المدخل إلى ميكانيكا الكم
Introduction to Quantum Mechanics

د. بسام عبدالرحمن شحادة

2007

فهرس المحتويـات

1 حدود الفيزياء الكلاسيكية و الحاجة إلى ميكانيكا الكم
The limits of classical physics & the need for QM **1**
1.1 إشعاع الجسم الأسود Blackbody radiation 2
1.2 الأثر الكهروضوئي The photoelectric effect 12
1.3 أثر كومبتون Compton effect 16
1.4 فرضيات دبرولي De Broglie hypothesis 19
1.5 تجربة حيود الإلكترونات
Electron diffraction experiment 21
1.6 أثر ديراك-كابيتزا The Kapitza-Dirac effect 24
1.7 تجربة الشق المزدوج Double-slit experiment 25
1.8 ذرة بوهر The Bohr atom 29
1.9 أسئلة و تمارين 34

2 أسس الميكانيكا الموجية و التمثيل الموجي للجسيم الحر
Wave mechanics for free particle **37**
2.1 الحزم الموجية Wave packets 37
2.2 مبدأ عدم اليقين The uncertainty principle 45
2.3 معادلة شرودنجر للجسيم الحر
Schrödinger equation for free particle 48
2.4 التفسير الإحصائي للدالة الموجية
Statistical interpretation of the wave function 49
2.5 علاقة الإستمرارية Continuity relation 51
2.6 أسئلة و تمارين 52

3 التركيب الأساسي لميكانيكا الكم
Fundamental structure of quantum mechanics 55
3.1 تمثيل المتغيرات الديناميكية وحساب القيم المتوقعة
Dynamical variables and expectation values 55
3.2 معادلة شرودنجر لجسيم تحت تأثير جهد في بعد واحد
Schrödinger equation with potential in one dimension 58
3.3 معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن
Time-independent Schrödinger equation 59
3.4 نظرية التحليل الطيفي
Spectral decomposition theorem 61
3.5 تمثيل المتغيرات الديناميكية وحساب القيم المتوقعة في فضاء كمية الحركة
Momentum space representation 65
3.6 علاقات التبديل Commutation relations 67
3.7 المؤثرات الهيرميشية Hermitian operators 69
3.8 المؤثرات الخطية Linear operators 70
3.9 علاقات التمام و التعامدات العيارية
Completeness relations and orthonormality 71
3.10 معادلة شرودنجر في ثلاث أبعاد
Three dimension Schrödinger equation 74
3.11 ملخص الفرضيات الأساسية في ميكانيكا الكم
Postulates of Quantum mechanics 76
3.12 أسئلة و تمارين 78

4 تطبيقات ميكانيكا الكم في بعد واحد Applications in one dimension 81
4.1 جسيم في بئر لانهائي Particle in infinite well 81
4.2 تطبيقات على نظرية المفكوك الطيفي
Applications of spectral expansion theory 89
4.3 التماثل The parity 91
4.4 ثوابت الحركة وقوانين الحفظ
Constant of motion and conservation laws 93
4.5 الدوال المميزة لكمية الحركة و الجسيم الحر
Momentum eigenfunctions and free particle 94
4.6 ملخص Summary 98
4.7 أسئلة و تمارين 99

5 الجهود في بعد واحد
One-dimensional potentials 101
5.1 جهد العتبة The potential step 101

5.2 جهد البئر المتناهي: حالة التشتت
The finite potential well: scattering state 110
5.3 جهد البئر المتناهي: حالة الإرتباط
The finite potential well: bound state 114
5.3.1 الحل الزوجي The even solution 116
5.3.2 الحل الفردي The odd solution 119
5.4 حاجز الجهد The potential barrier 122
5.5 جهد دالة دلتا The delta-function potential 127
5.5.1 جهد دلتا: حالة الإرتباط Delta potential: bound state 127
5.5.2 جهد دلتا: حالة التشتت Delta potential: scattering state 130
5.6 ملخص Summary 132
5.7 أسئلة و تمارين 132

6 الحركة التوافقية البسيطة
The Simple harmonic oscillator 137
6.1 المعادلة المميزة للحركة التوافقية البسيطة
Eigenvalue equation for the SHO 137
6.2 حساب دالة التوزيع الكلاسيكية للجسيم المهتز
Classical distribution function 142
6.3 المؤثرات الدرجية و تمثيل المتغيرات الديناميكية
Ladder operators and dynamical variables 144
6.4 حساب القيم المتوقعة بإستخدام الدوال المميزة
Calculating the expectation values using the eigenfunctions 152
6.5 أسئلة و تمارين 156

7 معادلة شرودنجر في ثلاث أبعاد
Schrödinger equation in three dimension 157
7.1 معادلة شرودنجر في نظام المحاور الكارتيزية
Schrödinger equation in cartesian coordinates 157
7.1.1 جسيم في صندوق ثلاثي البعد Particle in a 3-dimensional box 159
7.2 الجهود المركزية Central potentials 164
7.3 معادلة شرودنجر للنظام ذو الجسيمين
The Schrödinger equation for two-particle system 167
7.3.1 الجسيمات غير المتفاعلة Noninteracting particles 168
7.3.2 التفاعل بالجهد المركزي Interaction by central potential 169
7.4 ذرة الهيدروجين The hydrogen atom 171
7.4.1 حلول المعادلة القطرية Radial equation solutions 172
7.4.2 الإنحلال في طيف الهيدروجين The degeneracy of the spectrum 185

7.5 جسيم في جهد كروي لانهائي Particle in an infinite spherical well 188
7.6 الجسيم الحر في الإحداثيات الكروية The free particle in spherical coordinates . 191
7.7 أسئلة و تمارين 191

8 التمثيلات المجردة لميكانيك الكم
Abstract representation of the quantum mechanics 195
8.1 الفضاءات المتجهة و أسس الجبر الخطي
Vector spaces and basic linear algebra 195
8.2 أقواس ديراك Dirac's bra-ket notation 196
8.2.1 فضاء الكِت Ket space 197
8.2.2 فضاء البرا و الضرب الداخلي Bra space and inner products 198
8.2.3 المؤثرات و الضرب الخارجي Operators and outer products 200
8.3 أساسات الفضاءات المتجهة و علاقات التمام
Base vector spaces and completeness relations 204
8.4 التحليل الطيفي للأطياف المتقطعة و نظرية القياس
Spectral decomposition and the measurement theory 207
8.5 الأطياف المستمرة Continous spectra 209
8.5.1 الموقع Position 210
8.5.2 الزخم الخطي Momentum 212
8.6 علاقة عدم اليقين المعممة Generalized uncertainty relation 214
8.7 الديناميكا الكمية Quantum dynamics 216
8.7.1 التطور الزمني و معادلة الحركة
Time evolution and equation of motion 217
8.7.2 علاقة التبديل القانونية Canonical commutation relation 220
8.7.3 الإنتقال المكاني Spatial translations 221
8.8 أسئلة و تمارين 225

9 تمثيل المصفوفات Matrix representation 229
9.1 تمثيل المصفوفات العام بإستخدام الأساسات
General matrix representation using basis 229
9.2 تمثيل المصفوفات بإستخدام متجهات حالة عامة
Matrix representation using generic state vectors 235
9.3 المصفوفات الواحدية و التحويلات التشابهية
Unitary matrices and the similarity transformation 238
9.3.1 بناء المصفوفات الواحدية The construction of unitary matrices 239
9.3.2 الخصائص الجبرية للتحويلات الواحدية
Algebraic characteristics of unitary transformation 240
9.3.3 تبديل الأساسات Change of basis 241

9.4 ملخص Summary 243
9.5 أسئلة و تمارين 244

10 الزخم الزاوي المداري The orbital angular momentum 247
10.1 مؤثرات الزخم الزاوي المداري Operators of the orbital angular momentum . 247
10.2 علاقات التبديل Commutation relations 251
10.3 المتجهات و القيم المميزة لمؤثرات الزخم الزاوي
Eigenvectors and eigenvalues of the angular momentum 253
10.4 الدوال المميزة للزخم الزاوي المداري
Eigenfunctions of the orbital angular momentum 258
10.5 تمثيل المصفوفات لمؤثرات الزخم الزاوي المداري
Matrix representations of angular momentum operators 262
10.6 أسئلة و تمارين 266

11 الزخم الزاوي المغزلي The spin angular momentum 269
11.1 مؤثرات الغزل و علاقات التبديل
Spin operators and commutation relations 270
11.2 الغزل Spin $\frac{1}{2}$ 271
11.3 مصفوفات باولي The Pauli matrices 277
11.4 عزم ثنائي القطبية المغناطيسية الداخلي للإلكترون
Intrinsic magnetic dipole moment for electron 280
11.4.1 العزوم المغناطيسية الخارجية و الداخلية
Extrinsic and intrinsic magnetic moments 280
11.4.2 تفاعل ثنائي القطبية المغناطيسية للإلكترون مع المجال المغناطيسي
The interaction of electron's magnetic dipole moment with magnetic field 281
11.5 أسئلة و تمارين 285

12 تجميع العزوم الزاوية Addition of angular momenta 289
12.1 البُنى الجبرية لجمع العزوم Algebric bases 289
12.2 جمع العزوم المغزلية Adding spins 292
12.3 معاملات كلبش-جوردن Clebsch-Gordan coefficients 294
12.4 جمع جسيمين غزلهما $\frac{1}{2}$ Adding two spin $\frac{1}{2}$ particles 297
12.5 جمع الزخم الزاوي المغزلي و المداري
The addition of the spin-orbital angular momenta 303
12.5.1 العلاقات التكرارية لمعاملات كلبش-جوردن
Recursion relations for the Clebsch-Gordon coeffecients 306

12.5.2 حساب معاملات كلبش-جوردن لنظام جمع الغزل-$\frac{1}{2}$ مع الزخم المداري
Clebsch-Gordon coeffecients for adding Spin-1/2 and orbital momentum system 308
12.6 أسئلة و تمارين 314

13 التفاعلات الكهرومغناطيسية
Electromagnetic interactions 319
13.1 قاعدة الترابط الأدنى The minimal coupling rule 319
13.2 أثر أهرونوف-بوهم Aharonov–Bohm effect 321
13.2.1 الملف اللولبي لأهرونوف Aharonov solenoid effect 321
13.2.2 تجربة أهرونوف و بوهم Aharonov and Bohm experiment 327
13.3 أسئلة و تمارين 327

14 طرق تقريبية Approximation Methods 329
14.1 نظرية الاضطراب المستقلة عن الزمن
Time-Independent perturbation theory 329
14.1.1 الإضطراب للحالات غير المنحلة
Perturbation of non-degenerate states 330
14.1.2 الإضطراب للحالات المنحلة Perturbation of degenerate states 336

A الدوال الخاصة Special functions 347
A.1 دوال ليجندر Legendre functions 347
A.2 دوال ليجندر المزاملة Associated Legendre functions 353
A.3 التوافق الكروي Spherical harmonics 355
A.4 دوال بِسل من النوع الأول Bessel functions of the 1st kind 359
A.5 دوال بسِل الكروية Spherical Bessel functions 367
A.6 دوال لاجوير Laguerre functions 371
A.7 دوال لاجويرالمزاملة Associated Laguerre functions 374
A.8 دوال هيرميت Hermite functions 376

B نظرية شتورم-ليوڤيل Sturm-Liouville theory 381
B.1 مدخل Introduction 381
B.2 المؤثرات التفاضلية الهيرمشية Hermitian differential operators 382
B.3 المعادلات التفاضلية الغير هيرميشية Non-Hermitian ODEq 384

C حساب بعض التكاملات و الصيغ الرياضية
Useful calculus and mathematical formulae 389
C.1 دالة التوزيع الطبيعي Normal distribution function 389

C.2 تكامل الدالة الجاوسية مع الدالة الأسية
Integral of Gaussian function with exponential extension 391
C.3 تكاملات هامة للدوال الأسية Useful integrals of exponential functions 393

المراجع References 395

بســـــم الله الرحمن الرحيـــــــــــم
تقديم الطبعة الأولى

الحمد لله رب العالمين و الصلاة و السلام على أشرف الأنبياء و المرسلين و على إخوانه السابقين من المرسلين، و على آله و صحبه أجمعين، و نحن معهم برحمتك يا أرحم الراحمين. أما بعد: الهدف من الكتاب الحصول على مرجع متكامل في ميكانيكا الكم باللغة العربية، ليكون دعامة أساسية يستند عليها الطالب المتحدث بالعربية في سبر أغوار و فهم هذه النظرية الرائعة. العديد من الدراسات التربوية بينت أن إستيعاب الطلاب في المراحل المبكرة يكون أكبر عند دراستهم بلغتهم الأم.

إن نظرية الكم أُنشئت أساساً، لكن ليس حصراً، لتفسير الظواهر الطبيعية للأنظمة المجهرية. نُعَرف الأنظمة المجهرية بأنها الأنظمة الحساسة لنمط القياس المُتبع للحصول على المعلومات الديناميكية التي تَخُص النظام، كالموقع، كمية الحركة، الطاقة، ... إلخ. إن حساسية هذه الأنظمة تجاه أدوات القياس ناتج عن تفاعلها مع وسائط القياس.

فعلى سبيل المثال عندما نشاهد سيارة تتحرك أمامنا، فإننا نتعامل مع نظام له أبعاد تقارب أبعادنا الجسمية، أي في حدود المتر. يمكننا في هذه الحالة من قياس سرعة السيارة عن طريق حساب الزمن بإستخدام ساعة الإيقاف و قياس المسافة التي قطعتها السيارة بين النقطة الإبتدائية و النقطة النهائية بإستخدام المتر الشريطي. إن أدوات القياس المستخدمة: الساعة، المتر الشريطي، و عيوننا. بينما الوسيط هو الضوء. فلدى إنعكاس الضوء من على السيارة إلى عيوننا نحدد موقعها الإبتدائي كذلك نحدد موقعها النهائي و من ثم نقيس الزمن و المسافة. بالطبع نحن لانفترض أن السيارة ستتأثر بالضوء الساقط عليها و بالتالي لانهتم بالحقيقة أن الضوء يؤثر بضغط ما على السيارة يمكن أن يؤدي إلى تغير الموقع، لأن هذا التغير إن حدث فهو صغير جداً جداً و لايمكن أن ندركه في أي حال من الأحوال. قد نهتم بالتصحيح النسبي إذا كانت السيارة تتحرك بسرعة عالية مُقَاربة لسرعة الضوء، لأنه في هذه الحالة سرعة النظام و سرعة وسيط الإتصال (هنا الضوء أيضاً) متقاربتين.

