text{(i)}$$

حيث $\psi_{1s}(r_i)=\sqrt{\frac{Z^3}{\pi}}e^{-Zr_i}$ هي الدالة المميزة لإلكترون ذرة الهيدروجين بالمستوى الأرضي. مع ملاحظة أن $d\boldsymbol{r}_i = r_i^2 dr_i d\Omega_i = r_i^2 \sin\theta_i d\theta_i d\phi_i dr_i$. هذا التكامل يمثل طاقة التفاعل بين إلكتروني ذرة الهليوم، وذلك بفرض أنهم موزعون بكثافة كهربية تُعطى بالعلاقات:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= -e\psi_{1s}^{*}(r_1)\psi_{1s}(r_1) = -e|\psi_{1s}(r_1)|^2, \\ \rho_2 &= -e\psi_{1s}^{*}(r_2)\psi_{1s}(r_2) = -e|\psi_{1s}(r_2)|^2 \end{aligned} \qquad \text{(ii)}$$

حساب تكامل كولم يعد من المسائل الرياضية الصعبة نتيجة وجود الحد $\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{|r_2-r_1|}$ ومن ثم لا نستطيع فصل المتغيرات. القارئ المبتدئ عليه أن يكتفي بالنتيجة (١) إذا لم تكن خلفيته الرياضية تسمح له بالتكملة.



دعونا نبدأ بتعريف الإزاحة بالصورة:

$$|r_2-r_1| = \sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}$$

حيث $\theta_2=\theta$ هي الزاوية بين المتجهين $\boldsymbol{r}_1$ و$\boldsymbol{r}_2$ (انظر الشكل المرافق). يمكن اعتبار المتجه $\boldsymbol{r}_1$ باتجاه المحور z_2 ويكون التكامل على الزاوية θ_1 بسيط.
التكامل بالمعادلة (١) يمكن وضعه بالصورة:

$$I=\frac{Z^6}{\pi^2}\int_0^\infty e^{-2Zr_1}r_1^2dr_1\int_0^\infty e^{-2Zr_2}r_2^2dr_2\underbrace{\int_0^{2\pi}d\Omega_1}_{4\pi}\underbrace{\int_0^{2\pi}d\phi_2}_{2\pi}\int_0^\pi\frac{\sin\theta d\theta}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}}$$

$$=8Z^6\int_0^\infty e^{-2Zr_1}r_1^2dr_1\int_0^\infty e^{-2Zr_2}r_2^2dr_2\int_0^\pi\frac{\sin\theta d\theta}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}}$$

وباستخدام التعويض $x=\cos\theta$ ولذا $dx=\sin\theta d\theta$ نجد التكامل على الزاوية θ يعطي:

$$\int_0^\pi\frac{\sin\theta d\theta}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}}=\int_{-1}^{+1}\frac{dx}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2xr_1r_2}}=\left.\frac{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2xr_1r_2}}{r_1r_2}\right|_{-1}^{1}$$

$$=\frac{1}{r_1r_2}\left(\sqrt{r_1^2+r_2^2+2r_1r_2}-\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2}\right)$$

$$=\frac{1}{r_1r_2}\left(\left(r_1+r_2\right)-\left|r_1-r_2\right|\right)=\begin{cases}\dfrac{2}{r_1}, & r_1>r_2\\ \dfrac{2}{r_2}, & r_2>r_1\end{cases}$$

ومنه نجد أن:

$$I=16Z^6\int_0^\infty e^{-2Zr_1}r_1^2dr_1[\underbrace{\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1}e^{-2Zr_2}r_2^2dr_2}_{I_1}+\underbrace{\int_{r_1}^\infty e^{-2Zr_2}r_2\,dr_2}_{I_2}]$$

حيث التكاملات:

$$I_1=\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1}e^{-2Zr_2}r_2^2dr_2=\frac{1}{4Z^3r_1}\left\{e^{-2Zr_1}\left(-1-2Zr_1-2Z^2r_1^2\right)+1\right\},$$

$$I_2=\int_{r_1}^\infty e^{-2Zr_2}r_2\,dr_2=\frac{e^{-2Zr_1}}{4Z^2}\left(1+2Zr_1\right)$$

وأخيراً:

$$I=16Z^6\int_0^\infty e^{-2Zr_1}r_1^2dr_1[\frac{e^{-2Zr_1}}{4Z^3r_1}\left(-1+e^{2Zr_1}-r_1Z\right)]=4Z^3\int_0^\infty e^{-4Zr_1}\left(-1+e^{2Zr_1}-r_1Z\right)r_1\,dr_1$$

$$=4Z^3\left(\frac{5}{32Z^2}\right)=\frac{5}{8}Z$$

ملحق (D)

جدول للتفاضلات البسيطة

في الجدول التالي الحروف u و v تستخدم كدوال في المتغير x. الحروف $a,b,\cdots$ و $m,n,\cdots$ تستخدم كثوابت و $i=\sqrt{-1}$.

