البـــاب الثانـــي

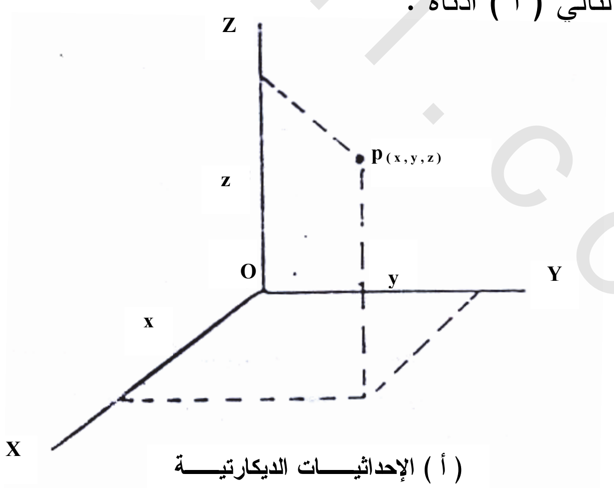
مبادئ رياضيـــة في كيميـــاء الكـــم

مبادئ رياضية : Mathematical Preliminaries :

في هذا الجزء سنركز اهتمامنا علـــى بعـــض الأســـس الرياضـــية التي نحتاجها في توضيح مواد هذا الموضوع المهم وهو كيمياء الكـــم . لـــذا يجب التأكد من أنك قد فهمتها جيدًا .

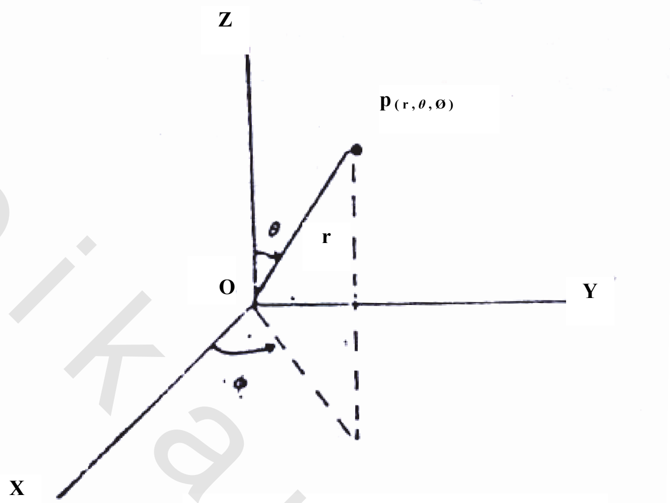
١- الأنظمة الإحداثية : Coordinate Systems :

ونـــذكر هنـــا نظـــامين إحـــداثيين همـــا النظـــام الإحـــداثي الـــديكارتي **Coordinates Cartesian** ونظـــام الإحـــداثيات القطبيـــة الكرويـــة **Polar Coordinates Spherical** ففـــي النظـــام الأول وهـــو الأكثر شيوعًا يمكن تمثيل نقطة **P** في الفـــراغ بواســـطة مـــسافات **x ,y ,z** على طول ثلاثة محاور **X ,Y ,Z** على التـــوالي . وكمـــا هـــو مبـــين فـــي الشكل التالي (أ) أدناه :



(أ) الإحداثيـــات الديكارتيـــة

وفي الإحداثيات القطبيــة الكرويــة يمكــن تمثيــل النقطــة **P** فــي الفراغ بواسطة مــسافة (**r**) وزاويتــين (**Ø . 0**) كمــا هــو مبــين فــي الشكل التالي (ب) .



(ب) الإحداثيـــات الكروية القطبيـــة

ويلاحظ أن الإحداثي **r** يمثل الخط الواصل بين النقطــة **P** ونقطــة الأصل **0** . أما الزاوية **0** فتدعى بالزاوية القطبية في حين تدعى **Ø** بالزاوية السمتية **azimuthal angle** . أما العلاقة بين النظامين الإحداثيين المذكورين أعلاه فيمكن التعبير عنها بالمعادلات التالية :

$$x = r \sin 0 \cos Ø$$

$$y = r \sin 0 \sin Ø$$

$$z = r \cos 0$$

وأيضًا يمكنك إثبات أن :

$$r^r = x^2 + y^2 + z^2$$

أما حدوث الإحداثيات فهي :

$$0 \leq r \leq \chi \ , \ 0 \leq \theta \leq \pi \ , \ 0 \leq ø \leq 2\pi$$

٢- المحـــــددات : Determinants :