في المقابل لو أردنا قياس سرعة إلكترون متحرك، فإننا هبطنا إلى نظام ذو أبعاد صغيرة جداً، في حدود 10^{-10} من المتر، فإننا قد نحتاج إلى وسيط مختلف، نحتاج إلى ضوء قصير الموجة ليُقَابل هذا البُعْد. نحن هنا إذاً نتكلم عن أشعة x. لايمكننا إستخدام عيوننا لرؤية أشعة x، لكن نستخدم كاشف مناسب للكشف عن هذه الاشعة، كعداد جايجر مثلاً. إذاً أداة القياس إختلفت في هذه الحالة. بالإضافة إلى ذلك فإن الإلكترون لن يرى أشعة x الساقطة عليه كموجة تنعكس من عليه إلى الكاشف لتحديد موقعه، بل سيرى جسيمات لها طاقة مقاربة لطاقته و سيتأثر بها بل و سيتفاعل معها بشدة و يتشتت بسببها و بالتالي سيتغير موقعه و كمية حركته و طاقته عن القيم الأصلية. بالإضافة إلى ذلك، فإن الأشعة المنعكسة إلى الكاشف لاتعني أنها إنعكست من على جسم أو مادة الإلكترون نفسه، بل تنعكس من على مساحة محيطة بجسم الإلكترون، تُسمى محيط التفاعل و يعبر عنها بما يسمى بالمقطع العرضي للتفاعل. لذلك فإن الموقع المادي للإلكترون لايمكن تحديده بدقة. كل مايمكن تحديده هو حجم أو حيز يُمكن أن يكون يتواجد فيه الإلكترون بإحتمالية كبيرة نسبياً و ذلك قبل حدوث الإنعكاس من على محيطه. هذا النقاش على المستوى المجهري، نابع من

واحدة من أهم أساسات نظرية الكم، والتي تُسمى مبدأ عدم اليقين، و الشهيرة حسب الصيغة التالية: لا يمكن قياس الزخم وموقع الجسيم في نفس الاتجاه بدقة عند نفس الوقت. الدقة هنا تعني أي دقة عشوائية! ماذا تعني هذه الصيغة؟ هل تعني فشل التجربة؟ هل تعني أنه ليس لدينا أجهزة قياس دقيقة؟ في حقيقة الأمر هذا المبدأ هو خاصية أساسية جوهرية وليست لها أي علاقة بأجهزة القياس وعملية و طبيعة القياس، كعدم الدقة أو عدم كفاية التقنية، على الرغم من أن هذه هي الطريقة التي يتم بها النظر إليها بشكل طبيعي. في واقع الأمر، لا يمكن تحديد الموقع والزخم بشكل دقيق في لحظة معينة لشيء معين. مبدأ عدم اليقين لا يقتصر فقط على الموقع والزخم ، ولكنه ينطبق أيضًا على أي كميتين فيزيائيتين مترافقتين قانونيًا.

لهذا السبب سيكون من المنطقي أنه في حالة حديثنا عن الأنظمة المجهرية أن نلجأ إلى مبدأ الإحتمالات. أي أننا نبحث عن دالة توزيع إحصائي تُعطينا معلومات عن القيم الديناميكية للنظام. هذه الدالة الإحصائية تتغير، تنعكس، تنفذ، و تتداخل كالموجات. لذا سنطلق عليها إسم الدالة الموجية للنظام. سنجد لاحقاً أن الحقيقة أبعد من ذلك. إن التمثيل الموجي للأنظمة المجهرية له أسس علمية مثبتة. لكنها حيرت العلماء، كما قد تحير بعض القراء الأعزاء لكن في حقيقة الأمر هي لم تُفرض بداية من أجل إستخدامها كدالة توزيع إحصائية. لكننا نفهمها من الحقيقة التالية: كما إننا نشعر بالضوء كموجة، و يشعر فأرنا الأبيض (الإلكترون) بالضوء كجسيم، فإننا لانشعر بالإلكترون إلا إذا لاحظناه كموجة! هذا حدث منذ أن إكتشفه العالم ج.ج. طومسون في الأشعة المهبطية ما قبل عام 1897م. مرة اخرى أشعة مهبطية cathode ray و ليست جسيمات مهبطية. إذاً لماذا لايكون له موجة تُحْسَب من معادلة موجية، كما هو الحال للأشعة و الموجات الصوتية؟ إن هذه الإزدواجية الموجية-الجسيمية مع مبدأ عدم اليقين أدرجت ما يسمى بالإطار الأساسي لنظرية الكم.

لا تزال المفاهيم والتفسيرات الخاصة لنظرية الكم مفتوحة حيث لم تتم الإجابة على جميع الأسئلة على الرغم من كل الجهود التي بذلت خلال المائة عام الماضية، لكن يبقى هناك مسائل لم تحل، و أسرار لازالت عميقة و لم تُسبر أغوارها. قد لاتتعلق المشاكل في بنية النظرية نفسها بل ربما بسبب طرحنا للتساؤلات بطريقة خاطئة. إن إكتشاف الطريقة الصحيحة للتفكير في المسألة ربما يُظهر فيزياء جديدة، قد تُسهم في حل بعض المسائل المعلقة في نظرية الكم.

على المستوى التشغيلي، ميكانيكا الكم أبسط من الميكانيكا الكلاسيكية. الرياضيات كذلك أبسط! وهي قادرة على تفسير و شرح مجموعة واسعة من الظواهر الفيزيائية. بقدر ما نعلم أنه لا توجد انتهاكات أو مخالفات لميكانيكا الكم. لكن ما لا نعلمه هو هل هذه التفسيرات كاملة بشكل مرضي أم لا. بكلام آخر، لا نعلم ما إذا كانت هذه النظرية كاملة، ولا نعلم ما إذا كانت تُعطي إجابات على جميع الأسئلة. في المقابل، هذه النظرية كأداة حسابية، ناجحة للغاية، وكطريقة لفهم الظواهر الأساسية، تبدو أنها الأكثر أساسية لجميع المواضيع، حيث أن كل المواضيع في النهاية تتحول إلى ظواهر كمية.

قلنا أن نظرية الكم تُطبق أساساً على الأنظمة المجهرية مثل الإلكترونات والذرات ... إلخ. هذا صحيح جزئيًا فقط! في الواقع، نظرية الكم تنطبق على كل شيء! بما فيها حياتنا اليومية، حركة المجرات، و ظواهر الكون، تماماً كما أفترضنا أنها تنطبق على الإلكترونات والفوتونات والجسيمات الأولية. لكن تجليات ميكانيكا الكم تصبح أكثر دراماتيكية عندما تُنَطْبَق على الأنظمة المجهرية. في المقابل، تحوي ميكانيكا الكم على تفسيرات مثيرة للغاية على المستوى العيني. على سبيل المثال، الأجسام الصلبة، مثل الأرضية التي نجلس عليها، وحقيقة أن المادة لا تخترق جسماً صلباً يعود في الأصل إلى مبدأ باولي للإستبعاد و الذي يعتبر مبدأً كمياً بإمتياز. العديد من الظواهر في حياتنا اليومية، مثل المغناطيسية والتوصيل الكهربائي وانتشار الموجات الصوتية في المواد الصلبة ، جميعها ظواهر كمية غير قابلة للتفسير بإستخدام الفيزياء التقليدية. هذا عدا الظواهر المكتشفة حديثاً، كالموائع الفائقة و الموصلات الفائقة، والتي يتم تقديمها حصرياً كظواهر كمية.

إن الإنتقال إلى هذه المفاهيم له حدوده و له آلياته سوف نتطرق إليها في هذا الكتاب. لكن في المقابل، لهذا الكتاب نطاق لن نتجاوزه. أهم مافيه هو إننا سنلقي الضوء على الأنظمة المجهرية غير النسبية و التي لا تفنى و لا تُسْتَحْدَث. طبعاً هذا حالة خاصة جداً في الطبيعة. لكن المفاهيم المتستخدمة تبقى أساسية و هامة في حالة ما إذا أراد القارئ الإنتقال إلى حالات أعم أو أراد أن يرى الصورة الأكثر كمالية، و ليست الكاملة طبعاً، لأن الصورة الكاملة غير معروفة.

نلخص أهداف هذا الكتاب كالتالي:

- معرفة الحد الفاصل بين الفيزياء الكلاسيكية و الفيزياء الكمية.
- التعرف على التجارب المهمة التي مهدت الطريق لتطور ميكانيكا الكم.
- إستيعاب و فهم معاني سعة الإحتمالية و مفهوم التداخل و التي يعتبر قلب فلسفة الفيزياء الكمية.
- المقدرة على دراسة ميكانيكا الكم للجسيم الواحد و ذلك للدرجات الحرية الخارجية (single-particle quantum mechanics for external degrees of freedom).
- التعرف على بعض التركيبات الرياضية لميكانيكا الكم: المؤثرات (operators)، القيم المتوقعة (expectation values)، التبديلات (commutations).
- فهم و إستيعاب التداخل بين التركيب الرياضي لميكانيكا الكم (معادلة شرودنجر كمعادلة تفاضلية جزئية) و التفسير الفيزيائي المبني على أسس الإحتمالية، مبدأ عدم التحديد، و الترابط (correlation).
- دراسة بعض الإنظمة الكمية في بعد واحد (المتذبذب التوافقي البسيط) و ثلاث أبعاد (ذرة الهيدروجين).

في نهاية دراسة المقرر من هذا الكتاب، على الطالب أن يكون قادراً على التالي:

1. حل مسائل أساسية في ميكانيكا الكم للجسيم المنفرد في بعد واحد و ثلاث أبعاد.
2. إعطاء تفسيرات ومعاني فيزيائية للمعادلات و النتائج الرياضية (تفسير معاني المؤثرات، الدالة الموجية، تمثيل الحالات بإستخدام أساسيات مختلفة، و علاقة عدم التحديد لهايزنبرج للظواهر الكمية).
3. فهم و إستيعاب معنى التداخل (interference) الناتج عن جمع سعات الإحتمالية.

ختاماً نتمنى من الله العلي القدير أن يكون عملي هذا خالصاً لوجهه الكريم و نافعاً لأمتنا العظيمة.

1

حدود الفيزياء الكلاسيكية و الحاجة إلى ميكانيكا الكم
The limits of classical physics & the need for QM

في هذا الباب سنراجع سلسلة التجارب الهامة التي أجريت في نهاية القرن التاسع عشر و بداية القرن العشرين و التي أعطت نتائج تتناقض تماماً تنبآت الفيزياء الكلاسيكية. سلسلة التجارب الآنفة الذكر بدأت بدراسة طيف إشعاع الجسم الأسود blackbody spectra و من ثم الظاهرة الكهروضوئية photoelectric effect. الفيزياء الكلاسيكية فشلت في تفسير نتائج هاتين التجربتين و بالتالي أصبحت في أزمة حقيقية. حيث إنه من الصعب التخيل أن عمل أجيال عديدة من مشاهدات و إثباتات بدأت مع بداية الحضارات البشرية و حتى عهد النهضة الأوربية و ثُبتت في العصر الحديث و أدت إلى التطور الصناعي و التقدم العلمي في الفيزياء، الفلك، و الرياضيات قائم على أسس علمية خاطئة أو مبني على منظور خاطيء.

لكن الجهود الحثيثة من العديد من العلماء الآوائل ذوي العقول النيرة من مؤسسي الفيزياء الحديثة، تمكنت من تفسير هذه التجارب بفرضيات تختلف إختلافاً جذرياً مع أسس الفيزياء الكلاسيكية. هذه الفرضيات قائمة على أساس أن طيف إشعاع الجسم الأسود و الأثر الكهروضوئي ناتج عن تفاعل الضوء مع ذرات المادة، أي انه تفاعل على نطاق مجهري. ذرات المادة بدورها لا ترى الضوء كموجات –كما نراها نحن في مقياسنا فوق المجهري- بل كجسيمات مادية. أي أن العلماء عادوا 200 عاماً إلى الوراء، و بالتحديد إلى نظرية طبيعة الضوء الأصلية لنيوتن. هذه فرضيات جذرية، ألمحت إلى وجود قصور في المعالجة الشاملة للفيزياء الكلاسيكية و ذلك على نطاق المقياس المجهري (أو الميكروسكوبي microscopic scale)، بالرغم من نجاح المعالجة الكلاسيكية على نطاق المقياس فوق المجهري (أو الماكروسكوبي macroscopic scale)[1].بعد النجاحات الأولية في تفسير طيف إشعاع الجسم الأسود على يد ماكس بلانك Max Planck و من ثم الظاهرة الكهروضوئية على يد ألبرت أينشتين Albert Einstein في نطاق ماوراء المنظورالكلاسيكي، و إعتبار أن الضوء يتفاعل مع الأنظمة المجهرية كجسيمات أو كمات و ليس كموجات، أجرى العلماء المزيد من التجارب التي أيدت هذه التفسيرات، مثل تجربة أثر كومبتون Compton effect experiment.

بالمقابل، فإن فرضية الطبيعة الجسيمية (أو المادية إذا أمكن القول or matter so to speak) للضوء لدى تفاعله مع الأنظمة المجهرية جعلت العلماء يستنتجون أن للجسيمات المادية – مثل الإلكترون و البروتون- طبيعة موجية لدى تفاعلها مع الأنظمة فوق المجهرية أو الماكروسكوبية. هذا الإستنتاج عُرِف بما يسمى فرضيات دبرولي De Broglie hypothesis و الذي غير نظرة العلماء إلى المادة تغيراً جذرياً. لقد تم إثبات فرضيات دبرولي De

[1] هنا صنفنا النسبية الخاصة و العامة ضمن نطاق الفيزياء الكلاسيكية. لذلك إعتبرنا حدود الفيزياء الكلاسيكية تعتمد فقط على المقياس scale دون أي إعتبار للسرعات التي قد يمتلكها النظام. لاحقاً سنحدد بطريقة رياضية حدود الفيزياء الكلاسيكية أو بالأحرى الحدود التي تفصل بين المقياس الميكروسكوبي و الماكروسكوبي.



شكل (1.1): رسم توضيحي للمنظور الميكانيكي لدى تطبيقها على أنظمة عند حالات مختلفة من السرعات و المقياس.

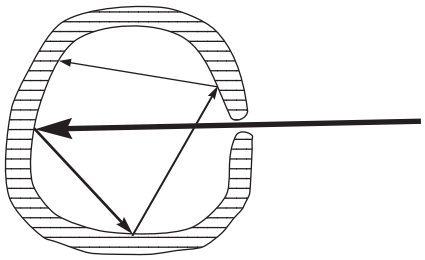
Broglie hypothesis بشكل قاطع عن طريق تجربة الحيود الإلكتروني electron diffraction experiment على يد دافيسون و جيرمر Davison and Germer و الذي أدى بالتالي إلى بزوغ مايسمى ميكانيكا الكم القديمة و التي أستخدمها بور Bohr لوضع أنجح نموذج فيزيائي –في ذلك الوقت- لنظام ميكروسكوبي، ألا و هي ذرة الهيدروجين.