$\frac{da}{dx}=0$	$\frac{d}{dx}\cos(u)=-\sin(u)\frac{du}{dx}$
$\frac{dx}{dx}=1$	$\frac{d}{dx}\cos(ax)=-a\sin(ax)$
$\frac{d}{dx}(au)=a\frac{du}{dx}$	$\frac{d}{dx}\ln(u)=\frac{1}{u}\frac{du}{dx}$
$\frac{d}{dx}(uv)=u\frac{dv}{dx}+v\frac{du}{dx}$	$\frac{d}{dx}e^{u}=e^{u}\frac{du}{dx}$
$\frac{d}{dx}ax^{n}=nax^{n-1}$	$\frac{d}{dx}e^{ax}=ae^{ax}$
$\frac{d}{dx}\sin(u)=\cos(u)\frac{du}{dx}$	$\frac{d}{dx}e^{ax^2}=2axe^{ax^2}$
$\frac{d}{dx}\sin(ax)=a\cos(ax)$	

ملحق (E)

متطابقات رياضية عامة

$$\sin\theta \pm \sin\varphi = 2\left[\sin(\frac{\theta\pm\varphi}{2})\cos(\frac{\theta\mp\varphi}{2})\right]$$

$$\sin\theta + \cos\varphi = 2\left[\cos(\frac{\theta+\varphi}{2})\cos(\frac{\theta-\varphi}{2})\right]$$

$$\cos\theta - \cos\varphi = -2\left[\sin(\frac{\theta+\varphi}{2})\sin(\frac{\theta-\varphi}{2})\right]$$

$$\sin\theta\sin\varphi = \frac{1}{2}\left[\cos(\theta-\varphi) - \cos(\theta+\varphi)\right]$$

$$\cos\theta\cos\varphi = \frac{1}{2}\left[\cos(\theta-\varphi) + \cos(\theta+\varphi)\right]$$

$$\sin\theta\cos\varphi = \frac{1}{2}\left[\sin(\theta-\varphi) + \sin(\theta+\varphi)\right]$$

$$\sin(\theta\pm\varphi) = \sin\theta\cos\varphi \pm \cos\theta\sin\varphi$$

$$\cos(\theta\pm\varphi) = \cos\theta\cos\varphi \mp \sin\theta\sin\varphi$$

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

$$\sin 2\theta = 2\sin\theta\cos\theta$$

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

$$e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\,\sin\theta, \qquad i = \sqrt{-1}$$

$$\sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}, \quad \cos\theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$$

$$\sinh\theta = \frac{e^{\theta} - e^{-\theta}}{2}, \quad \cosh\theta = \frac{e^{\theta} + e^{\theta}}{2}$$

Series expansion

$$(1\pm x)^n = 1 \pm \frac{n}{1!}x + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 \pm \cdots, \quad |x| < 1,$$

$$(1\pm x)^{-n} = 1 \mp \frac{n}{1!}x + \frac{n(n+1)}{2!}x^2 \mp \cdots, \quad |x| < 1,$$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots, \quad |x| < 1$$

$$e^{|a|} = \sum_n \frac{|a|^n}{n!}$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \cdots, \quad |x| < 1$$

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots, \quad |x| < 1,$$

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \cdots, \quad |x| < 1,$$

$$\tan(x) = x + \frac{x^3}{3} + \frac{2x^5}{15} + \cdots, \quad |x| < 1,$$

ملحق (F)

جدول التكاملات المستخدمة

في الجداول التالية يجب إضافة ثابت التكامل لجميع التكاملات غير المحددة.