ولنأخـــذ المحـــددة ذات الرتبـــة **n** (رتبـــة المحـــددة هـــي عـــدد الصفوف **rows** أو الأعمدة **columns** فيه) .

$$|M| = \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & \cdots & M_{1n} \\ M_{12} & M_{22} & M_{23} & \cdots & M_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ M_{n1} & M_{n2} & M_{n3} & \cdots & M_{nn} \end{vmatrix}$$

ونعرف هنا المصغر **minor** للعنصر M_{rc} على أساس أنه المحـــددة المتبقية بعد حذف الصف **r** والعمود **c** الحاويان علـــى الـــصفر M_{rc} . أمـــا الإشارة التي تسبق المصغر فنحصل عليها بواسطة $(-1)^{r+c}$ والتي تـــسمى بالعامل المرافق **cofactor** للعنصر .

ومن أجل تعيين قيمـــة المحـــددة نـــستخدم طريقـــة لابـــلاز وهـــي تتوضح بالمثال التالي :

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} \equiv a \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$$

$$= a\,(ei - fh) - b\,(di - fg) + c\,(dh - eg)$$

$$= aei - afh - bdi + bfg + cdh - ceg$$

٣- المتجهـــــات : Vestors :

تـــــسمى الكميـــــات التـــــي تمتلـــــك مقـــــدارًا واتجاهـًـــــا بالكميـــــات الاتجاهيـــــة **vector quantities** مثـــــل القـــــوة أو المجـــال الكهربـــائي والتعجيـــل . أمـــا تلـــك التـــي تمتلـــك فقـــط

مقداراً فتدعى بالكميات اللاتجاهية scalar quantities مثل $x^2 + x + 1 , 15$.

ويوضع عادة فوق الرموز التي تستخدم لتمثيل المتجهات علاقة سهم (→) وذلك لتمييزها عن الرموز الأخرى . ومن الملائم العمل مع المتجهات بدلالة مركباتها وهذا يتم بتحديد ثلاثة متجهات وحدة .

وهذه المتجهات الثلاث هي متجهة واحدة unit vector هو المتجه الذي يكون طوله وحدة واحدة) متعامدة على بعضها البعض يرمز لها $\vec{i}$ ، $\vec{j}$ ، $\vec{k}$ وهي تمتد على طول المحاور X , Y , Z على التوالي . وهكذا يمكن كتابة المتجه $\vec{A}$ بالشكل التالي .

$$\vec{A} = A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k}$$

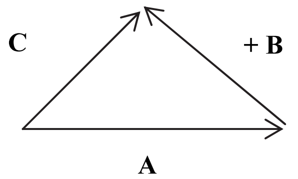
ونكتب متجه r في الشكل السابق (ب) كما يلي :

$$\vec{r} = \overrightarrow{xi} + \overrightarrow{yj} + \overrightarrow{zk}$$

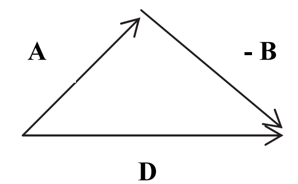
والآن نتطرق بإيجاز لبعض القواعد في المتجهات .

٤- جمع وطرح المتجهات :

إن عملية جمع المتجهات مثل $\vec{A} + \vec{B} = \vec{C}$ يمكن إنجازها بطريقة بيانية أو بطريقة تحليلية . فبيانيًا ، توضع مؤخرة المتجه $\vec{B}$ عند رأس المتجه $\vec{A}$ أما حاصل الجمع الاتجاهي $\vec{C}$ فهو يبدأ عند مؤخرة $\vec{A}$ وينتهي عند رأس $\vec{B}$ كما هو مبين في الشكل التالي (أ) أدناه :



(أ) الجمع الاتجاهي بالطريقة التحليلية



(ب) الطرح الاتجاهي بالطريقة التحليلية

وإذا استطعنا كتابة المتجهين $\overrightarrow{A}$ ، $\overrightarrow{B}$ بدلالة مركباتهما . عندئذ يمكن إنجاز عملية الجمع الاتجاهي بطريقة تحليلية وكما يلي :

$$\overrightarrow{A} = A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k}$$

$$\overrightarrow{B} = B_x \vec{i} + B_y \vec{j} + B_z \vec{k}$$

ويكون الجمع الاتجاهي :

$$\overrightarrow{C} = (A_x + B_x)\, \vec{i} + (A_y + B_y)\, \vec{j} + (A_z + B_z)\, \vec{k}$$