بالرغم من تفوق نموذج بور- سومرفيلد Bohr-Sommerfeld atomic model مقارنة مع النماذج السابقة، مثل نموذج البطيخة لطومسون plum-pudding model، و نموذج رذرفورد Rutherford model القديم، حيث إستطاع من التنبأ و حساب أطياف ذرة الهيدروجين بدقة معقولة، إلا إنها فشلت في: تفسير الإستقرار الذري، التغير في شدة خطوط الطيف الذري، و تفسير الخصائص الكيميائية و الفيزيائية للمواد. مما جعل العديد من العلماء، مثل فيرنر هايزنبرج Werner Heisenberg و إروين شرودنجر Erwin Schrödinger و ماكس بورن Max Born إلى تعزيز مفهوم ميكانيكا الكم بشكل جبري وذلك بإيجاد المعادلة الموجية للجسيمات المادية بناءً على الأسس الكلاسيكية لقوانين نيوتن و معادلات هاميلتون و لاجرانج، بالإضافة إلى إدخال المفهوم الإحصائي لتفسير المعنى الفيزيائي للدالة الموجية الجسيمية. هذا أدى إلى المزيد من النجاحات لهذه النظرية في تفسير الظواهر الذرية و الجزيئية و حدوث التطور الهائل في عصرنا الحديث فيما يعرف بثورة تكنولوجيا النانو the revolution of nanotechnology.

إن تطور ميكانيكا الكم لم يتوقف عند هذا الحد، بل تم صياغة ميكانيكا الكم النسبية على يد بول ديراك Paul A. Dirac و ولفجانج باولي Wolfgang Pauli و ظهور فرضية الأجسام المضادة و التي أدت إلى ظهور ميكانيكا كم المجالات quantum field theory على يد علماء معاصرين مثل ريتشارد فاينمان Richard Feynman، جوليان شوينجر Julian Schwinger، توماناكا Sin-Itiro Tomonaga، و موراي جيلمان Muray Gillmann و آخرون لايسعنا حصرهم. هذه النظرية هي الأساس المتبع من أجل معرفة التراكيب الأساسية للمادة و تفسير نشأة الكون. إن موقع ميكانيكا الكم مقارنة مع النظريات الأساسية الأخرى موضح في الشكل (1.1).

1.1 إشعاع الجسم الأسود Blackbody radiation

يُعرَف الجسم الأسود على أنه مادة قادرة على إمتصاص جميع الأطوال الموجية للإشعة الكهرومغناطيسية. إن أفضل تقريب للجسم الأسود المثالي عبارة عن تجويف cavity لأي مادة. التجويف مطلي بالسناج الأسود lampblack حيث تدخل الأشعة الكهرومغناطيسية إليه خلال فتحة ضيقة و بالتالي تتعرض الأشعة الداخلة لسلسلة من الإنعكاسات و الإمتصاصات حتى يتم بالنهاية من إمتصاص الأشعة بالكامل و بالتالي ترتفع درجة حرارة الجسم الأسود حتى



شكل (1.2): تجويف مطلي بالسواد بفتحة ضيقة يكافئ تقريباً الجسم الاسود المثالي حيث يتم داخله من إمتصاص الأشعة بالكامل.

درجة حرارة الإتزان T. حسب قانون كيرشوف Kirchhoff للإشعاع الحراري، فإن الجسم الممتص الجيد لأشعة عند طول موجة ما، هو أيضاً مشع جيد للأشعة عند نفس الطول الموجي. لهذا السبب و عند درجة حرارة الإتزان T فإن الجسم الأسود بدوره يقوم بإعادة إصدار الإشعة لجميع الأطوال الموجية. لهذا فإنه من المتوقع أن يكون طيف إشعاع الجسم الأسود مستمراً continuous spectrum. إن نتائج القياس العملي لطيف إشعاع الجسم الأسود موضح في الشكل (1.3) للشدة $I(\lambda, T)$ كدالة للطول الموجي λ عند درجة حرارة إتزان T و كذلك في الشكل (1.4) للشدة $I(\nu, T)$ كدالة للتردد ν عند درجة حرارة إتزان T. من النتائج العملية نلاحظ التالي:

1. طيف إشعاع الجسم الأسود هو بالفعل طيفاً مستمراً، لكن شدة الإشعاع المنبعثة من الجسم الأسود تتغير مع طول الموجة λ (أو التردد ν) حيث تصل الشدة الإشعاعية إلى قيمة عظمى (أو قمم للشدة intensity peaks) ثم تعاود الإنخفاض. مقدار التردد عند القمة يرمز له بالرمز ν_{peak}.

2. إن تردد القيم العظمى ν_{peak} (أو تردد القمم من الآن و صاعداً) تنزاح بإتجاه الترددات العالية (أو الأطوال الموجية القصيرة) كلما إرتفعت درجة الحرارة.

3. إن الإزاحة في تردد القمم الناتجة عن تغير درجة الحرارة هي إزاحة خطية، أي أن الإزاحة تتم بنفس المقدار عندما تتغير درجة الحرارة بمقدار ثابت (لاحظ في الشكل (1.4) المسافة بين القمم ثابتة عند الإنتقال من درجة حرارة $1000^\circ\,\text{K}$ إلى $2000^\circ\,\text{K}$ بزيادة ثابتة مقدارها $500^\circ\,\text{K}$). حيث نجد أن

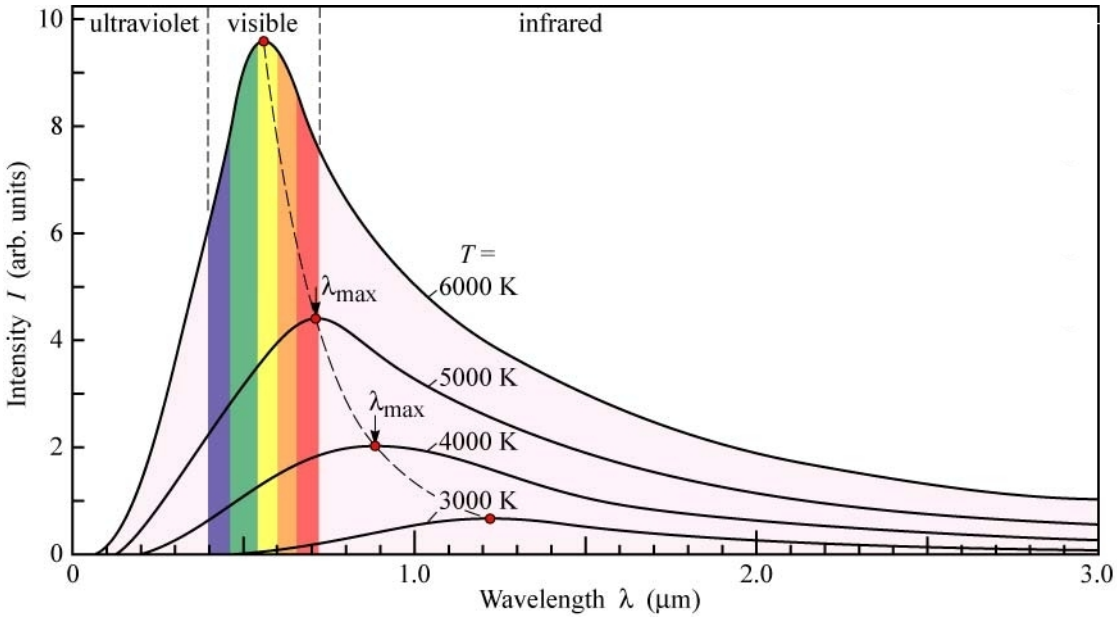
$$\nu_{\text{peak}}(T = 1000^\circ\,\text{K}) = 1.03 \times 10^{14}\text{Hz}$$
$$\nu_{\text{peak}}(T = 1500^\circ\,\text{K}) = 1.55 \times 10^{14}\text{Hz}$$
$$\nu_{\text{peak}}(T = 2000^\circ\,\text{K}) = 2.07 \times 10^{14}\text{Hz}$$

أي أن هناك إزاحة مقدارها $0.52 \times 10^{14}\text{Hz}$ في قيمة التردد عند القمة ν_{peak} لدى تغير درجة الحرارة بمقدار $500^\circ\,\text{K}$. إذاً التردد عند القمة ν_{peak} يتناسب خطياً مع درجة الحرارة T أي أن

$$\nu_{\text{peak}} \propto T.$$

4. إن المساحة تحت منحنى الشدة، و التي تُحسَب رياضياً بالتكامل $\int_0^\infty I(\nu, T)d\nu$، تُمَثل فيزيائياً فيض الطاقة الكلية المنبعثة من الجسم الأسود عند درجة حرارة إتزان T و هي تزداد بشكل مطرد مع زيادة درجة الحرارة. لكن قيمها متناهية finite.

إن التناسب الخطي بين التردد عند القمة ν_{peak} و درجة الحرارة T في الملاحظة الثالثة يستفاد منه عملياً في تحديد درجة حرارة النجوم. فلو إعتبرنا، على سبيل المثال، أن الشمس جسم أسود سنجد أن درجة حرارة الشمس هي $5800^\circ\,\text{K}$. بالمقارنة مع الشكل (1.3) نستطيع أن نعلم أن جُل إشعاع الشمس سيكون ضمن نطاق الضوء المرئي. كذلك في الملاحظة الرابعة الزيادة المطردة في الطاقة الكلية المنبعثة من الجسم الأسود مع زيادة درجة الحرارة تتفق مع قانون ستيفان-بولتزمان Stefan–Boltzmann للإشعاع الحراري و الذي ينص على أن فيض الطاقة المُنبعثة



شكل (1.3): التوزيع الطيفي لإشعاع الجسم الأسود عند درجات حرارة مختلفة كدالة للطول الموجي. لاحظ أن القمم تنزاح ناحية الأطوال الموجية القصيرة كلما إرتفعت درجة الحرارة حتى تصل إلى اللون الأحمر من الضوء المرئي عند درجة حرارة 5000° K. عند درجة حرارة 6000° K فإن معظم الإشعاع يكون ضمن نطاق الضوء المرئي.

$I(T)$ (فيض الطاقة هو مقدار الطاقة المُشعة خلال وحدة المساحة في وحدة الزمن) من جسم عند درجة حرارة T تعطى من العلاقة

$$I(T) = \sigma T^4, \tag{1.1}$$

حيث أن σ هو ثابت ستيفان-بولتزمان قيمته تساوي $\sigma = 5.670400(40) \times 10^{-8}\,\mathrm{W\,m^{-2}K^{-4}}$. طبقاً للنظرية الكلاسيكية، و عند درجة حرارة الإتزان، فإن الأشعة الكهرومغناطيسية داخل تجويف الجسم الأسود تكون موجات موقوفة standing waves. لو أخذنا أنماط modes الموجات الموقوفة المتكونة في بعد واحد مقداره L كما في الشكل (1.5) فإننا نلاحظ أنه

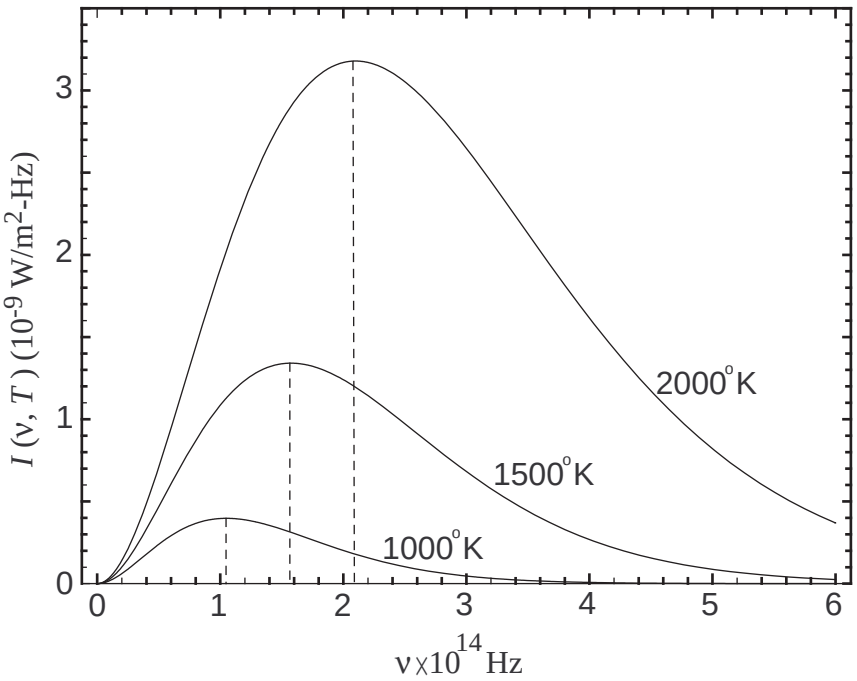
$L = \frac{1}{2}\lambda$ عندما $n = 1$ (النمط الأول first mode)
$L = \lambda$ عندما $n = 2$ (النمط الثاني second mode)
$L = \frac{3}{2}\lambda$ عندما $n = 3$ (النمط الثالث third mode)

أو بشكل عام نقول أن

$$\lambda = \frac{2}{n}L. \tag{1.2}$$

السؤال الآن ماهو عدد الموجات الموقوفة المتكونة داخل التجويف؟ الجواب: يتكون لدينا عدد لانهائي من الموجات الموقوفة داخل التجويف عند درجة حرارة الإتزان. من العلاقة (1.2) إذا كان طول الموجة قصير فلدينا عدد كبير من الأنماط الممكنة داخل التجويف، بالمقابل لوكان طول الموجة طويل يصبح لدينا عدد قليل من الأنماط الممكنة داخل التجويف. كل نمط من الموجات الموقوفة يمتلك درجتين من درجات الحرية. السبب يعود إلى أن الموجات الكهرومغناطيسية هي موجات مستعرضة و لها إتجاهين ممكنين من إتجاهات الإستقطاب العمودية على إتجاه الإنتشار. حسب نظرية التجزئ المتساوي equipartion theorem الكلاسيكية، كل درجة من درجات الحرية لنظام ما عند درجة حرارة إتزان T تمتلك طاقة مقدارها $\frac{1}{2}kT$، حيث k هو ثابت بولتزمان Boltzmann constant ($k = 1.3806503 \times 10^{-23}\,\mathrm{m^2\,kg\,s^{-2}\,K^{-1}}$). و بالتالي فإن متوسط الطاقة الكلاسيكية $\langle E\rangle_{\mathrm{cl}}$ لكل نمط من أنماط الموجات الموقوفة المتكونة داخل تجويف الجسم الأسود يعطى بـ

$$\langle E\rangle_{\mathrm{cl}} = 2 \times \frac{1}{2}kT = kT. \tag{1.3}$$



شكل (1.4): التوزيع الطيفي لإشعاع الجسم الأسود عند درجات حرارة مختلفة كدالة للتردد. لاحظ أن القمم تنزاح ناحية الترددات الأعلى كلما إرتفعت درجة الحرارة.

بما أن هناك عدد لانهائي من أنماط الموجات الموقوفة داخل التجويف عند درجة حرارة الإتزان، فإن الطاقة الكلية داخل الجسم الأسود لانهائية، و عليه فإن منحنى الشدة لطيف الجسم الأسود يجب أن يؤول إلى المالانهاية، مخالفاً للحقيقة العملية المعطاة في الملاحظة رقم (4) و الموضحة في الشكل (1.3) أو الشكل (1.4).