$\int dx = x$	$\int \frac{1}{x} dx = \int x^{-1} dx = \ln(x)$
$\int a dx = ax$	$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}, \qquad n \neq -1$
$\int a.f(x) dx = a\int f(x) dx$	$\int e^x dx = e^x$
$\int (u+v) dx = \int u dx + \int v dx$	$\int e^{ax} dx = \frac{1}{a} e^{ax}$
$\int u dv = u\int dv - \int v du = uv - \int v du$	$\int b^{ax} dx = \frac{1}{a\ln(b)} b^{ax}; \qquad b > 0$
$\int \cos(a\theta) d\theta = \frac{1}{a}\sin a\theta$	$\int \ln(x) dx = x\ln(x) - x$
$\int \sin(a\theta) d\theta = -\frac{1}{a}\cos a\theta$	$\int a^x \ln(a) dx = a^x; \qquad a > 0$

تكامل من النوع $\int x^n e^{-ax} dx$

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \qquad n > 1,2,3,\cdots, \qquad a > 0$$

$$\int_0^\infty e^{-ax} dx = \frac{1}{a}, \qquad \int_0^\infty x e^{-ax} dx = \frac{1}{a^2}, \qquad \int_0^\infty x^2 e^{-ax} dx = \frac{2}{a^3}$$

تكامل من النوع $\int x^n e^{-ax^2} dx$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}, \qquad n > 1,2,3,\cdots, \qquad a > 0$$

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1.3.5....(2n-1)}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}. \qquad n > 1,2,3,\cdots, \qquad a > 0$$

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_{0}^{\infty} xe^{-ax^2}dx = \frac{1}{2a}$
$\int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_{0}^{\infty} x^3e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2a^2}$
$\int_{-\infty}^{\infty} x^4e^{-ax^2}dx = \frac{3}{4a^2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_{0}^{\infty} x^5e^{-ax^2}dx = \frac{1}{a^3}$

تكامل من النوع $\int f(\theta)\cos^2\theta d\theta$ و $\int f(\theta)\sin^2\theta d\theta$

$\int_0^x \sin^2(a\theta)d\theta = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$	$\int_0^x \cos^2(a\theta)d\theta = \frac{x}{2} + \frac{\sin(2ax)}{4a}$
$\int_0^\pi \sin^2(\theta)d\theta = \frac{\pi}{2}$	$\int_0^\pi \cos^2(\theta)d\theta = \frac{\pi}{2}$
$\int_0^\pi \theta\sin^2(\theta)d\theta = \frac{\pi^2}{4}$	$\int_0^\pi \theta\cos^2(\theta)d\theta = \frac{\pi^2}{4}$
$\int_0^\pi \theta^2\sin^2(\theta)d\theta = \frac{\pi}{12}(-3+2\pi^2)$	$\int_0^\pi \theta^2\cos^2(\theta)d\theta = \frac{\pi}{12}(3+2\pi^2)$
$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\theta}{\theta^2}d\theta = \pi$	$\int_0^\pi \sin\theta\cos^2(\theta)d\theta = \frac{2}{3}$

تكامل من النوع $\int f(\theta)\sin(ma\theta)d\theta$

$$\int_0^x \sin(a\theta)\sin(2a\theta)d\theta = \frac{\sin(ax)}{2a} - \frac{\sin(3ax)}{6a},$$
$$\int_0^x \cos(a\theta)\cos(2a\theta)d\theta = \frac{\sin(ax)}{2a} + \frac{\sin(3ax)}{6a}$$

$$\int_0^x \sin(a\theta)\sin(ma\theta)d\theta = \frac{\sin\left[(m-1)ax\right]}{2a(m-1)} - \frac{\sin\left[(m+1)ax\right]}{2a(m+1)},$$
$$\int_0^x \cos(a\theta)\cos(ma\theta)d\theta = \frac{\sin\left[(m-1)ax\right]}{2a(m-1)} + \frac{\sin\left[(m+1)ax\right]}{2a(m+1)}$$

تكامل من النوع $\int_0^\infty \frac{x^m}{\left(x^2+a^2\right)^n}dx$

$\int_0^\infty \frac{x}{\left(x^2+a^2\right)^2}dx=\frac{1}{2a^2}$ $\int_0^\infty \frac{x^2}{\left(x^2+a^2\right)^2}dx=\frac{\pi}{4a}$ $\int_0^\infty \frac{x^2}{\left(x^2+a^2\right)^4}dx=\frac{\pi}{32a^5}$	$\int_0^\infty \frac{1}{x^2+a^2}dx=\frac{\pi}{2a}$ $\int_0^\infty \frac{1}{\left(x^2+a^2\right)^2}dx=\frac{\pi}{4a^3}$ $\int_0^\infty \frac{1}{\left(x^2+a^2\right)^4}dx=\frac{5\pi}{32a^7}$