وكما هو الحال مع عملية الجمع الاتجاهي يمكننا معالجة عملية الطرح الاتجاهي $\overrightarrow{A} - \overrightarrow{B} = \overrightarrow{D}$ بطريقة بيانية انظر الشكل السابق وبطريقة تحليلية :

$$\overrightarrow{D} = (A_x - B_x)\, \vec{i} + (A_y - B_y)\, \vec{j} + (A_z - B_z)\, \vec{k}$$

المقدار **Magnitude** أي أن المقدار لأي متجه يعطى بـ:

$\|A\| = (A_x^2 + A_y^2 + A_Z^2)^{1/2}$

٥- حاصل ضرب المتجهات :

هناك نوعان من حاصل ضرب المتجهات :

(أ) حاصل ضرب لا اتجاهي لمتجهين يعطي عددًا ويعرف كالآتي :

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = AB\cos\theta$$

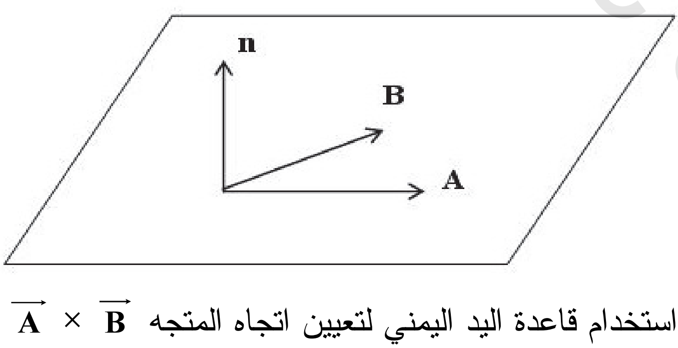
حيث $\mathbf{B}$. $\mathbf{A}$ هما مقدارا المتجهين $\vec{A}$, $\vec{B}$ ، أما θ فهي الزاوية بينهما . وثمة حالة مهمة تبرز لهذا النوع هي : $\vec{A} \cdot \vec{B} = 0$ ولمثل هذه التجربة يقال عن المتجهين بأنهما متعامدان .

(ب) حاصل ضرب اتجاهي المتجهين يعطي متجهًا جديدًا عموديًا على المتجهين **Orthogonal** الأصليين . ويعرف كالآتي :

$$\vec{A} \times \vec{B} = \vec{n} \quad AB\sin\theta$$

حيث $\vec{n}$ هو متجه وحدة عمودي على كل من $\vec{A}$, $\vec{B}$.

أما اتجاه $\vec{n}$ فيحدد بواسطة (قاعدة اليد اليمنى) وتتلخص بأن نضع الحافة السفلى للكف الأيمن على طول المتجه $\vec{A}$ ونلوي الأصابع على طول المتجه $\vec{B}$ وعندئذ يمتد الإبهام باتجاه $\vec{n}$ كما هو مبين في الشكل التالي . ونتيجة لهذه القاعدة يتضح أن الضرب الاتجاهي لا يكون تبادليا أي أن :



استخدام قاعدة اليد اليمني لتعيين اتجاه المتجه $\vec{A} \times \vec{B}$

$$\vec{A} \times \vec{B} \neq \vec{B} \times \vec{A}$$

وبدلالة مركبات المتجهات يمكن كتابة الضرب الاتجاهي $\vec{A} \times \vec{B}$ بصيغة محددة كالآتي :

$$\vec{B} \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}$$

$$= \vec{i} \begin{vmatrix} A_y & A_z \\ B_y & B_z \end{vmatrix} - \vec{j} \begin{vmatrix} A_x & A_z \\ B_x & B_z \end{vmatrix} + \vec{k} \begin{vmatrix} A_x & A_y \\ B_x & B_y \end{vmatrix}$$

$$= (A_yB_Z - A_ZB_y)\vec{i} - (A_XB_Z - A_ZB_X)\vec{j} + (A_XB_y - A_yB_X)\vec{k}$$

٦- الأعداد المعقدة : Complex Numbers :

تتضمن الأعداد المعقدة جزأين : جزء حقيقـــي **real part** وجـــزء خيالي **imaginary part** . ويكتبان كالتالي :

$$D = E + iF$$

حيث **D , E , F** هي أعداد ، وإن $i = \sqrt{-1}$.