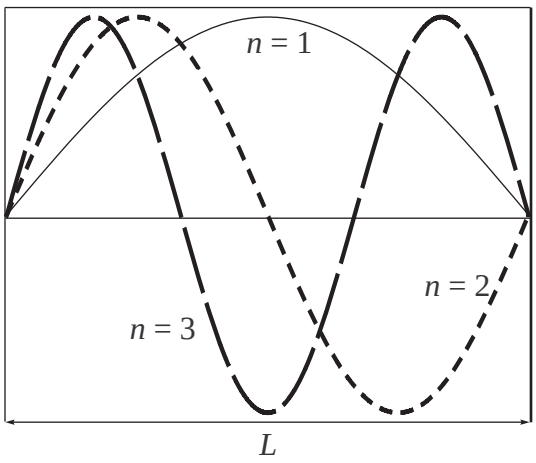
سؤال (1.1): ما هي الطاقة الكلية لغاز مثالي يحتوي على ذرات أحادية عددها الكلي هو N عند درجة حرارة إتزان T؟ $\diamondsuit$

سؤال (1.2): ما هي الطاقة الكلية لغاز مثالي يحتوي على جزيئات ثنائية الذرة عددها الكلي هو N عند درجة حرارة إتزان T؟ $\diamondsuit$

لتحديد شكل منحنى الطيف الكلاسيكي للجسم الأسود نحتاج إلى إستخدام المفهوم الإحصائي لتحديد عدد الأنماط المحتواة بين النمط n و النمط $n + dn$. قانون كيرشوف Kirchhof's law للإشعاع الجسم الأسود ينص على أن طيف إشعاع الجسم الأسود لايعتمد على الشكل الهندسي لتجويفه cavity. لذلك نعتبر أي شكل هندسي لتجويف الجسم الأسود، و لنأخذ الشكل المكعب، بُعد حوافه L (الحجم يصبح L^3). بالإضافة إلى الفضاء الهندسي للتجويف، و الذي إعتبرناه مكعباً، هناك فضاء آخر و هو فضاء الأنماط. لو إعتبرنا أن الفضاء الكلي $V_{\rm total}$ الذي يحتوي الأنماط كروي الشكل، بنصف قطر n بحيث أن

$$n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}. \tag{1.4}$$

هنا نأخذ $n_x, n_y, n_z \geq 0$ و بالتالي فإن $n \geq 0$ (إعتبرنا نقطة بداية النمط من الصفر بدلاً من 1 حتى نأخذ في الحسبان الطاقة الصفرية zero point energy) فإن الحجم المتاح لإحتواء الأنماط accessible volume $V_{\rm access}$ هو ثُمُن الحجم الكروي الكلي total volume $V_{\rm total}$. لكن الموجات الموقوفة لها درجتين ممكنتين من درجات الحرية و بالتالي يتضاعف الحجم المتاح لإحتواء الأنماط. لهذا ننتهي إلى أن الحجم المتاح لإحتواء الأنماط



شكل (1.5): الأنماط modes الثلاث الأولى للموجات المستعرضة الموقوفة في بعد واحد. لاحظ القِصَر في طول الموجة كلما زادت رتبة النمط. لهذا يمكن حشو عدد لانهائي من الأطوال الموجية (الأنماط) في بعد واحد.

accessible volume $V_{\rm access}$ هو ضعف ثُمُن الحجم الكروي الكلي total volume $V_{\rm total}$، كما هو موضح في الشكل (1.6)، أي أن

$$V_{\rm access} = 2 \times \frac{1}{8} V_{\rm total} = \frac{1}{4} \times \frac{4}{3}\pi n^3 = \frac{1}{3}\pi n^3.$$

لو إعتبرنا أن عدد الأنماط المحتواة بين النمط n و النمط $n + dn$ هو $N(n)dn$، فإن هذا العدد هو عبارة عن الحجم المحصور بين الحجم المتاح لأنماط عددها n و الحجم المتاح لأنماط عددها $n + dn$، و الذي يعطى من علاقة الحجم التالية

$$N(n)dn = \frac{dV_{\rm access}}{dn}dn = \frac{d}{dn}\left(\frac{1}{3}\pi n^3\right)dn = \pi n^2 dn, \tag{1.5}$$

لكن نعلم أن $N(n)dn$ هو نفسه $N(\nu)d\nu$ و الذي يمثل عدد الترددات المحتواة ضمن مدى التردد ν و التردد $\nu + d\nu$. بإستخدام العلاقة $\lambda = c/\nu$ في المعادلة (1.2) نحصل على

$$\nu = \frac{c}{2L}n. \tag{1.6}$$

بإستخدامها[2] في معادلة (1.5) نحصل على

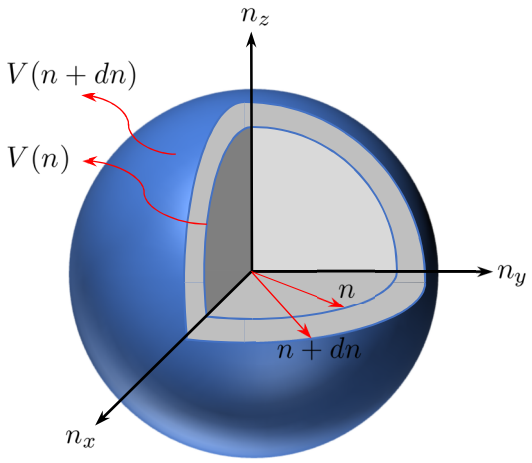
$$N(\nu)d\nu = \pi\left(\frac{2L}{c}\nu\right)^2\left(\frac{2L}{c}d\nu\right)$$

لننتهي إلى أن عدد الترددات المحتواة ضمن مدى التردد ν و التردد $\nu + d\nu$ يُعطى كالتالي

$$N(\nu)d\nu = \frac{8\pi L^3}{c^3}\nu^2 d\nu. \tag{1.7}$$

---

[2] لاحظ أن معادلة (1.2) تختلف عن معادلة (1.6)، حيث أن الأولى لتجويف في بعد واحد و الثانية لتجويف في 3 أبعاد تعطى فيها n من صيغة (1.4). عندما نأخذ البعد الواحد فإن $dn = (2L/c)d\nu$، لكن في ثلاث أبعاد و بشكل مماثل للهندسة الفراغية فإن $dn_x dn_y dn_z = 4\pi n^2 dn$ (تشبه التحويل بين الإحداثيات الكارتيزية و الكروية $dxdydz = 4\pi r^2 dr$) و بالتالي فإن n ترتبط مع البعد الهندسي للتجويف بالعلاقة (1.6) و يصبح $dn_x dn_y dn_z = 4\pi n^2 dn = 4\pi(2L/c)^3 d\nu$، هنا ظهر لدينا الإعتماد على الشكل الهندسي للتجويف في L^3 و الذي سنعتبره حجمه الهندسي V.



شكل (1.6): فضاء الأنماط mode space المُتاح في ثلاثة أبعاد و يساوي ثُمْن حجم كرة نصف قطرها n ضرب إثنين بسبب إستقطابية الموجات الكهرومغناطيسية. عدد الأنماط الممكن تعبئتها بين حجم نصف قطره n و $n+dn$. يُمَثّل بحجم الشريط المحصور بين $V(n)$ و $V(n+dn)$ و هو يساوي مساحة الحجم $V(n)$ (تُعْطى بـ $dV(n)/dn$ مضروبة بعرض الشريط dn، أو $\frac{dV}{dn}dn$.

لو إعتبرنا L^3 تمثل الحجم الهندسي للتجويف (والذي لايعتمد الطيف عليه)، فإن حاصل ضرب كثافة متوسط الطاقة لكل تردد في عدد الترددات $N(\nu)d\nu$ يعطي كثافة الطاقة الكلية المختزنة ضمن مدى التردد ν و التردد $\nu+d\nu$ و الذي سنرمز له بالرمز $\varepsilon(\nu)d\nu$ و الذي بدوره يتناسب مع الشدة المنبعثة من الجسم الأسود $I(\nu)d\nu$، أي أن

$$\varepsilon(\nu)d\nu = \frac{\langle E\rangle}{L^3}N(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\langle E\rangle d\nu, \tag{1.8}$$

حيث أن

$$\varepsilon(\nu)d\nu = \frac{b}{c}I(\nu)d\nu, \tag{1.9}$$

هنا b ثابت عديم الأبعاد. كلاسيكياً متوسط الطاقة يعطى من العلاقة (1.3) و بالتالي يصبح توزيع طيف إشعاع الجسم الأسود

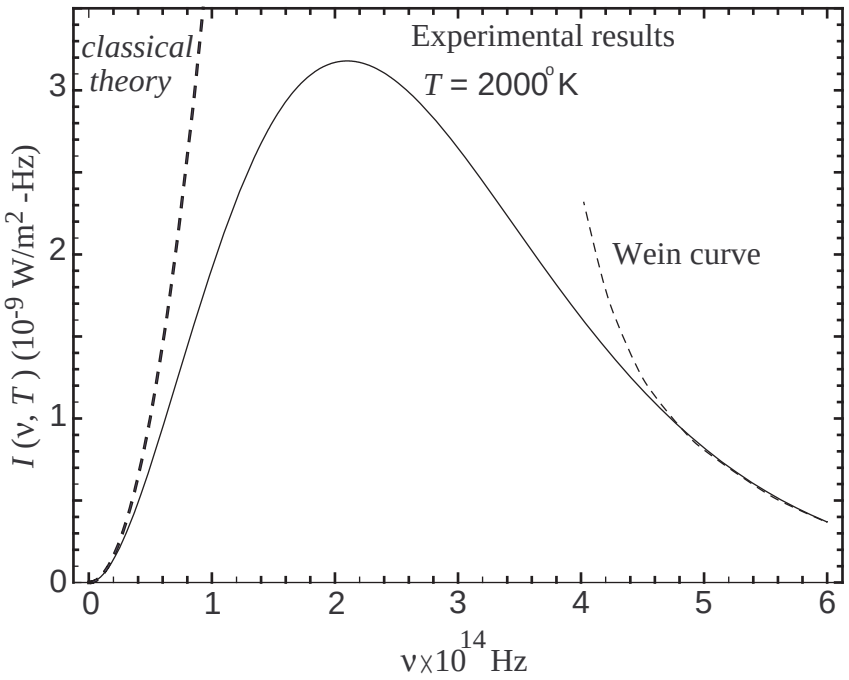
$$I(\nu)d\nu \propto \varepsilon(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kTd\nu, \tag{1.10}$$

أي أن $I(\nu)\propto\nu^2$. يسمى هذا قانون رايل-جينز Rayleigh-Jeans و الموضح في الشكل (1.7) و يمثل المنحنى الكلاسيكي لتوزيع شدة إشعاع الجسم الأسود. لدى مقارنة منحنى رايل-جينز الكلاسيكي مع النتائج التجريبية نجد توافق جيد عند نطاق الترددات المنخفضة لكن الحيود يزداد كلما زاد التردد. كذلك من الواضح أن منحنى رايل-جينز يؤول إلى مالانهاية عندما $\nu\to\infty$ أي أن الطاقة المحتواة ضمن تجويف الجسم الأسود و المنبعثة منه لها مقادير لانهائية، كما تنبأنا سابقاً. هذه النتائج الكلاسيكية، بشكل عام تناقض بشكل كبير المشاهدات العملية، كما تناقض قانون حفظ الطاقة. بالإضافة إلى التنبآت الكلاسيكية، حاول العالم فين Wein إستخدام صيغة رياضية لمحاكاة توزيع شدة إشعاع الجسم الأسود عند الترددات العالية، حيث إستخدم الصيغة الرياضية

$$I(\nu) = Ce^{-\beta\nu}, \tag{1.11}$$

هنا C و β متغيرات للحصول على أفضل تناسب بين الصيغة (1.11) و التوزيع الطيفي التجريبي. إستطاع فين من محاكاة طيف إشعاع الجسم الأسود عند الترددات العالية، لكن صيغته فشلت في محاكاة الطيف عند الترددات المنخفضة. كذلك لم تتنبآ صيغة فين بوجود القمم في الطيف.

النتيجة أعلاه أضحت معضلة كبيرة و ضعت الفيزياء الكلاسيكية في موضع الشك مدخلة ما يسمى كارثة ما فوق البنفسجي ultraviolet catastrophe في إشارة إلى التناقض الكبير بين التنبآت الكلاسيكية و التجريبية عند



شكل (1.7): مقارنة بين التوزيع الطيفي لإشعاع الجسم الأسود التجريبي و قانون رايل-جينز Rayleigh-Jeans (المنحنى الكلاسيكي أول منحنى متقطع من اليسار) لاحظ عدم التوافق عند الترددات العليا ($\nu > 0.3\times10^{14}$ Hz). المنحنى المتقطع الثاني يمثل صيغة فين Wein curve و الذي يتفق مع النتائج التجريبية للترددات العليا. كلا المنحنين لايلتقيان و لايفسران القمم في التوزيع الطيفي.

الترددات العالية. في عام 1900 أتى العالم ماكس بلانك Max Planck و أبتكر صيغة تربط بين صيغة ريل-جينز (1.10) الصالحة للترددات المنخفضة و صيغة فين (1.11) الصالحة للترددات العالية، هذه الصيغة تُعطى بالمعادلة

$$\varepsilon(\nu,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1}, \tag{1.12}$$

حيث أن h هو معامل ثابت قابل للتعديل adjustable constant، وجد بلانك أن أفضل قيمه عددية له هي $h=6.63\times10^{-34}\,\mathrm{Js}$ (بوحدة جول ثانية) سمي هذا الثابت فيما بعد بثابت بلانك. للترددات المنخفضة، أي عند قيم ν صغيرة جداً فإن الدالة الأسية في المقام يمكن أن تُفَك و تُقَرب حسب مفكوك تايلور كالتالي

$$e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}\approx 1+x;\quad x\ll 1,$$

لذلك عند الترددات المنخفضة فإن صيغة (1.12) تؤول إلى

$$\varepsilon(\nu\to 0,T)\approx\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{1+\frac{h\nu}{kT}-1}=\frac{8\pi h}{c^3}kT\frac{\nu^3}{h\nu}=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT.$$

وهي تماماً نفس صيغة ريل-جينز (1.10).

بنفس الطريقة عند الترددات العالية فإن صيغة (1.12) تؤول إلى

$$\begin{aligned}\varepsilon(\nu\to\infty,T) &= \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}\left(1-e^{-h\nu/kT}\right)},\\ &= \frac{8\pi h}{c^3}e^{-h\nu/kT}\frac{\nu^3}{\left(1-e^{-h\nu/kT}\right)}\approx\frac{8\pi h}{c^3}\nu^3e^{-h\nu/kT},\end{aligned}$$

و التي تعطي صيغة المحاكاة لفين[3] (1.11)، بل و تتنبأ بقيم الثوابت C و β فيها. بالإضافة إلى ذلك فإن صيغة بلانك (1.12) تستنسخ (إذا أمكن القول) القيم التجريبية لطيف الجسم الأسود بقممه و إزاحاته عند درجات الحرارة المختلفة.

