الباب الحادي عشر

كمية الحركة الزاوية الكلية

(Total Angular Momentum)

الباب الحادي عشر

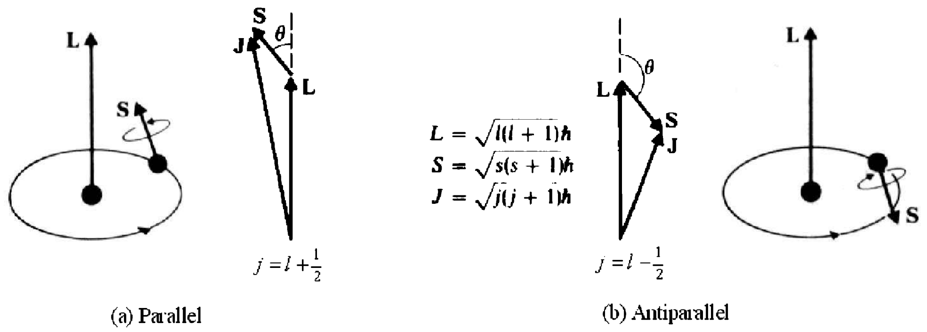
كمية الحركة الزاوية الكلية

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 $(\text{ordinary space} \equiv x, y, z)$ 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:

$$\begin{aligned} &\hat{J}^2 \mid j, m_j > = \hbar^2 j(j+1) \mid j, m_j >, \qquad \mid \hat{J} \mid = \hbar\sqrt{j(j+1)}\,, \\ &\hat{J}_z \mid j, m_j > = m_j \hbar \mid j, m_j > \end{aligned} \qquad (٢)$$

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:

$$\begin{aligned}
&\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \\
&\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}.\hat{S} = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_z\hat{S}_z + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+ \\
&\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_y, \hat{J}_z\right] = i\hbar\hat{J}_x, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] = i\hbar\hat{J}_y \Rightarrow \vec{\hat{J}} \times \vec{\hat{J}} = i\hbar\vec{\hat{J}} \\
&\hat{J}^2 \mid j, m_j > = \hbar^2 j(j+1) \mid j, m_j > \\
&\hat{J}_z \mid j, m_j > = m_j\hbar \mid j, m_j >; \quad \hat{J}_z^2 \mid j, m_j > = m_j^2\hbar \mid j, m_j > \\
&\hat{J}_{\pm} \mid j, m_j > = \hbar\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \mid j, m_j \pm 1 > \\
&\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_-\right] = -\hbar\hat{J}_-, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_+\right] = \hbar\hat{J}_+ \\
&\left[\hat{J}^2, \hat{J}_+\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_-\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_x\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_y\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_z\right] = 0,
\end{aligned} \quad (٣)$$

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:

$$\begin{aligned}
&\left\langle l, m_l, s, m_s \left| \hat{L}^2 \right| l, m_l, s, m_s \right\rangle = l(l+1)\delta_{l, m_l, s, m_s} \\
&\left\langle l, m_l, s, m_s \left| \hat{L}_z \right| l, m_l, s, m_s \right\rangle = m_l \delta_{l, m_l, s, m_s} \\
&\left\langle l, m_l, s, m_s \left| \hat{S}^2 \right| l, m_l, s, m_s \right\rangle = s(s+1)\delta_{l, m_l, s, m_s} \\
&\left\langle l, m_l, s, m_s \left| \hat{S}_z \right| l, m_l, s, m_s \right\rangle = m_s \delta_{l, m_l, s, m_s}
\end{aligned} \quad (٤)$$

وكيف نعلم أن هذه المؤثرات يكون لها نفس الدالة المميزة؟ الحل هو: أن نحسب أقواس التلازم الآتية لنجد أن:

$$\left[\hat{S}^2, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{S}_z\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{S}_z\right] = \left[\hat{S}^2, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{S}^2, \hat{S}_z\right] = 0 \quad (٥)$$

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:

$$\begin{aligned}
\left\langle l,s,j,m_j\right|\hat{L}^2\left|l,s,j,m_j\right\rangle &= l(l+1)\delta_{l,s,j,m_j}\\
\left\langle l,s,j,m_j\right|\hat{S}^2\left|l,s,j,m_j\right\rangle &= s(s+1)\delta_{l,s,j,m_j}\\
\left\langle l,s,j,m_j\right|\hat{J}^2\left|l,s,j,m_j\right\rangle &= j(j+1)\delta_{l,s,j,m_j}\\
\left\langle l,s,j,m_j\right|\hat{J}_z\left|l,s,j,m_j\right\rangle &= m_j\delta_{l,s,j,m_j}
\end{aligned} \tag{٦}$$

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 $\langle l,m_l,s,m_s|$ هي أيضاً دالة مميزة للمؤثر الهملتوني $\hat{H}_o$.