وإذا تم استبدال (أينما تكون بـــ **i** – فسيستنتج معقـــد مـــرادف D^* له يكون $E - iF$ = وإن DD^* ستساوي $E^2 + F^2$) لأن $D^* = E^2 - i^2F^2 = E^2 - (-1)F^2 = E^2$ أما قيمة **D magnitude** فهو :

$$\| D \| = (DD^*)^{1/2}$$

وفي عملية جمع وطرح الأعداد المعقدة تستخدم الأجـــزاء الحقيقيـــة والخيالية بصور منفصلة .

٧- المؤثـــــرات : Operators :

المؤثر هو عبارة عن رمز **symbol** يشير إلى إنجـــاز عمـــل مـــا على أي شيء يتبعه فمثلاً في التعبير $\frac{d}{dx}f(x)$ يكون المؤثر ها هنا هو $\frac{d}{dx}$ وهو يأمرنا بعمل التفاضل نسبة إلى **x** لما يتبعه وهو الدالـــة **f (x)** وعـــادة نميز المؤثرات عن بقية الرموز وذلـــك بوضـــع علامـــة رأس ســـهم **(^)** فوقها مثل $\hat{P}$, $\hat{Q}$.

ويقال عن المؤثرين $\hat{P}$, $\hat{Q}$ بأنهمـــا متبـــادلان إذا كـــان $\hat{P}\hat{Q}=\hat{Q}\hat{P}$ ولنفترض على سبيل المثال بأن :

$$\hat{P} = \frac{d}{dx} , \hat{Q} = x$$

وأيضًا نفترض أنه عندنا دالة $f(x) = x^2$ والآن في هذه الحالة هـــل سيكون $\hat{P}\hat{Q}=\hat{Q}\hat{P}$ ؟ لنرى :

$$\hat{P}\hat{Q}f(x) = \frac{d}{dx}(x)(x^2) = \frac{d}{dx}x^3 = 3x^2$$

ملاحظة عندما نتعامل مع المؤثرات يجب أن نكـــون حـــذرين فـــي ترتيب عمل هذه المؤثرات والمعتاد عليه أن نبدأ الكائن على جهـــة اليمـــين ونعمل باتجاه اليسار .

$$\hat{P}\hat{Q}f(x)=(x)\frac{d}{dx}(x^2) = x(2x)=2x^2$$

وهكذا فإن $\hat{P}\hat{Q}\neq\hat{Q}\hat{P}$ ونقول هنا أن $\hat{Q}$, $\hat{P}$ غير متبادلين .

وفـــي ميكانيـــك الكـــم تـــستخدم المـــؤثرات الخطيـــة linear operators فقـــط ، ويكـــون المـــؤثر خطيًـــا إذا كـــان ما يلي صحيحًا :

$$\hat{P}\,(af + bg) = a\hat{P}f + bPg$$

حيث b , a هي ثوابت وإن g , f هما دالتين .

ويعد $\frac{d}{dx}$ مؤثرًا خطيًا ولكن المؤثر ليس مؤثرًا خطيًا فمثلاً :

$$\sqrt{3+4} \neq \sqrt{3} + \sqrt{4}$$

ومن المؤثرات التي يكثر استخدامه في ميكانيك الكـــم هـــو مـــؤثر لا بـــلاز ∇^2 Laplacian operator وهـــو يعـــرف بدلالـــة الإحداثيات الديكارتية كالآتي :

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial 2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

وبدلالة الإحداثيات القطبية الكروية يكتب كالتالي :

$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

٨- معادلات القيمة الذاتية (قيمة إيجن) : Eigenvalue Equations :

إن المعادلة من نوع : $\hat{P}f = cf$.