كذلك تستطيع هذه الصيغة من التنبأ بقانون ستيفان-بولتزمان (1.1) و ثابتهما σ. لإثبات ذلك يتوجب علينا فقط إجراء التكامل لصيغة الشدة (1.12) لنحصل على كثافة الطاقة $u(T)$ المختزنة في الجسم الأسود عند درجة حرارة إتزان T، أي أن

$$u(T)=\int_0^{\infty}\varepsilon(\nu,T)d\nu=\frac{8\pi h}{c^3}\int_0^{\infty}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1}d\nu.$$

لنأخذ $x=h\nu/kT$، بالتعويض نحصل على

$$u(T)=\frac{8\pi h}{c^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^4\int_0^{\infty}\frac{x^3}{e^x-1}dx=\frac{8\pi}{h^3c^3}\left(kT\right)^4\frac{\pi^4}{15},$$

حيث أن قيمة التكامل على x تساوي $\pi^4/15$. نحصل في النهاية على الشكل الصريح لقانون وثابت ستيفان-بولتزمان

$$u(T)=\frac{8\pi^5k^4}{15h^3c^3}T^4=\frac{4}{c}\sigma T^4=\frac{4}{c}I(T), \tag{1.13}$$

---

[3] إعتبر فين الجسم الأسود كتجويف كروي ذو عاكسية مثالية يتقلص إدياباتيكياً. بالتالي فإن إعادة توزيع الطاقة داخل التجويف كدالة للتردد ناتجة عن إزاحة دوبلر للموجة عند الإنعكاس.

بعد مقارنة العلاقة أعلاه بالمعادلة التجريبية (1.1) وجدنا أن ثابت ستيفان يُعْطى بمعلومية ثوابت أساسية كالتالي

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3c^2}T^4. \tag{1.14}$$

بشكل عام الحيود عن نظرية التجزيء المتساوي لوحظ مبكراً (في حدود 1872م) عند دراسة الحرارة النوعية specific heat للغازات ثنائية الذرة. لهذه الغازات يوجد 6 درجات للحرية: 3 درجات حرية إنتقالية translational لمركز الكتلة، درجتين من درجات الحرية دورانية rotational (إحداها حول محور يمر بمركز الكتلة و الآخر محور يمر خلال الذرتين)، و درجة حرية واحدة إهتزازية vibration degrees of freedom. لهذا السبب فإن الطاقة الكلية لـ N جزيء ثنائي الذرة حسب نظرية التجزيء المتساوي هي $3NkT$ و بالتالي فإن الحرارة النوعية ثابتة و تساوي $C_v = 3Nk$. عملياً و عند درجة حرارة الغرفة وجد أن الحرارة النوعية للجزيئات ثنائية الذرة يُعطى بـ $C_v = \frac{5}{2}Nk$. هذا فُسر على أن درجة الحرية الإهتزازية جُمِدت و لم تساهم في الحرارة النوعية عند درجة الحرارة المنخفضة (أي إذا كانت طاقة التردد $kT < h\nu$). حتى يكتسب الجزيء تذبذب طبيعي بتردد ν فإنه يحتاج إلى طاقة يأخذها من الحرارة T (أو بالأحرى من الطاقة الحرارية kT). لهذا فإذا إرتفعت درجة الحرارة بشكل كافي بحيث أن $kT > h\nu$ يبدأ الجزيء بالإهتزاز و بالتالي يكتسب درجة حرية إهتزازية وتؤول سعته الحرارية إلى $C_v \to 3Nk$.

نفس الملاحظة دونت أيضاً لقانون دولون-بتي Dulong-Petit الكلاسيكي و الذي يتنبأ بأن الحرارة النوعية للجوامد ضرب عددها الجزيئي ثابت لكل الجوامد. لكن الملاحظ أن الحرارة النوعية للجوامد تنخفض كلما إنخفضت درجة الحرارة و ذلك ناتج عن تجمد درجات الحرية الإهتزازية بسبب نقص الطاقة الحرارية اللازمة لحث جزيئات الجوامد في البلورة على الإهتزاز. إذاً لايمكن القول بشكل مطلق أن هناك تردد عالي أو تردد منخفض، بل يعتمد سلوك النظام على قيمة $h\nu$ مقارنة مع مقدار kT. فنقول أنه عندما $h\nu \gg kT$ صيغة بلانك تعطي صيغة فين و عندما $h\nu \ll kT$ صيغة بلانك تعطي صيغة ريل-جينز الكلاسيكية.

إن النجاح غير المسبوق للصيغة (1.12) جعلت بلانك ينساق في البحث عن أصلها. و الذي وجده في توزيع بولتزمان الإحصائي Boltzmann distribution، و الذي ينص على أنه إذا وجد N_0 نظام مجهري (ذرة، جزيء ... إلخ) عند درجة حرارة إتزان T، فإن عدد الإنظمة عند الحالة n و التي تحمل طاقة E_n هو N_n يعطى بـ

$$N_n = N_0 e^{-E_n/kT}. \tag{1.15}$$

بسبب حالة التقطع أو التكمية في طاقات النظام، إقترح بلانك أن النظام المجهري للجسم الأسود (هنا جزيئات المادة) تمتص و تشع الموجات الكهرومغناطيسية على شكل حزم bundles لها طاقة مقدارها مضاعفات صحيحة من $h\nu$. جزيئات المادة الممتصة لهذه الحزم داخل تجويف الجسم الأسود عند الإتزان تصبح متذبذبات توافقية مكماة لها طاقات تساوي مضاعفات صحيحة من $h\nu$. أطلق بلانك على هذه الحزم إسم كمات quanta. بكلمة أخرى، الجزيء الذي يمتص حزمة مقدار طاقتها $nh\nu$ يحمل نمط تذبذب oscillation mode n وبالتالي يحمل طاقة إهتزاز أو تذبذب مقدارها E_n. رياضياً نكتب طاقة المتذبذب oscillator energy

$$E_n = nh\nu. \tag{1.16}$$

حتى يتم إشعاع حزمة عند تردد ν يجب أن تكون درجة حرارة النظام كافية لحث جزيئات الجسم الأسود على الإهتزاز عند نفس التردد أو أعلى. هذا يحدث إذا كانت $kT \gg h\nu$ هذه الطاقة الحرارية قادرة على تعبئة عدد كافي من الجزيئات للإهتزاز عند تردد ν و بالتالي إشعاع حزم من الطاقة لها تردد ν. عند الترددات العالية، ذلك عند $kT \leq h\nu$، فإن الطاقة الحرارية kT غير قادرة على تعبئة عدد كافي من الجزيئات للإهتزاز عند هذا التردد و بالتالي تقل شدة الأشعة كلما زاد التردد حتى نصل إلى حالة التجمد frozen أي عندما $kT \ll h\nu$ حيث لا يصدر أي أشعة.

لإيجاد متوسط الطاقة للمتذبذب إستخدم بلانك علاقة (1.15) لحساب إحتمالية أن المتذبذب يمتلك طاقة E_n تُعطى من العلاقة (1.16) عند درجة حرارة إتزان T، حيث نحصل على دالة بولتزمان الإحتمالية

$$P(E_n) = Ce^{-E_n/kT}, \tag{1.17}$$

حيث C هو ثابت يسمى ثابت المعايرة. شرط المعايرة هنا يعني أن مجموع الإحتمالية على الجميع الحالات الممكنة لابد أن يساوي الوحدة، أو 100%. هذا يعني أن

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(E_n) = 1 = C \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/kT},$$

و بالتالي نحصل على قيمة ثابت المعايرة C ليصبح

$$C = \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/kT}},$$

لتصبح معادلة (1.17) تعطى كالتالي

$$P(E_n) = \frac{e^{-E_n/kT}}{\sum_{j=0}^{\infty} e^{-E_j/kT}}. \tag{1.18}$$

يمكننا حساب الآن متوسط الطاقة للجسم الأسود من تعريف الإحتمالية (1.18) لنحصل على

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n P(E_n) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-E_n/kT}}{\sum_{j=0}^{\infty} e^{-E_j/kT}}.$$

نعرف المعامل β كالتالي

$$\beta \equiv \frac{1}{kT}. \tag{1.19}$$

قد يكون هذا التعريف مألوفاً للقارئ من خلال الفيزياء الإحصائية و الحرارية. بإستخدام أيضاً علاقة (1.16) لطاقة الحالة n ، فإن متوسط الطاقة يصبح

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (nh\nu) e^{-n\beta h\nu}}{\sum_{j=0}^{\infty} e^{-j\beta h\nu}},$$

لاحظ أن البسط في المعادلة أعلاه يمكن أن يكتب

$$\sum_{n=0}^{\infty} (nh\nu) e^{-n\beta h\nu} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta h\nu},$$

ليصبح متوسط الطاقة يعطى بـ

$$\langle E \rangle = \frac{-\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta h\nu}}{\sum_{j=0}^{\infty} e^{-j\beta h\nu}}. \tag{1.20}$$

كل مايلزم هو حساب المتسلسلة الهندسية geometrical series التالية $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta h\nu}$ و التي تُعطى مجموعها بـ

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta h\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta h\nu}\right)^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}}.$$

لاحظ أن هذه المتسلسة متقاربة convergent و لها مجموع لأن $e^{-\beta h\nu} < 1$ دائماً. إذاً علاقة متوسط الطاقة (1.20) تصبح

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\left(1 - e^{-\beta h\nu}\right) \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}}\right), \\ &= -\left(1 - e^{-\beta h\nu}\right) \frac{(-1)\left(-e^{-\beta h\nu}\right)(-h\nu)}{\left(1 - e^{-\beta h\nu}\right)^2}. \end{aligned}$$

بإجراء الإختصارات اللازمة نحصل على

$$\langle E\rangle = \frac{h\nu e^{-\beta h\nu}}{1-e^{-\beta h\nu}} = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu}-1}.$$

بالتعويض عن المعامل β في التعريف (1.19)، نصل إلى أن متوسط الطاقة التي يحملها النمط داخل التجويف تصبح

$$\langle E\rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}. \tag{1.21}$$

لاحظ الإختلاف مع متوسط الطاقة الكلاسيكية في العلاقة (1.3). من نقاشنا السابق نعلم أنه يمكن أن تصل الصيغة (1.21) إلى الصيغة الكلاسيكية (1.3) عند الترددات المنخفضة إو بالأحرى إذا كانت $h\nu \ll kT$. المقام في العلاقة (1.21) يمكن أن يفك حتى الرتبة الثانية لنحصل على

$$\langle E\rangle_{h\nu\ll kT} \approx \frac{h\nu}{1+\frac{h\nu}{kT}-1} = kT = \langle E\rangle_{cl}.$$

كما هو متوقع نصل للنتيجة الكلاسيكية عند الترددات المنخفضة. في المقابل عند الترددات العالية ($h\nu \gg kT$) حيث يصبح المقام $\exp(h\nu/kT)-1 \approx \exp(h\nu/kT)$، و بالتالي فإن متوسط الطاقة يصبح

$$\langle E\rangle_{h\nu\gg kT} \approx \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}} = h\nu e^{-h\nu/kT},$$

و التي لو عوضناها في العلاقة (1.8) لحصلنا على علاقة مماثلة لصيغة فين (1.11). بتعويض علاقة (1.21) في صيغة الشدة المعطاة في العلاقة (1.8) نحصل على صيغة بلانك لتوزيع طيف إشعاع الجسم الأسود كما هو معطى في العلاقة (1.12).

بقي أن نقول أن بلانك نفسه لم يُشَدِد على المغزى الفيزيائي لتكميته المجال الكهرومغناطيسي. فقد لقي معارضة شديدة من الوسط العلمي بسبب عدم تقبله لفكرة الكمات للمجالات الكهرومغناطيسية. لذلك وضح بلانك على أن كل ما أراده هو آداة رياضية يستطيع فيها حل معضلة طيف إشعاع الجسم الأسود. لاحقاً سنرى أن إينشتين إستخدم هذه التكمية لحل معضلة الأثر الكهروضوئي ليثبت اساس تكمية المجال الكهرومغناطيسي و يضع حجر الأساس لميكانيكا الكم.

1.2 الأثر الكهروضوئي The photoelectric effect

لدى قيامه بالتأكد من وجود الموجات الكهرومغناطيسية التي تنبأ بها ماكسويل، إكتشف هينريك هيرتز Heinrich Hertz الأثر الكهروضوئي في عام 1884م. فيما بعد قام مليكان R.A. Milikan بعمل دراسة مستفيضة لهذه الظاهرة. الجهاز المستخدم في دراسة الأثر الكهروضوئي موضح في الشكل (1.8). عادة ما يتم وصل القطب الموجب للمجمع C بالنسبة للوح المعدني M حتى نحصل على التيار، ثم نعكس القطبية و نزيد فرق الجهد إلى أن يتوقف التيار الكهروضوئي في الجلفانومتر G. هذا الجهد يسمى جهد الإيقاف stopping potential و يرمز له بالرمز V_s. في هذه الحالة يمثل المقدار $|eV_s|$ الطاقة الحركية العظمى للإلكترونات الكهروضوئية $K_{\max}$، أي أن

$$K_{\max} = eV_s. \tag{1.22}$$

بتغير شروط التجربة، على سبيل المثال تبديل نوع المعدن المصقول، طول موجة الضوء وحيد اللون الساقط ... إلخ، و دراسة جهد الإيقاف و شدة تيار الإلكترونات الكهروضوئية و أثر تردد الضوء الساقط، وجِدَت النتائج التالية:

1. إذا كان التردد ثابت، فإن شدة التيار الكهروضوئي i_p يزداد مع زيادة شدة الضوء الساقط.

2. إنبعاث الإلكترونات الضوئية يحدث خلال زمن أقل من 10^{-9} ثانية بعد إضاءة السطح المعدني المصقول بغض النظر عن شدة الضوء. أي أن الإنبعاث يحدث دون أي تأخير سواء كان الضوء خافتاً أو ساطعاً.

3. لسطح معدني مُعطى، فإن إنبعاث الإلكترونات الضوئية لا يحدث إلا إذا كان تردد الضوء الساقط أعلى من قيمة صغرى للتردد أطلق عليها تردد العتبة threshold frequency ν_{th}. و جد لاحقاً أن ν_{th} تختلف بإختلاف المعدن.

4. إن الطاقة القصوى للإلكترونات الضوئية لا تعتمد على شدة الضوء الساقط على السطح المعدني.

5. إن الطاقة القصوى للإلكترونات الضوئية تعتمد على تردد الضوء الساقط على السطح المعدني. هذا يتضح من الشكل (1.9) حيث أن هناك علاقة خطية بين جهد الإيقاف (التي تمثل الطاقة الحركية القصوى) و تردد الضوء لكل سطح معدني سيزيوم، بوتاسيوم، و القصدير. رياضياً نكتب العلاقة الخطية كالتالي

$$K_{\max} = a\nu + b, \tag{1.23}$$

حيث تمثل a ميل الخط المستقيم، وهي ثابتة لكل مواد الأسطح المعدنية -لاحظ التوازي في الخط المستقيم في الشكل (1.9)- و b هو الجزء المقطوع من محور الصادات و هو يختلف بإختلاف مادة السطح المعدني.

