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:

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

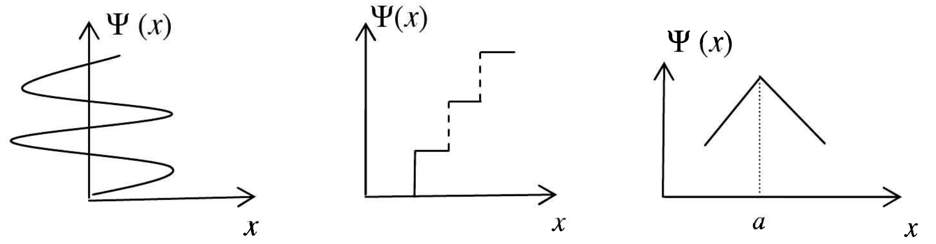
حيث إن الدالة ψ^* هي المرافق المركب للدالة ψ والدالة δ_{ij} تعرف بكرونكر دلتا. حيث إن $\delta_{ij} = 1$ هو شرط المعايرة و $\delta_{ij} = 0$ هو شرط التعامد.

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 $(a,b) \equiv \{a \le x \le b\}$.

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:

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

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

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

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

ب- في المدى $0 \to L/2$ ، نحصل على:

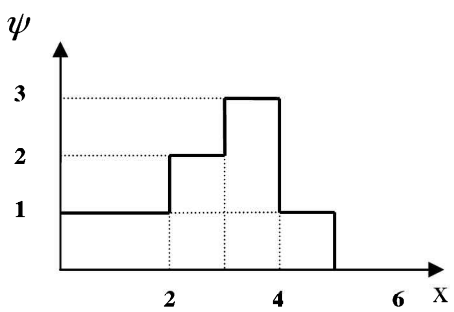
$$\text{Prob.}\{0 \le x \le L/2\} = \left| \frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n}\sin(\frac{2n\pi x}{L}) \right|_0^{L/2}$$

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

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 $\text{X} = \{2,4\}$.



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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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:

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

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

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

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

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

٣- حدد أيا من المعادلات الآتية تحقق معادلة القيم المميزة

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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