تسمى بمعادلة القيمة الذاتيـــة ، وذلـــك أن $\hat{P}$ هـــو المـــؤثر الـــذي يؤثر علـــى الدالـــة f وتكـــون النتيجـــة ظهـــور نفـــس الدالـــة مـــضروبة بمقـــدار ثابـــت c وفـــي مثـــل هـــذه الحالـــة تـــدعى الدالـــة f بالدالة الذاتيـــة eigenfunction والثابـــت c بالقيمـــة الذاتيـــة eigenvalue ولنأخذ بعض الأمثلة :

الملاحظات	نتيجة تأثير المؤثر على الدالة	الدالة	المؤثر
لا تكون x^2 دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} x^2 = 2x$	x^2	$\frac{d}{dx}$
تكون e^{cx} دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} e^{CX} = ce^{CX}$	e^{cx}	$\frac{d}{dx}$
لا تكون $\cos x$ دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} \cos x = \sin x$	$\cos x$	$\frac{d}{dx}$
تكون هنا $\cos x$ دالة ذاتية	$\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx} \cos x\right) = \frac{d}{dx}(-\sin x)$ $= -\cos x$	$\cos x$	$\frac{d^2}{dx^2}$

دالتي لاجرنج وهاملتون :

Functions of Lagrange & Hamilton:

تعرف أولاً السرعة والتعجيل بدلالة الإحداثيات الديكارتية وفي اتجاه x بالشكل التالي :

$$x = \frac{dx}{dt} \qquad (\text{السرعة}) \qquad \dots (19)$$

$$x = \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{dx}{dt} \qquad \dots (20)$$

أما قانون نيوتن الثاني في الحركة الذي يربط القوة (على المحور x نرمز لها F_x) المسلطة على جسيم مع تعجيل (x) وكتلة (m) ذلك الجسيم فيكتب كالآتي :

$$F_x = mx \qquad \dots (21)$$

ونفس الشيء مع الاتجاهين الأخريين فنكتب :

$$F_y = my \qquad \dots (22)$$

$$F_x = mz \qquad \dots (23)$$

وكذلك يمكن اشتقاق القوى لنظام محافظ (وهو النظام الذي فيه يكون مجموع طاقتي الجهد والحركية يساوي كمية ثابتة) من الجهد **V** (إن **V** هو دالة للإحداثيات أي أن **(V = V (x , y , z)** وبالشكل التالي :

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial X} \qquad \dots (24)$$

$$F_y = -\frac{\partial V}{\partial y} \qquad \dots (25)$$

$$F_z = -\frac{\partial V}{\partial Z} \qquad \dots (26)$$

ولنظام يتكون من **n** من الجسيمات فإن الطاقة الحركية الكلية **T** (نذكر بأن طاقة الحركية لجسيم واحد وفي اتجاه واحد هي ($\frac{1}{2} mu_x^2$) ستكون :

$$T = \frac{1}{2} m_1 (x_1^2 + y_1^2 + z_1^2) + \frac{1}{2} m_2 (x_2^2 + y_2^2 + z_2^2)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i mi (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) \qquad \dots (27)$$

وبربط المعادلات (21) , (24) , (27) فإن معادلة نيوتن في الحركة يمكن كتابتها بالصيغة التالية :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial t}{\partial X_i} + \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0 \qquad \dots (28)$$

وبصورة مشابهة نكتب :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial y_i} + \frac{\partial V}{\partial y_i} = 0 \qquad \dots (29)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial t}{\partial Z_i} + \frac{\partial V}{\partial Z_i} = 0 \qquad \dots (30)$$

وقد أدخل لاكرانج الدالــة **L** التــي تــساوي الفــرق بــين طــاقتي الحركية والجهد ، أي :

$$L = T - V \qquad \dots (31)$$

وعلى هذا الأساس يمكن إعــادة كتابــة المعــادلات **(28) , (29) , (30)** بالشكل التالي :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial X_i} + \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \qquad \dots (32)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial y_i} + \frac{\partial L}{\partial y_i} = 0 \qquad \dots (33)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial Z_i} + \frac{\partial L}{\partial Z_i} = 0 \qquad \dots (34)$$

حيث إن $\frac{\partial V}{\partial Zi} = \frac{\partial V}{\partial y_i} = \frac{\partial V}{\partial X_i}$ وكذلك :

$$\frac{dT}{dx_i} = \frac{\partial T}{\partial y_i} + \frac{\partial T}{\partial Z_i} = 0$$

وهذه المعادلة تدعى بمعادلات لاجرانج في الحركة .