كلاسيكياً و حسب تنبآت النظرية الموجية للضوء فإن شدة التيار الضوئي المنبعث photoelectric current i_p تزداد بزيادة شدة الضوء الساقط I، مما يتفق مع المشاهدة رقم (1). لكن النظرية الموجية تنص على أن الضوء منخفض الشدة يحتاج لوقت أطول حتى ينقل طاقة كافية للمعدن لترتفع درجة حرارته و من ثم ينبعث الإلكترون الكهروضوئي. هذا يناقض إذاً المشاهدة رقم (2). كذلك فإن تردد الضوء الساقط لا يلعب أي دور في حدوث الإنبعاث الكهروضوئي، لذلك لا تتنبأ النظرية الموجية بأي تردد حرج. إذاً هي فقط الشدة intensity التي تؤدي للإنبعاث. فيمكن أن يحدث الإنبعاث الكهروضوئي لضوء منخفض التردد إذا سقط الضوء بزمن كافي أو شدة عالية يؤدي إلى إرتفاع درجة حرارة المعدن. بهذا فإن النظرية الموجية تناقض المشاهدات (3)، (4)، و لا تتنبأ بـ (5).

في عام 1905م أعطى ألبرت أينشتين Albert Einstein التفسير الصحيح للأثر الكهروضوئي بإستخدامه لفرضيات بلانك الكمية لإشعاع الجسم الأسود. أطلق عليها فرضية الفوتون (لاحقاً أصبحت نظرية الفوتون) و نلخصها كالتالي:

1. إن مجهريات المعدن (في هذه الحالة ذرات و إلكترونات مادة المعدن) لا ترى الضوء الساقط عليها بتردد ν كموجات، بل كحزم جسيمية من الطاقة أو كمات من الطاقة أطلق عليها إسم فوتون photon. طاقة كل فوتون تساوي $h\nu$.

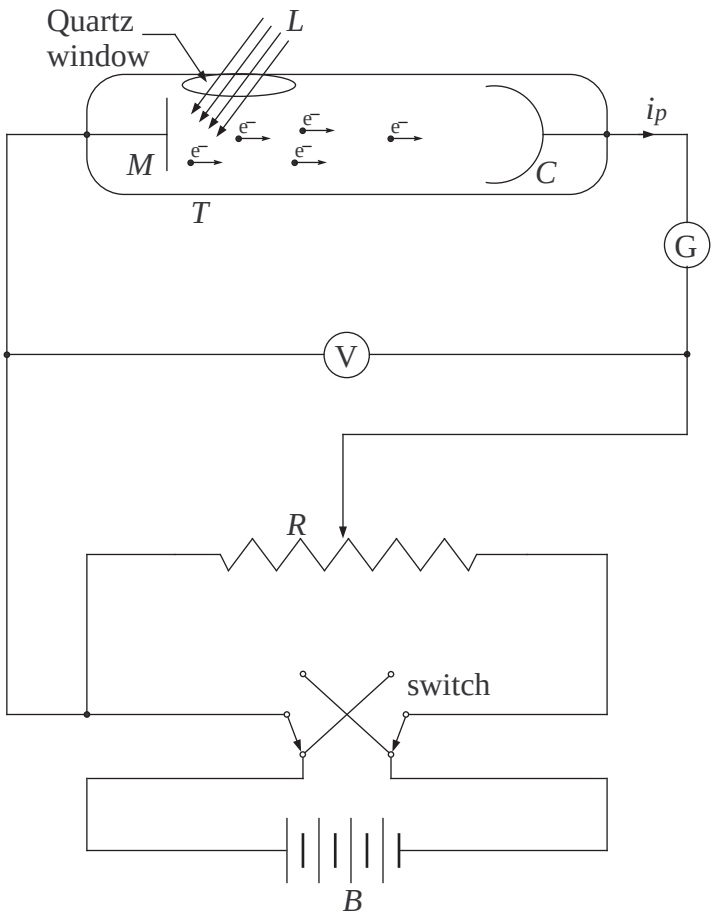
2. إذا سقط فوتون على إلكترون مرتبط بالمعدن فإن إحدى الإحتماليات التالية قد تحدث: إما أن يمتص الإلكترون الفوتون بأكمله (أن يأخذ طاقة الفوتون بأكملها) أو إما أن لا يحدث شئ.

3. إذا إمتص الإلكترون طاقة الفوتون $h\nu$، فإن الإلكترون لايمكن أن ينبعث إلا إذا كانت هذه الطاقة أكبر من طاقة ترابط الإلكترون مع المعدن، أو ما يسمى دالة الشغل work function و الذي يرمز لها بالرمز W و هي تعتمد على طبيعة المعدن و تختلف من معدن لآخر. أذاً يحدث الإنبعاث إذا تحقق $h\nu > W$.

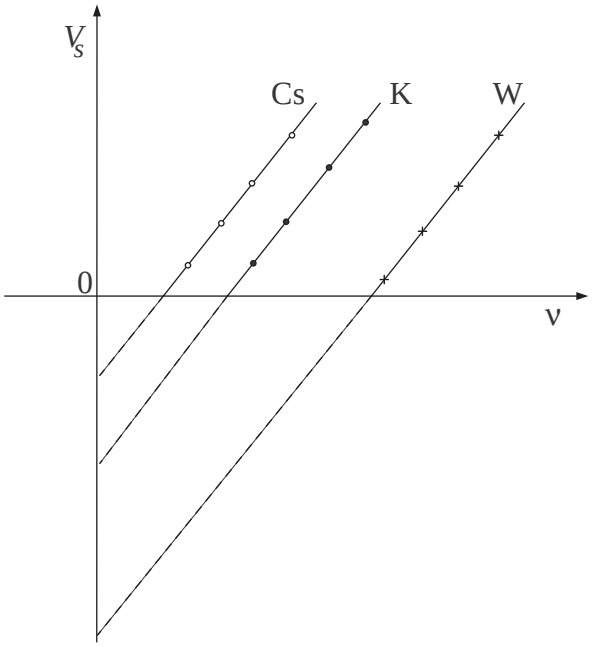
4. في حالة تحقق الشرط $h\nu > W$، و إمتص الإلكترون المرتبط طاقة الفوتون $h\nu$، فإن جزء من هذه الطاقة يستهلك للتغلب على دالة الشغل W و الباقي $(h\nu - W)$ يظهر على شكل طاقة حركة عظمى للإلكترون، أي أن

$$K_{\max} = h\nu - W. \tag{1.24}$$

5. إذا زادت شدة الضوء الساقط زاد عدد الفوتونات و بالتالي تزداد إحتمالية تصادم الفوتونات بالإلكترونات و من ثم يزداد الإنبعاث الكهروضوئي و يزداد بذلك التيار.



شكل (1.8): إعدادات جهاز الخلية الكهروضوئية المستخدم لدراسة الاثر الكهروضوئي. يتركب من أنبوبة مفرغة T في داخلها لوح معدني مصقول M و مجمع للشحن charge collector C. الضوء L وحيد اللون ينفذ إلى اللوح المعدني خلال نافذة من الكوارتز و الذي يؤدي لإنبعاث إلكترونات من اللوح المعدني تُجَمع من خلال C. الجلفانومتر G يحدد شدة التيار المار. نتحكم بقطبية و مقدار فرق الجهد بين C و M من خلال مقسم الجهد R و المفتاح switch. في البداية نجعل C موجبة بالنسبة لـ M حتى نحصل على التيارثم نعكس القطبية حتى نحدد جهد الإيقاف.



شكل (1.9): العلاقة الخطية بين جهد الإيقاف و التردد لثلاث معادن، السيزيوم، البوتاسيوم، و القصدير. بما أن جهد الإيقاف يرتبط مع الطاقة الحركية القصوى للإلكترون الكهروضوئي، فإن الرسم أعلاه يشير إلى علاقة خطية بين الطاقة الحركية القصوى للإلكترون الكهروضوئي و تردد الضوء الساقط.

من الواضح أن فرضية رقم (2) تفسر المشاهدة رقم (2)، هنا الإنبعاث يحدث كنتيجة لتفاعل مباشر بين الفوتون و الإلكترون المرتبط بالمعدن و ليس كرد فعل إسترخائي للحرارة. و بالتالي زمن الإنبعاث يجب أن يكون صغير. أيضاً بمقارنة فرضية رقم (3) مع المشاهدة رقم (3)، فإننا نستنتج مباشرة أن دالة الشغل W ترتبط مع تردد العتبة $\nu_{\rm th}$ (كلاهما يعتمدان على طبيعة المعدن المصقول) بالعلاقة التالية

$$W = h\nu_{\rm th}. \tag{1.25}$$

بنفس الوقت و بمقارنة فرضية رقم (4) مع مشاهدة رقم (4) و رقم (5) و مقارنة علاقة (1.24) مع العلاقة التجريبية (1.23) نستنتج أن ميل الخط المستقيم a هو نفسه ثابت بلانك h. في حقيقة الأمر، وقبل أن يضع أينشتين فرضية الفوتون، لاحظ العلماء أن قيمة a اللازمة للحصول على أفضل وصف best fit للبيانات المخبرية للأثر الكهروضوئي تتفق مع قيمة h التي حسبها بلانك لطيف إشعاع الجسم الأسود في العلاقة (1.12).

سؤال (1.3): ضوء طول موجته 5893 أنجستروم يسقط على سطح من البوتاسيوم. إذا كان جهد الإيقاف للإلكترونات المنبعثة هو 0.36 إلكترون-فولت. إحسب الطاقة الحركية القصوى للإلكترون الكهروضوئي و دالة الشغل و تردد العتبة للبوتاسيوم.
الجواب: $K_{\rm max} = 0.36\,{\rm eV}$، $W = 1.79\,{\rm eV}$، $\nu_{\rm th} = 4.33 \times 10^{14}\,{\rm Hz}$. ♢

فرضية الفوتون رقم (5) أيضاً فسرت المشاهدة رقم (1) تفسيراً منطقياً دون أن تتناقض مع النظرية الموجية. على أساس أن شدة الضوء الساقط I تتناسب مع عدد الفوتونات المحتواة في الضوء، أي أن

$$I \propto N,$$

و عليه فإن الطاقة الكلية للضوء الساقط يكتب بـ

$$E_{\rm tot} = Nh\nu. \tag{1.26}$$

سؤال (1.4): ضوء طول موجته 5893 أنجستروم و شدته $\mathbf{5 \times 10^5}$ وات لكل متر مربع يسقط على لوح معدني مساحته 4 سم مربع. ما هو عدد الفوتونات الساقط على اللوح المعدني في 10 ثواني. $\diamondsuit$

حصل آينشتين 1921م على جائزة نوبل لوضعه تفسير الأثر الكهروضوئي، بالرغم من وضعه لنظرية أهم و أصعب من قبل، ألا وهي النظرية النسبية، لكن في ذلك الوقت لم يتمكن العلماء من إيجاد أداة عملية لإختبار النظرية النسبية.

بقي أن نقول: إن فرضية واحدة لحل معضلتين تتعدى عن كونها أداة رياضية كما وضح بلانك. هنا في الأثر الكهروضوئي، و على عكس الحال في طيف إشعاع الجسم الاسود، لاتوجد مشكلة رياضية بقدر وجود مشكلة في المفهوم الفيزيائي. المجتمع العلمي بدأ في تغيير نظرته لطبيعة الضوء، خصوصاً على المقياس المجهري. إذ مانراه نحن قد لا يكون ما تراه الإلكترونات و الذرات و الجزيئات المكونة للمواد. التأكيد القاطع أتى مع تجربة كومبتون لتثبت بالفعل أن الموجات الكهرومغناطيسية تتصادم مع الإلكترون الحر كتصادم الأجسام المادية و أن قوانين حفظ الطاقة وكمية الحركة تنطبق تماماً كما لو أن هناك كرتين من كرات البليارد تصادمت مع بعضها البعض.

1.3 أثر كومبتون Compton effect

أثر كومبتون يعرف على إنه التشتت scattering الحاصل للأشعة الكهرومغناطيسية عموماً (و للأشعة السينية x-ray خصوصاً) على الإلكترونات الحرة. هذا التشتت يؤدي إلى زيادة الطول الموجي للأشعة المتشتتة. من الصعب الحصول على إلكترونات حرة كهدف للتشتت. لكن الإلكترونات في الموصلات المعدنية لها طاقة إرتباط ضعيفة (في حدود الـ eV) مقارنة بطاقة أشعة x (في حدود الـ keV). لهذا فإن طاقة الترابط لهذه الإلكترونات مهملة نسبياً، لذا نعتبر هذا التفاعل هو تشتت بين إلكترونات حرة و أشعة x. إن طيف توزيع شدة إشعة x المتشتتة على الإلكترونات الحرة كدالة للطول الموجي موضح في الشكل (1.10). من الشكل نجد أن شدة الأشعة المتشتتة تتكون من طولي موجة، أحدهما يمثل طول الموجة الأصلي للأشعة الساقطة λ (و يسمى أيضاً طول الموجة غير المعدل unmodified wave length) و الثاني يمثل طول موجة الأشعة المتشتتة λ' (و يسمى أيضاً طول الموجة المعدل modified wave length). هذا النوع من التشتتات الإشعاعية يسمى التشتت غير المترابط incoherent scattering.

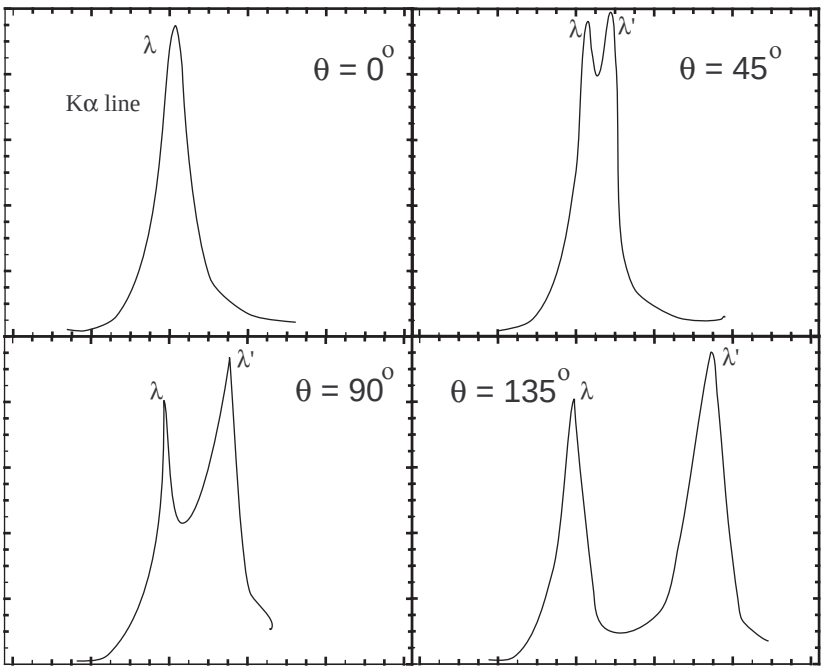
كلاسيكياً، وحسب النظرية الكهرومغناطيسية، عندما تسقط الأشعة الكهرومغناطيسية بطول موجة λ و تردد ν على جسيمات حرة مشحونة شحنة كهربية، فإن هذه الجسيمات تمتص الأشعة و تتذبذب بنفس ترددها ν. الشحنات المتذبذبة بدورها تشع الموجات الكهرومغناطيسية بنفس التردد الأصلي ν. هذا التشتت يسمى التشتت المترابط coherent scattering حيث أن الطول الموجي هنا لايتغير (أي أن الشدة لاتعتمد على الطول الموجي) لكن الشدة تعتمد على زواية القياس θ حيث تتغير الشدة مع الزاوية حسب العلاقة

$$I \propto (1 + \cos^2 \theta),$$

و بالتالي فإن النظرية الكلاسيكية لم تستطيع أن تفسر ظهور الموجة المعدلة λ' في توزيع الشدة.