تكامل من النوع $\int x^n \sin^2 x\ dx$

n	$\int x^n \sin^2 x\ dx$
١	$\frac{x^2}{4}-\frac{x\sin 2x}{4}-\frac{\cos 2x}{8}$
٢	$\frac{x^3}{6}-\left(\frac{x^2}{4}-\frac{1}{8}\right)\sin 2x-\frac{x\cos 2x}{4}$
٣	$\frac{3x}{8}-\frac{\sin 2x}{4}+\frac{\sin 4x}{32}\frac{x^4}{8}-\left(\frac{x^3}{4}-\frac{3x}{8}\right)\sin 2x-\left(\frac{3x^2}{8}-\frac{3}{16}\right)\cos 2x$

تكامل من النوع $\int x^n \cos x\ dx$

n	$\int x^n \cos x\ dx$
١	$\cos x+x\cos x$
٢	$2x\cos x+\left(x^2-2\right)\sin x$
٣	$\left(3x^2-6\right)\cos x-\left(x^3-6x\right)\sin x$

تكامل من النوع $\int \sin^n x \; dx$

m	$\int \sin^m x \; dx$
٢	$\frac{x}{2}-\frac{\sin 2x}{4}=\frac{x}{2}-\frac{\sin x \cos x}{2}$
٣	$\frac{\cos^3 x}{3}-\cos x$
٤	$\frac{3x}{8}-\frac{\sin 2x}{4}+\frac{\sin 4x}{32}$
٥	$-\frac{5\cos x}{8}+\frac{5\cos 3x}{48}-\frac{\cos 5x}{80}$
٦	$\frac{5x}{16}-\frac{15\sin 2x}{64}+\frac{3\sin 4x}{64}-\frac{\sin 6x}{192}$
٧	$-\frac{35\cos x}{64}+\frac{7\cos 3x}{64}-\frac{7\cos 5x}{320}+\frac{\cos 7x}{448}$

تكامل من النوع $\int x^n \sin x \; dx$

$$\int x^m \sin x \; dx = -x^m \cos x + m\int x^{m-1} \cos x \; dx .$$

m	$\int x^m \sin x \; dx$
١	$\sin x - x\cos x$
٢	$2x \sin x - \left(x^2-2\right)\cos x$
٣	$\left(3x^2-6\right)\sin x - \left(x^3-6x\right)\cos x$
٤	$\left(4x^3-24x\right)\sin x - \left(x^4-12x^2+24\right)\cos x$
٥	$\left(5x^4-60x^2+120\right)\sin x - \left(x^5-20x^3+120\right)\cos x$
٦	$\left(6x^5-120x^3+720x\right)\sin x - \left(x^6-30x^4+360x^2-720\right)\cos x$

وهناك أيضاً بعض التكاملات القياسية المهمة التالية:

مع ملاحظة أن $d\boldsymbol{r}_i = r_i^2 \sin\theta_i d\theta_i d\varphi_i dr_i$ و $\boldsymbol{q.r} = qr\cos\theta$ حيث تنحصر قيم نهايات التكامل بين القيم التالية: $\varphi = \{0, 2\pi\}$ و $\theta = \{0, \pi\}$ و $r = \{0, \infty\}$.

$$I_1 = \int \frac{e^{-br \pm i\, \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}}}{r} d\boldsymbol{r} = \frac{4\pi}{b^2 + q^2};$$

$$I_2 = \int e^{-br \pm i\, \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}} d\boldsymbol{r} = -\frac{\partial I_1}{\partial b} = \frac{8\pi b}{(b^2 + q^2)^2};$$

$$I_3 = \int \frac{e^{\pm i\, \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}}}{|\,\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\,|} d\boldsymbol{r} = \frac{4\pi}{q^2} e^{\pm i \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}'}$$

$$I_4 = \iint \frac{e^{-2b(r_1 + r_2)}}{r_1} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 = \iint \frac{e^{-2b(r_1 + r_2)}}{r_2} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 = \frac{\pi^2}{b^5}$$

$$I_5 = \iint \frac{e^{-2b(r_1 + r_2)}}{r_{12}} d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 = \frac{5\pi^2}{8b^5}, \qquad r_{12} = |\,\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1\,|$$

$$I_6 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} dt = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega\tau}$$

$$I_7 = \left| \int e^{-br + i\omega r} dr \right|^2 = \frac{1}{b^2 + \omega^2}$$