مثــــال (٥) :

اكتب معادلات نيوتن لحركة جسيم منفرد كتلته **m** واقع فــي مجــال الجذب الأرضي المعرف **V = mgz** حيث **z** هو الارتفاع و **g** تمثــل ثابــت العجلة الأرضية ثم استخدم معادلات لاجرنج في الحركة لإثبــات معــادلات نيوتن التي نحصل عليها في هذا المجال .

الحل :

$$F_X = m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial X} = -\frac{\partial (mgz)}{\partial x} = 0$$

$$F_y = m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y} = -\frac{\partial (mgz)}{\partial y} = 0$$

$$F_X = m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial Z} = -\frac{\partial(mgz)}{\partial Z} = mg$$

ومن هذا يتضح أن القوة والتعجيل الوحيد هما اللذان يقعان في اتجاه z كما متوقع . والآن نكتب دالة لاجرنج كالتالي :

$$L = T - V = \frac{1}{2}\ m\ (\ x^2 + y^2 + z^2\ ) - mgz$$

ونطبق معادلات لاجرنج في الحركة (واحدة بعد الأخرى) وكما يلي :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial X} - \frac{\partial L}{\partial X} = \frac{d}{dt}\ (\ mx\ ) - 0 = 0$$

ومنها نحصل على :

$$m\ddot{x} = 0$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{\partial L}{\partial y}\frac{d}{dt}\ (\ my\ ) - 0 = 0$$

عندئذ يكون :

$$m\ddot{y} = 0$$

وأخيرًا :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial Z} - \frac{\partial L}{\partial Z} = \frac{d}{dt}\ (\ mz\ ) - mg = 0$$

ومنها نحصل على :

$$m\ddot{z} = mg$$

وهذه النتائج متشابهة في الحالتين .

والآن نرجع إلى معادلات لاجرانج في الحركة :

وبدلاً من كتابتها بدلالة z, y, x (أو r, θ, ϕ) يكون من المناسب استخدام إحداثيات عامة يمكنها أن تأخذ دور أي متغير للموقع في الفراغ .

هذه الإحداثيات تعرف بشكل q_i أما السرعة المقابلة لها فهي $\dot{q}_i = dq_i / dt$ ولنظام يحوي N من الجسيمات يوجد 3N من

هذه الإحداثيات و **3N** من السرع المقابلة لها . وهكذا فإن معادلات لاجرانج للحركة تكتب بالصيغة التالية :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \qquad \dots (35)$$

ولجسيم كتلته **m** نكتب العزم p_i بدلالة الإحداثيات العامة كالآتي :

$$P_i = mq_i \qquad \dots (36)$$

ونكتب أيضًا دالة لاجرانج **L** لنظام محافظ بدلالة الإحداثيات العامة بالشكل التالي :

$$L = T - V$$

$$= \sum_i \left[\frac{1}{2} mq_i^2 - V(q_i) \right] \qquad \dots (37)$$

وإذا أجرينا تفاضلاً لهذه المعادلة نسبة إلى السرعة q_i فإننا سنحصل على :

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = mq_i = P_i \qquad \dots (38)$$

الآن نعرف دالة هاملتون **H** (من دون الدخول في اشتقاقات رياضية) بالشكل التالي :

$$H = \sum_i^{3N} p_i q_i - L \qquad \dots (39)$$

إن الدالة الهاملتونية لنظام محافظ تمتلك ميزة مهمة من أنها تمثل الطاقة الكلية للنظام . ولإثبات ذلك نتبع ما يلي :

نعوض في معادلة **(39)** عن **L** بـ $T - V$ وعن P_i بـ $\frac{\partial L}{\partial q_i}$ كما في معادلة **(38)** لنحصل على :

$$H = \sum_i qi \frac{\partial L}{\partial q_i} - T + V \qquad \dots (40)$$

وبما أن الحد $\frac{\partial L}{\partial q_i}$ يساوي $\frac{\partial T}{\partial q_i}$ (لأن V هي دالة للإحداثيات فقط وأن تفاضلها نسبة إلى السرعة يساوي صفرًا) عندئذ تصبح معادلة **(40)** بالشكل التالي :

$$H = \sum_i q_i \frac{\partial T}{\partial q_i} - T + V \qquad \dots (41)$$

ونجد أن الحد الأول في جهة اليمين من المعادلة أعلاه يساوي **2T** ونثبت ذلك كما يلي :