إن تفسير الموجة المعدلة λ' في توزيع الشدة أتى على يد الفيزيائي كومبتون A.H. Compton في عام 1922م، حيث حصل على إثرها جائزة نوبل عام 1927م. حيث إعتبر أن ظهور الموجة المعدلة λ' ناتج عن تشتت غير مرن للأشعة على الإلكترونات الحرة. التشتت هنا لا يحدث بين موجات و جسيمات، لكن فرض كومبتون أن الشعاع الساقط هو سيل من الفوتونات، طاقة الفوتون الواحد $h\nu$، يتشتت كل فوتون تشتتاً غير مرناً على الإلكترون الواحد. و عليه فإن قوانين حفظ كمية الحركة و الطاقة الكلية تنطبق بشكل مماثل للتصادمات بين الأجسام المادية. الفرق هنا أن الفوتون لا يحمل كتلة!

إن حساب كمية حركة جسيم عديم الكتلة massless particle momentum يعتبر عمل غير مسبوق في ذلك الوقت. ميكانيكا نيوتن لاتصف أي كمية حركة إلا للأجسام التي لها كتل. كذلك من المعروف أن الأشعة



شكل (1.10): طيف توزيع شدة الإشعة السينية المتشتتة على الإلكترونات الحرة كدالة للطول الموجي عند زوايا تشتت مختلفة. يظهر عندنا قيم للشدة تقابل طول موجة الأشعة الأصلية λ و قيم للشدة عند الطول الموجي بعد التشتت λ'. لاحظ أنه كلما زادت زاوية التشتت θ تزاد قيمة الإزاحة بين الطول الموجي الأصلي للأشعة λ و الطول الموجي للأشعة بعد التشتت λ'.

الكهرومغناطيسية تحمل كمية حركة يعبر عنها بمتجه بوينتنج. لكن هنا كومبتون إعتبر الأشعة سيل من جسيمات عديمة الكتلة و ليست كموجات. لحل هذه المعضلة وظف كومبتون النظرية النسبية لحساب كمية الحركة للفوتون بإستخدام علاقة الطاقة الكلية

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \tag{1.27}$$

هنا p و m تمثلان كمية حركة و كتلة الجسيم[4]، على التوالي. للأجسام عديمة الكتلة $m = 0$ تؤول العلاقة (1.27) إلى $E = pc$ و بإستخدام $E = h\nu$ يمكن إذاً كتابة كمية حركة الفوتون

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{1.28}$$

لنعتبر الآن فوتوناً كمية حركته $\mathbf{p}$ يسقط على إلكترون حر في حالة السكون[5]. بعد التصادم يتشتت الإلكترون بكمية حركة $\mathbf{p}'$ و الإلكترون بكمية حركة $\mathbf{p}_e$. عملية التشتت هذه موضحة في الشكل (1.11). من قوانين حفظ كمية الحركة نكتب أن كمية الحركة قبل التصادم (كمية حركة الفوتون الساقط) تساوي كمية الحركة بعد التصادم (كمية حركة الفوتون و الإلكترون المتشتتين)، أو رياضياً

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_e,$$

[4] على القارئ أن يلاحظ هنا لانعتبر مايسمى كتلة السكون. الكتلة هي ثابتة لاتتغير بالحركة. لهذا فإعتبار كتلة سكون m_0 و كتلة حركة m خطأ شائع سنتلافاه في نقاشنا.

[5] في حقيقة الأمر لايوجد شئ يسمى حالة سكون للجسيمات المجهرية. حالة السكون للأنظمة المجهرية تحدث فقط عند درجة حرارة الصفر المطلق. الإلكترون يتواجد في وسط درجة حرارته T. سيحمل على أقل تقدير طاقة حرارية من الوسط المحيط مقدارها kT. عند درجة حرارة الغرفة $T = 300°K$ الطاقة تصبح في حدود $0.025\,\mathrm{eV}$ لكنها بالكاد تسمح للإلكترون بالحركة داخل المعدن بسبب دالة الشغل.

أو يمكن كتابة كمية حركة الإلكترون المتشتت بـ

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p} - \mathbf{p}',$$

لكن مقادير كميات الحركة يمكن أن تكتب بـ

$$p_e^2 = \mathbf{p}_e \cdot \mathbf{p}_e = (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}') = p^2 + p'^2 - 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'.$$

من الرسم نجد أن $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = pp' \cos\theta$. بإستخدام علاقة (1.28) لتمثيل كمية حركة الفوتون نحصل على

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos\theta = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\left(\frac{h\nu}{c}\right)\left(\frac{h\nu'}{c}\right)\cos\theta,$$

بأخذ الثوابت h و c كعوامل مشتركة نحصل في النهاية من حفظ كمية الحركة على

$$p_e^2 c^2 = h^2\left(\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos\theta\right). \tag{1.29}$$

في المقابل، فإن الطاقة الإبتدائية هي طاقة الفوتون الساقط $h\nu$ و طاقة كتلة الإلكترون الساكن mc^2. الطاقة بعد التصادم عبارة عن طاقة الفوتون المتشتت $h\nu'$ بينما يكتسب الإلكترون طاقة حركة ليمتلك طاقة كلية E_e يُعْطى مربعها من العلاقة (1.27). من قوانين حفظ الطاقة نكتب إذاً

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4},$$

أو

$$\sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4} = h\nu - h\nu' + mc^2.$$

بتربيع الطرفين و التبسيط نحصل على

$$p_e^2 c^2 + m^2 c^4 = (h\nu - h\nu')^2 + m^2 c^4 + 2mc^2(h\nu - h\nu'),$$

لننتهي إلى أن

$$p_e^2 c^2 = h^2\left[\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' + 2\frac{mc^2}{h}(\nu - \nu')\right]. \tag{1.30}$$

بمساوة معادلة (1.29) في الطرف الأيمن مع معادلة (1.30) في الطرف الأيسر، نحصل على

$$\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos\theta = \nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' + 2\frac{mc^2}{h}(\nu - \nu'),$$

بالتبسيط نحصل على

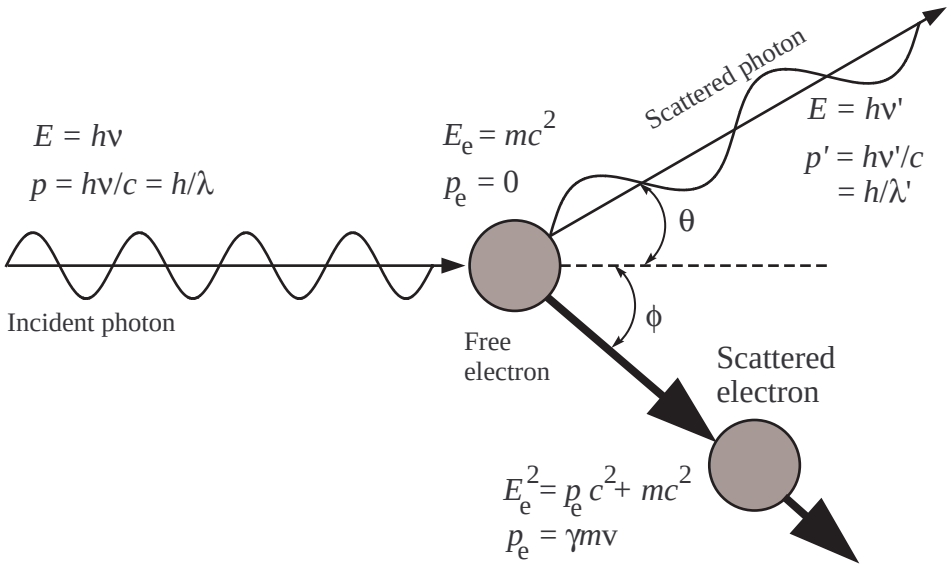
$$\frac{mc^2}{h}(\nu - \nu') = \nu\nu'(1 - \cos\theta).$$

بضرب الطرفين بـ $\frac{h}{mc\nu\nu'}$ نحصل على

$$c\left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu}\right) = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta),$$

بإستخدام العلاقة $\lambda = c/\nu$ ننتهي إلى علاقة كومبتون

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta). \tag{1.31}$$



شكل (1.11): تشتت إشعة x على الإلكترونات الحرة يمكن تصوره كتصادم بين جسيمين فوتون و إلكترون حر، بحيث تنطبق قوانين حفظ كمية الحركة و الطاقة بشكل مماثل لتشتت الأجسام المادية.

إن القياسات العملية لإزاحة الطول الموجي المعدلة λ' عن الطول الموجي غير المعدلة λ تتفق تماماً مع العلاقة (1.31)، مما يؤكد فرضية الفوتون للأشعة الكهرومغناطيسية بشكل قاطع. إن خط الطيف للموجة غير المعدلة λ ناتج عن تشتت الفوتونات على الذرات ككل. ففي علاقة كومبتون (1.31) لو إستبدلنا m بكتلة الذرة (و هي أكبر بآلاف المرات من كتلة الإلكترون) فإن الإزاحة بالطول الموجي صغيرة جداً، و بالتالي يظهر لنا $\lambda' \cong \lambda$. الثابت h/mc له أبعاد الطول، لهذا يسمى طول موجة كومبتون Compton wave length يُعْطى مقداره بـ

$$\frac{h}{m_e c} = 2.42631 \times 10^{-12}\,\mathrm{m}.$$

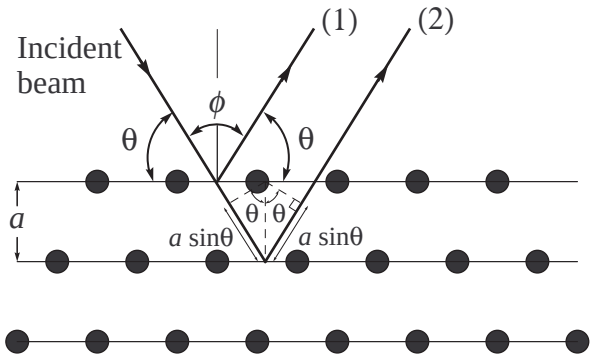
إن قياس طاقة إرتداد الإلكترون تتفق ايضاً مع نظرية كومبتون. بالإضافة إلى ذلك، تم إجراء تجربة التطابق الزمني للكشف عن إنبعاث الفوتونات المتشتتة و الإلكترونات المرتدة. وُجِد أن هذا الإنبعاث متزامن. إن دقة تفسيرات كومبتون و بالتالي تكمية الضوء غير قابلة للجدل بعد الآن بالرغم من الصعوبات في المفاهيم الخاصة بالطبيعة الجسيمية للموجات الكهرومغناطيسية و التي تتفاعل مع الإلكترونات و الذرات كتفاعل الكرات الجسيمية.

1.4 فرضيات دبرولي De Broglie hypothesis

بسبب التناظر بين مبدأ فيرمات Fermat's principle في علم البصريات[6] و مبدأ الفعل الأقل principle of the least-action في الميكانيكا[7]، إقترح دبرولي في عام 1923م أن الطبيعة المزدوجة الموجية-الجسيمية للإشعاعات يقابلها طبيعة مزدوجة جسيمية-موجية للمواد. و عليه، فإن للجسيمات خواص موجية تحت ظروف معينة و بالتالي

[6]مبدأ فيرمات ينص على أن شعاع الضوء يسلك خلال إنتشاره بين نقطتين المسار الذي له أقل زمن ممكن. لهذا يسير الضوء في خطوط مستقيمة. يمكن إثبات هذا المبدأ من مبدأ هيجنز Huygens' principle ويستعمل لوصف إنعكاس شعاع الضوء من المرايا و إنكساره في الأوساط المختلفة و يمكن عن طريق هذا المبدأ إثبات قانون سنيل Snell's law.

[7]ينص مبدأ الفعل الأقل على أن النظام الميكانيكي يسلك خلال تطوره الزمني بين نقطتين المسار الذي له أقل فعل. حسب نسخة هاميلتون، يُعَرَّف الفعل $\mathcal{S}$ لنظام يوصف بدالة لاجرانج $L(q,\dot{q},t)$ بالتكامل الزمني التالي $\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot{q},t)dt$. لهذا فإن تغيير variation الفعل يساوي صفر لأنه قيمة صغرى، أي أن $\delta\mathcal{S} = 0$. في غياب أي قيود، فإن مسار أقل فعل بين نقطتين في الفضاء هو الذي له أقل زمن، أي الخط المستقيم.



شكل (1.12): حيود إشعة x من على الطبقات الذرية في سطح ما من الأسطح البلورية. هذه الطبقات تُعْرف بأسطح براج Bragg's surfaces.

هناك طول موجة مصاحب لهذه الجسيمات. إقترح دبرولي صيغة لحساب طول الموجة المصاحب للجسيمات يعطى بـ

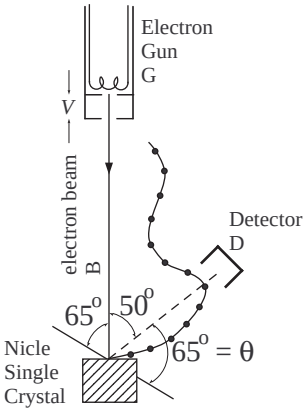
$$\lambda = \frac{h}{p}, \tag{1.32}$$

حيث أن h هو ثابت بلانك، و p هي كمية حركة الجسيم. لقد جذبت فرضيات دبرولي إهتمام الكثير من العلماء و أقترح العديد منهم أنه يمكن إثبات فرضيات دبرولي بدراسة حيود الإلكترونات electronic diffraction. في ذلك الوقت إنكب العديد من العلماء على دراسة طيف الأشعة السينية بملاحظة حيودها على بلورات الجوامد، حيث تعمل الشبيكة البلورية crystal lattice عمل محزوز حيود diffraction grating طبيعي و ثلاثي الأبعاد، بسبب أن المسافة بين الأسطح الذرية في الشبيكة البلورية (في حدود Å) تقارب الطول الموجي للأشعة السينية. إن أول من توصل إلى هذه الفكرة كان العالم لاوي Max von Laue عام 1912م و طبقها لدراسة طيف الإشعة السينية و من ثم دراسة التركيب البلوري للجوامد.