المراجع

A- English

١. **Nouredine Zettili, “Quantum mechanics, Concepts and Applications”, (John Wiley, ٢٠٠٩).**

٢. **Amit Goswami, “Quantum mechanics”, (Wm. C. Brown , ١٩٩٢).**

٣. **B. H. Bransden and C. J. Joachain, “Introduction to Quantum mechanics”, (Longman Scientific and Technical, London, ١٩٩٤).**

٤. **D. Griffiths “Introduction to Quantum mechanics”, (Prentic-Hall , Englewood Cliffs, N.J. ١٩٩٥).**

٥. **E. Merzbacher, “Quantum mechanics”, ٣rd Ed., (John Wiley, ١٩٩٨).**

٦. **G. Arfeken and H. Weber, “Mathematical Methods for Physicists” ٤th ed. (Academic Press ١٩٩٥)**

٧. **M. Abramowitz and C. A. Stegun, C. A. (Eds.) “Handbook of Mathematical Functions: with formulas, Graphs, and Mathematical Tables”, (New York: Dover, ١٩٧٢).**

٨. **A. Jeffrey , “Table of Integrals, Series, and Products”, Seven Editions.**

٩. **G. Korn , “Mathematical Handbook for Science and Engineers: Definitions, Theorems, and Formulas for Reference and Review” .**

١٠. **Y. Peleg, R. Pnini and E. Zaarur, “Schaum’s outline series, Quantum Mechanics”, (McGraw-Hill ١٩٩٨).**

١١. **D. McMahon Quantum Mechanics Demystified”, (McGraw Hill, ٢٠٠٦)**

-Arabic B

١- "مقدمة في الميكانيك الكمي": تأليف د. هاشم قاسم و د. ضياء المختار، الناشر: جامعه البصرة، الجمهورية العراقية، وزارة التعليم العالي و البحث العلمي ١٩٨٥.

٢- "المنهج الدراسي الأول لميكانيكا الكم": تأليف د.إبراهيم ناصر و د. عفاف السيد عبد الهادي - الناشر: مكتبة النهضة المصرية ٢٠٠٣.

٣- "ميكانيكا الكم بطرق تقريبية": تأليف د.إبراهيم ناصر و د. عفاف السيد عبد الهادي - ٢٠٠٥.

٤- "أساسيات ميكانيكا الكم": تأليف د. حافظ محمد عبد الراضي، دار الزمان للنشر والتوزيع، ٢٠٠٥.

٥- "أساسيات الفيزياء الحرارية والإحصائية": تأليف د.إبراهيم ناصر و د. عبد الله السنيدي - الناشر: مكتبة العبيكان، تحت الطبع.

٦- "قاموس العلوم الرياضية": تأليف د. معروف سمحان، ود. عبد الرحمن أبو عمه، ود. فوزي الذكير- الناشر: جامعة الملك سعود ، النشر العلمي والمطابع.

٧- "المعجم الشامل لمصطلحات مجمع اللغة العربية في العلوم التقنية والهندسية": تأليف د. نبيل عبد السلام هارون-الناشر:دار الحيل-بيروت (١٩٩١).

٨- "معجم المصطلحات العلمية والفنية والهندسية الحديثة": تأليف أحمد شفيق الخطيب، مكتبة لبنان، ٢٠٠٨.

٩- معجم الفيزياء الحديثة لمجمع اللغة العربية.

http://www.arabicacademy.org.eg/FrontEnd/DictionarySearch.aspx

قاموس المصطلحات العلمية

إنجليزي- عربي

A

Absolute	مطلق
Absorption	امتصاص
Activity	فعالية
Angular frequency	تردد زاوي
Annihilation	إفناء
Antiparallel	متضادي التوازي
Approximation	تقريب
Approximation methods	طرق تقريبية
Associate	مرتبط

B

Binding energy	طاقة الترابط
Boundary conditions	شروط حدودية
Bounded	محدودة
Bound state	حالة مرتبطة
Brackets	أقواس

C

Cartizian coordinates	إحداثيات كرتيزية
Classical	تقليدي
Center of mass	مركز الثقل
Closed	مغلق
Coefficient, modulus	معامل
Coherent	ترابط طوري
Condensation	تكثيف
Continuous	متصل، مستمر
Continuous functions	دوال متصلة
Continuity	استمرارية
Continuous states	مستويات متصلة