نأخذ جسيما مجيزا على الحركة باتجاه واحد ونكتب الطاقة الحركية له : $T = \frac{1}{2} m q_i^2$

وتفاضلهما نسبة إلى السرعة q_I يعطي : $\frac{\partial T}{\partial q} = m q_i$

وبضرب الطرفين في q_i ينتج لنا :

$$q_i \frac{\partial T}{\partial q_i} = m q_i^2 = 2\left(\frac{1}{2} m q_i^2\right) = 2T$$

وهكذا يكون : $\sum_i q_i \frac{\partial T}{\partial q_i} = 2T$

وبالتالي تصبح معادلة **(41)** كالآتي :

$$H = 2T - T + V = T + V \qquad \dots (42)$$

وهكذا نرى أن H تكافئ الطاقة الكلية للنظام .

والآن نرجع إلى معادلة (**39**) لإيجاد معادلات هاملتون في الحركة وكما يلي :

$$\frac{\partial H}{\partial P_i} = q_i \qquad \dots (43)$$

(لأن **L** هي دالة للإحداثيات والسرعة وبذا فإن تفاضلها نسبة إلـــى الزخم يساوي صفرًا) وكذلك نحصل على :

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = - \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad \dots (44)$$

وإذا عوضنا عن $\frac{\partial L}{\partial C_i}$ من معادلة **(38)** في معادلة **(35)** ســـينتج لنا :

$$\frac{d}{dq_i} P_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad \dots (45)$$

وعندئذ نكتب معادلة **(44)** بالشكل التالي :

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = - \frac{d}{dt} P_i \equiv P_i \qquad \dots (46)$$

$\left(\text{حيث إن } P_i = \frac{dP_i}{dt} \right)$.

وتدعى معادلتا **(43)** ، **(46)** بمعادلات هاملتون في الحركة .

مثـــــال (٦) :

ما هي دالة هاملتون ومعادلات الحركة لجسيم فـــي مجـــال الجـــذب الأرضي الذي ورد في المثال السابق ؟

الحـــــل :

نكتب دالة لاجرنج (كما هو الحال في المثال السابق) الآتي :

$$L = T - V$$
$$= \frac{1}{2} m \left(x^2 + y^2 + z^2 \right) - mgz$$

وإذا جعلنا $x = q_1$, $y = q_3$, $z = q_3$ فإن المعادلـــة أعـــلاه بدلالـــة الإحداثيات العامة تصبح كالتالي :

$$L = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^{3} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} mq_i^2 + mgq_3$$

$$= \frac{1}{2}\, m \sum_{i=1}^{3} q_i^2 + mg\, q_3$$

وهذه المعادلة يمكن كتابتها بدلالة الزخوم ($P_i = mq_i$) كالآتي :

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i} (mq_i)^2 + mg\, q_3$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{i} P_i^2 + mg\, q_3$$

والآن نطبق معادلات هاملتون **(43)** ، **(46)** في الحركة وكما يلي :

$$\frac{\ell H}{\ell P_i} = \frac{\ell}{\ell P_i}\left(\frac{1}{2m}\, P_i^2 + mg\, q_3\right)$$

$$= \frac{P_i}{m} = \frac{mq_i}{m} = q_i$$

وكذلك :

$$= \frac{\ell H}{2\ell q_i} = \frac{\ell}{\ell P_i}\left(\frac{1}{2m} \sum_{i} P_i^2 + mg\, q_3\right)$$

وطالما أن $i = 1, 2, 3$ لذا يمكننا أن نكتب (انظر معادلة **(46)**) الآتي :

$$\frac{\ell H}{\ell q_i} = -\, P_1 = 0 \qquad \text{or} \quad mq_i = 0 \ (\, m\ddot{x} = 0 \,)$$

$$\frac{\ell H}{\ell q_2} = -\, P_2 = 0 \qquad \text{or} \quad mq_2 = 0 \ (\, m\ddot{y} = 0 \,)$$

$$\frac{\ell H}{\ell q_3} = -\, P_3 = mg \qquad \text{or} \quad m\ddot{q}_3 = mg \ \ (\, m\ddot{z} = mg \,)$$

وهذه نفس النتائج التي حصلنا عليها سابقًا .