مثال: احسب دوال المستويات الستة في التمثيل المقترن $|j,m_j\rangle$ لإلكترون بالمستوى p بذرة الهيدروجين بدلالة الدوال المنفصلة $|l,m_l,s,m_s\rangle \equiv |l,s\rangle|m_l,m_s\rangle$.

الحل: بالنسبة لذرة الهيدروجين فإن الدالة الكلية تعرف بالتالي:

$$\Psi_{total} \equiv R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\chi_{\pm} = |n,l,m_l\rangle|s,m_s\rangle = |n,l,m_l,s,m_s\rangle = |n,l,s,j,m_j\rangle$$

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 $|j,m_j\rangle$ بالصورة $|j,m_j\rangle'$ حتى يتسنى لنا التفرقة بينها وبين الدالة $|m_l,m_s\rangle$.

للحالة الأولى $j_{\max} = \frac{3}{2}$ نبدأ أولاً بأعلى مستوى الذي له القيمة $m_j = \frac{3}{2}$، وهو

$$\left|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right\rangle' = Y_{1,1}\alpha = |m_l,m_s\rangle = \left|1,\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7}$$

وباستخدام العلاقة العامة (حيث يمكن تغيير المؤثر $\hat{J}$ بالمؤثر $\hat{L}$ أو $\hat{S}$).

$$\hat{J}_{\pm}|j,m_j\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j\pm1)}\,|j,m_j\pm1\rangle$$

فإن المعادلة (7) تأخذ الشكل:

$$\hat{J}_-\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle' = \left(\hat{L}_- + \hat{S}_-\right)\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle \qquad \textbf{(8)}$$

الطرف الأيسر للمعادلة (8) يعطى:

$$\hat{J}_-\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle' = \left[\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)-\frac{3}{2}(\frac{3}{2}-1)\right]^{1/2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' = \sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle' \qquad \textbf{(9)}$$

والطرف الأيمن للمعادلة (8) يعطي (مع ملاحظة أن $\hat{L}_-$ تؤثر على m_l فقط و $\hat{S}_-$ تؤثر على m_s فقط):

$$\begin{aligned}\left(\hat{L}_- + \hat{S}_-\right)\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle &= \hat{L}_-\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle + \hat{S}_-\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle\\ &= \left[1(1+1)-1(1-1)\right]^{1/2}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + \left[\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)\right]^{1/2}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle \qquad \textbf{(10)}\\ &= \sqrt{2}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle + 1\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}$$

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}	$\left\lvert\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$
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:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

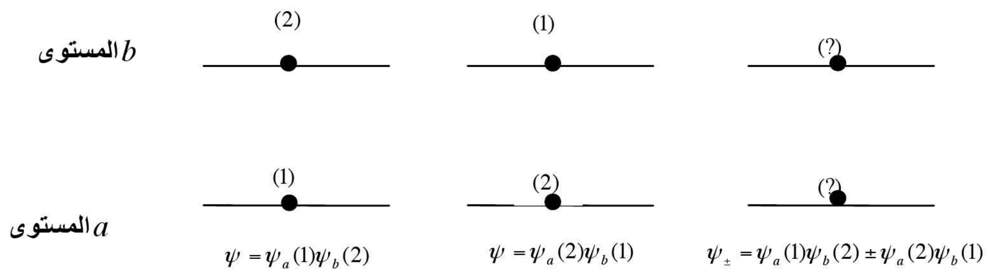
بالإمكان حلها بفصل المتغيرات للجسيمين لنحصل على الدوال المميزة:

$$\psi_a(1) = A\sin\frac{n_a \pi x}{L} \qquad (٢)$$

$$\psi_b(2) = A\sin\frac{n_b \pi x}{L} \qquad (٣)$$

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 (n l 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 $m_s = 2s+1$

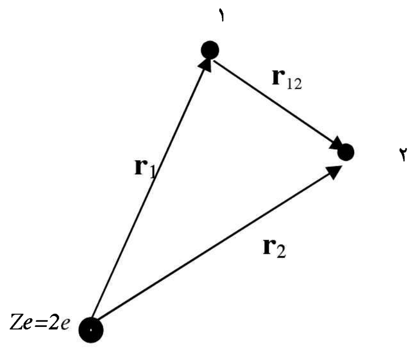
وهناك أعداد كمية أخرى سوف نذكرها لاحقاً.

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 $\frac{1}{\sqrt{N!}}\det|\psi_1(1)\psi_2(2)\cdots\psi_N(N)|$ أو بالشكل $\|\psi_1(1)\psi_2(2)\cdots\psi_N(N)\|$.

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.