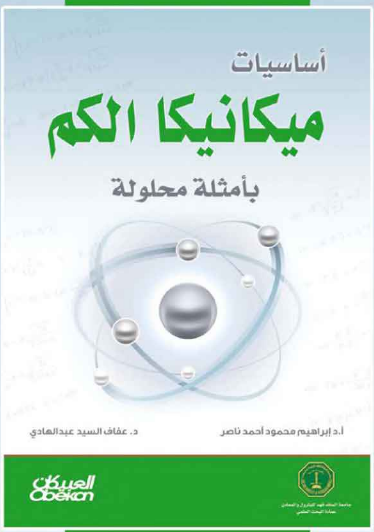
Converge	تقاربية
Creation	خَلق
D	
Degenerate	متعددة الانتماء - تناظر
Degenerate states	مستويات متعدد الانتماء (متناظرة)
Density	كثافة
Density of states	كثافة المستويات
Discrete	منفصل (مقنن)
Discrete states	مستويات منفصلة (مقننة)
Disorder	غير مرتب، عشوائي
Displacement	إزاحة
Duality	ازدواجية
Dipole	ثنائي القطب
Diverge	تباعدي
Discrete functions	دوال منفصلة
Disorder	فوضى، عشوائي، غير منظم
Distinguishable	مميز
Distribution	توزيع
Dummy index	ترقيم شكلي (صوري)
E	
Effect	أثر (ظاهرة)
Effective charge	شحنة مؤثرة
Eigen	مميز
Eigenfunction	دالة مميزة
Eigen-value	قيمة مميزة
Electric dipole moment	عزم ثنائي القطب الكهربي
Electric field	مجال كهربي
Emission	انبعاث
Emissivity	انبعاثية
Empirical	تجريبي، استقرائي

Enclosure	تجويف
F	
Fine structure	تركيب دقيق
Finite, bounded	محدودة
Frequency	تردد
Fusion, Melting	انصهار
G	
Gauge	مقياس
Ground state	مستوى أرضي
H	
Harmonic	توافقي، متناغم
Harmonic oscillator	متذبذب توافقي
Homogeneous	متجانس
I	
Inequality	متباينة
Inhomogeneous magnetic field	مجال مغناطيسي غير متجانس
K	
Kinetic energy	طاقة حركة
L	
Linear combination	تجميع خطي
Linear (discontinuous) spectrum	طيف خطي
Linear momentum	كمية حركة خطية p
Lower limits	النهايات الصغرى
Lowering Operators	مؤثر تنازلي $\hat{L}_-$
Linear operator	مؤثر خطي
L-S coupling	اقتران مداري مغزلي
M	
Macroscopic system	نظام عينى
Magnetic field	مجال مغناطيسي
Magnetic quantum number	عدد كمي مغناطيسي m
Magnetic saturation	التشبع المغناطيسي
Magnetization	التمغنط

Mean life time	متوسط العمر الزمني
Microscopic system	نظام مجهري
Multiplicity	تعددية
Multiple values	متعددة القيم
N	
Non-Degenerate states	مستويات وحيدة الانتماء (منفردة)
Normalized	مُعاير
Normalized constant	ثابت المُعايرة
Normalized function	دالة مُعايرة
Nonrigid	غير ثابت، متحرك
O	
Operator	مؤثر
Orbit	مدار
Orbital angular momentum	كمية حركة زاوية مدارية
Orbital quantum number	عدد كمي مداري
Order	منظم، مرتب
Orthogonal	متعامد
Operator theory	نظرية المؤثرات
Optimum	مثالي
Optimum value	قيمة مثالية
P	
Parallel	متوازيان
Partial derivative	تفاضل جزئي
Permeable	يسمح بالنفاذ
Phase	طور
Phase transformation	تغير في الطور
Photoelectric emission	الانبعاث الكهربائي الضوئي
Polynomial	متعددة الحدود
Potential energy	طاقة جهد
Principle quantum number	عدد كمي رئيس n

Probability	احتمال
Properties	خواص
Q	
Qualitative	كيفي، نوعي
Quantitative	كمي
Quantized energy	طاقة مكممة
Quantum	كمى (جمع كمة)
Quantum mechanics	ميكانيكا الكم
Quantum number	عدد كمي
Quantum State	حالة كمية أو (مستوى كمي)
Quasi-static process	عملية شبه ساكنة
R	
Real	حقيقي
Resonance frequency	تردد رنيني
Restoring force	قوى الإرجاع
Reversible process	عملية عكسية
Rigid	صلب، ثابت
Rigid Rotator	جسم جاسئ دوراني
S	
Second order correction	تصحيح من الدرجة الثانية
Selection rules	قواعد الاختيار
Series	متسلسلة
Singular point	نقطة متفردة
Spherical harmonic function	دالة توافقية كروية $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$
Spherical polar coordinates	إحداثيات قطبية كروية
Spin	دوران مغزلي
Spinor	مغزل
Spin angular momentum	كمية حركة زاوية مغزلية S
Spin space	فراغ مغزلي
Split	انقسام
Spontaneous emission	انبعاث تلقائي

State	مستوى - حالة
State function	دالة الحالة
Step potential	جهد درجي (سُلمي)
Stimulated absorption	(امتصاص محثوث (قسري
Stimulated emission	(انبعاث محثوث (قسري
Superposition principle	مبدأ التراكم
Surrounding medium	بيئة محيطة
Susceptibility	القابلية
Symmetry	تماثل
T	
Theory of relativity	نظرية النسبية
Thermal	حراري
Thermoionic Emission	الانبعاث الإلكتروني الحراري
Total angular momentum	كمية حركة زاوية كلية J
U	
Ultra-violet catastrophe	الكارثة الفوق بنفسجية
Uncertainity	عدم الدقة (عدم التحديد ، عدم التيقن)
W	
Wave function	دالة موجية
Work	شغل
Work function	دالة شغل
V	
Variable	متغير
Vector	متجه
Vibration	ذبذبة
Z	
Zero point energy	طاقة نقطة الصفر



أعد هذا الكتاب للدارسين بلغة الضاد؛ لقلة توافر الكتب الحديثة باللغة العربية في هذا المجال، وقد أثرينا مادته، بحيث يغني عن الرجوع إلى مصادر أخرى في الموضوع نفسه؛ لذلك بدأنا بالمبادئ الأساسية لهذا الفرع، وأنهيناه ببعض الطرق التقريبية الخاصة بميكانيكا الكم التي لها تطبيقات عدة بمختلف الفروع العلمية الأخرى.

وقد حاولنا في هذا الكتاب تبسيط المفاهيم الفيزيائية بأمثلة متعددة ليسهل استيعاب المادة، هذا إضافة إلى الواجبات المنزلية والتمارين التي تثري قريحة القارئ وتروي شغفه، واستعنا ببعض البرامج العلمية، مثل ماثيماتيكا؛ لإجراء الحسابات والرسومات التي نحث أبناءَنا الطلاب على استخدامها ليستطيعوا التأكد من حلولهم وتخيلها.

وفي هذا الكتاب يتعلم القارئ بعض التقنيات الرياضية اللازمة لحل بعض المسائل التي لم نكن نحلم بحلها من قبل.

والله ولي التوفيق،،،

د. إبراهيم ناصر: يعمل حالياً أستاذاً للفيزياء النظرية بجامعة الملك فهد للبترول والمعادن، وقد حصل على البكالوريوس والماجستير في الفيزياء من كلية العلوم، جامعة عين شمس في جمهورية مصر العربية، والدكتوراه من جامعة كونيكتكت بأمريكا. درَّس بجامعات ودول مختلفة، ونشر أكثر من ٦٠ بحثاً في الفيزياء النظرية (ذرية وجزيئية وميكانيكا الكم الإحصائية والليزر).

د. عفاف السيد عبدالهادي: أستاذ الفيزياء النظرية المشارك بجامعة العاشر من رمضان، في جمهورية مصر العربية، وقد حصلت على بكالوريوس الفيزياء من كلية العلوم، في الجامعة نفسها، والماجستير من جامعة كونيكتكت بأمريكا، والدكتوراه من معهد الفيزياء النظرية، جامعة جوهانزكبلر، لنز، النمسا. وعملت بالتدريس بجامعات ودول مختلفة، ونشرت أكثر من ١٥ بحثاً في الفيزياء النظرية الذرية والجزيئية وميكانيكا الكم الإحصائية.

ISBN:978-603-503-101-1
9 786035 03101 1

موضوع الكتاب:
نظرية الكم - الميكانيكا