لدى سقوط أشعة x وحيدة اللون بطول موجي λ على سطح بلوري يحتوي على عدة طبقات ذرية مسافة الفصل بين سطحين متتاليين هي a و الزاوية بين الأشعة و السطح هي θ، كما هو موضح في الشكل (1.12)، فإن الذرات في الطبقة الذرية ستُشَتت جزء صغير من الأشعة الساقطة كموجة كروية يعتمد طور هذه الموجة على موقع الذرات التي تشتت عليها الأشعة. في إتجاهات معينة يحدث تداخل بناء constructive interference بين الإشعاعات المتشتتة بينما في إتجاهات أخرى يحدث تداخل هدام destructive interference. قام الفيزيائي براج W.L. Bragg بإشتقاق صيغة رياضية للتداخل البناء من الشكل (1.12)، حيث أن الشعاعين (1) و (2) يتداخلان تداخلاً بناءً إذا كان فرق المسار (هنا $a\sin\theta + a\sin\theta$) يساوي مضاعفات أعداد صحيحة للطول الموجي λ، أي أن

$$2a\sin\theta = n\lambda; \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{1.33}$$

لاحقاً، إستخدم العلماء أنماط حيود إشعة x من على أسطح براج لدراسة التركيبات البلورية للجوامد. بما أن الأشعة السينية ترتطم كجسيم مع الإلكترون، و تنحاد كموجة من على البلورات ، إذاً من المنطقي أن ترى البلورة شعاع الإلكترونات الساقط عليها كموجات وذلك عند طاقة و كمية حركة تعطي طول موجي ألكتروني مقارباً للإبعاد البلورية. هذا ما نفذه العالمان دافيسون و جيرمر في مختبرات بل Bell laboratories بالتحقق من حدوث حيود للإلكترونات على البلورات و بالتالي إثبات فرضيات دبرولي عملياً.



شكل (1.13): جهاز دراسة طيف إنبعاث الإلكترونات الثانوية أستُخدِم لدراسة توزيع حيود الإلكترونات على بلورة النيكل.

1.5 تجربة حيود الإلكترونات
Electron diffraction experiment

في عام 1925م قام العالمان دفيسون و جيرمر بالبحث عن أنماط لحيود شعاع من الإلكترونات (بدلاً من الفوتونات) على بلورة وحيدة single crystal من النيكل. إذا كانت الإلكترونات لها خاصية موجية عند طاقة معينة، فيجب أن يتبع نمط حيودها من على أسطح البلورة قانون براج (1.33). إستخدم العالمان جهاز دراسة الحيود بُنِي أصلاً لدرسة طيف إنبعاث الإلكترونات الثانوية من الجوامد و الموضح في الشكل (1.13).

يتكون جهاز دافيسون-جيرمر من مدفع إلكتروني G عند فرق جهد إستخراج للإلكترونات مقداره V. يسقط شعاع الإلكترونات على بلورة نيكل أحادية، تم تحضيرها بتسخين بلورة نيكل عند درجات حرارة عالية بإستخدام فرن خاص للحصول على بلورة أحادية خالية من الأكاسيد. إن مسافة الفصل بين الطبقات الذرية محدد مسبقاً من دراسات سابقة لحيود الأشعة السينية على نفس البلورة، و التي وجد قيمتها $a = 0.92\,\text{Å}$.

إستخدم دافيسون و جيرمر جهد إستخراج (تسريع) الإلكترونات من المدفع الإلكتروني عند قيمة $V = 54\,\text{Volt}$. و عليه فإن الطاقة الحركية للإلكترونات هي[8] $K = 54\,\text{eV}$. و عليه فإن كمية الحركة للإلكترونات تصبح

$$K = \frac{p^2}{2m_e} \Rightarrow p = \sqrt{2m_eK}.$$

من علاقة طول موجة دبرولي (1.32) نستطيع حساب الطول الموجي كالتالي

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_eK}} = \frac{hc}{\sqrt{2(m_ec^2)K}},$$

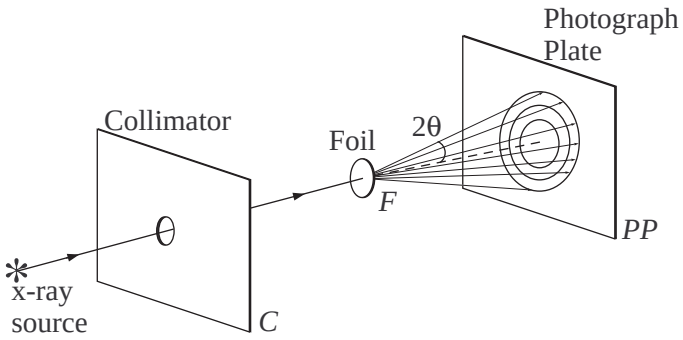
لكن الثابت hc يمكن أن يعبر عنه بوحدة eV.Å كالتالي

$$hc = 1.23984 \times 10^{-6}\,\text{eV.m} = 12398.4\,\text{eV.Å},$$

و طاقة كتلة الإلكترون يمكن أن تحسب بوحدة eV كالتالي

$$m_ec^2 = (9.10938 \times 10^{-31}\,\text{kg})(299792458\,m/s^2) = 8.1871 \times 10^{-14}\,\text{J} = 511000\,\text{eV},$$

[8] لاحظ أن طاقة الكتلة للإلكترون هي $m_ec^2 = 0.511\,\text{MeV}$ و هي أعلى بكثير من الطاقة الحركية $K = 54\,\text{eV}$. و بالتالي إذا كانت $K \ll mc^2$ فإن الحركة هنا غيرنسبية.



شكل (1.14): جهاز دراسة حيود أشعة x من شريحة معدنية رقيقة تتألف من بلورات ميكرونية. الجهاز يتكون من مصدر أشعة سينية وحيد اللون، مجمع C، الشريحة الهدف F، ولوح فوتوجرافي تسقط عليه الأشعة بعد حيودها.

و عليه يصبح الطول الموجي لشعاع الإلكترونات الساقطة على بلورة النيكل

$$\lambda = \frac{12398.4\,\text{eV.Å}}{\sqrt{2(511000\,\text{eV})(54\,\text{eV})}} = 1.67\,\text{Å}.$$

يمكن تحديد زاوية حدوث التداخل البناء عند الرتبة الأولى ($n = 1$) لشعاع الإلكترونات المتشتت من على بلورة النيكل بإستخدام صيغة براج (1.33)، حيث نحصل على

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2a} = \frac{1.67\,\text{Å}}{2(0.92\,\text{Å})} = 0.91 \Rightarrow \theta = 65.2°.$$

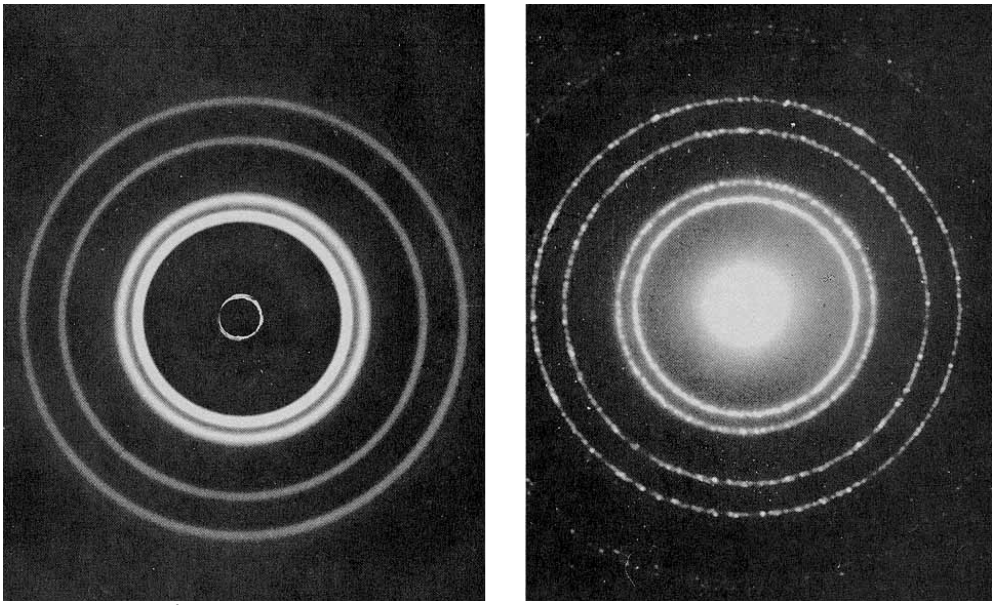
إن قيمة زاوية الحيود للقيمة العظمى بالنسبة لإتجاه شعاع الإلكترونات ϕ تحسب بمعرفة زاوية العمل θ grazing angle من الشكل (1.12)، حيث نلاحظ أن $\phi + 2\theta = 180°$ ، و بالتالي الزاوية ϕ تصبح

$$\phi = 180° - 2\theta = 180° - 2 \times 65.2° \approx 50°.$$

إن الزاوية ϕ هي زاوية الكاشف detector D في الشكل (1.13). و بالفعل وجد دافيسون و جيرمر أن الكاشف عند زاوية $50°$ يسجل قيمة عظمى للإلكترونات المتداخلة نتيجة لحيودها على بلورة النيكل الأحادية مما يعني أن شعاع الإلكترونات يحدث له حيود موجي يُوصَف بقانون براج (1.33) و بطول موجي يُعْطى من علاقة دبرولي (1.32) مما يثبت بشكل قاطع صحة فرضيات دبرولي و التي أصبحت تُعْرف بمبدأ دبرولي De Broglie principle.

في عام 1927م قام العالم طومسون G.P. Thomson (إبن العالم جي طومسون مكتشف الإلكترون) بإستخدام تجهيزات جهاز حيود إشعة x على الشرائح المعدنية الرقيقة metallic foils، و الموضحة في الشكل (1.14)، لعمل تجارب حيود من على نفس الشرائح المعدنية الرقيقة بإستخدام شعاع من الإلكترونات السريعة (طاقاتها في حدود keV) بدلاً عن أشعة x. إن نمط الحيود الإلكتروني مماثل لنمط حيود أشعة x كما هو موضح في الشكل (1.15). إن نمط الحيود الدائري على اللوح الفوتوجرافي يعود إلى أن الشريحة المعدنية تتألف من بلورات ميكرونية microcrystals لها إتجاهات عشوائية. لهذا فإن الشعاع الساقط يتعرض لحيود شديد من على البلورات الميكرونية فقط التي تتبع شرط براج (1.33). لذلك يظهر نمط الحيود على شكل مخاريط متراكزة تعمل زاوية 2θ بالنسبة لإتجاه الشعاع الساقط كما هو موضح في الشكل (1.14). المقطع العرضي لهذه المخاريط المتراكزة تظهر على شكل دوائر متراكزة على اللوح الفوتوجرافي كما في الشكل (1.15). كل دائرة من الدوائر تمثل التشتت على مجموعة تحوي عدة أسطح من سطوح براج. كلما زادت عدد الأسطح في المجموعة زادت شدة الأشعة المتشتتة من عليها.

بعد ذلك الوقت، قام العلماء بالعديد من تجارب الحيود مثل تجربة شتيرن-جيرلاخ Stern-Gerlach experiment و التي تشمل جسيمات مختلفة (ذرات، نيوترونات، ... إلخ) لإثبات الطبيعة الموجية للجسيمات، جميعها إتفقت مع فرضيات دبرولي. نتيجة لهذا المبدأ ظهر مايسمى المجهر الإلكتروني، و الذي يوظف شعاع الإلكترونات



شكل (1.15): تشابه نمط الحيود الناتج عن شريحة ألمنيوم رقيقة بأشعة x بطول موجة 0.71Å (على اليسار) و شعاع من الإلكترونات طاقاتها 600 eV (على اليمين). هذا يثبت الطبيعة الموجية للإلكترونات.

بدلاً عن الضوء. تبرز هنا العديد من التسؤلات: هل هناك معيار لإعتبار نظام ما جسيم و آخر موجة؟ بعبارة أخرى متى نعتبر، الإلكترون على سبيل المثال، جسيم و متى نعتبره موجة؟ و متى نعتبر الإشعاع جسيم؟ لماذا لا نلاحظ الطبيعة الموجية للجسيمات المجهرية في حياتنا اليومية ولا نلاحظ الطبيعة الجسيمية للإشعاع؟ هل يمكن للإلكترون أن يحمل طول موجة مرئية؟ أو بالأحرى لماذا لانرى شعاع الإلكترونات بالعين المجردة كما هو الحال في الضوء؟

الإجابة على هذه التساؤلات يتم بمقارنة طول موجة الشعاع الساقط بأبعاد النظام المتفاعل معه. لنفرض شعاعاً ما ساقط (قد يكون إلكترون، فوتون، نيوترون، ذرة ... إلخ) له طول موجة λ و يسقط على منظومة ما (نواة، ذرة، جزئ، بلورة ... إلخ) لها متوسط بعد بحدود r. إذا كانت $\lambda \ll r$ (أو $rp \gg h$) فإن الشعاع سيتفاعل مع المنظومة الهدف كحزمة من الجسيمات. بالمقابل إذا كانت $\lambda \geq r$ (أو $rp \leq h$) فإن الشعاع سيتفاعل مع المنظومة الهدف كموجة. يمكن أيضاً أن ننظر إلى الموضوع من زاوية أخرى، فنقول إذا كان $\lambda \ll r$ (أو $rp \gg h$) فإن الشعاع الساقط سيتفاعل مع المركبات الأساسية التي يتألف منها النظام (طبعاً إذا كان النظام مركباً). بالمقابل سيرى الشعاع الساقط النظام المتفاعل معه كبُنْيَة واحدة إذا تحقق $\lambda \geq r$ (أو $rp \leq h$). على سبيل المثال إذا أردنا الشعاع أن يتفاعل مع الإلكترونات الذرية فيجب أن تكون طول موجته أقل بكثير من الأبعاد الذرية حتى يتمكن من التخلل إلى الذرة و التفاعل مع إلكتروناتها.

في مقياسنا فوق المجهري، المفهوم الموجي للجسيمات بعيداً عن منظورنا الإدراكي، لذلك لانلاحظه في حياتنا اليومية. فلو أخذنا قطرة ما بعدها في حدود 0.1 ملم تتحرك بسرعة 10 سم/ث فإن طول موجة دبرولي المصاحب لها في حدود $1.6 \times 10^{-24}\,\mathrm{m}$ أي أصغر من الأبعاد النووية (في حدود $10^{-15}\,\mathrm{m}$) بحدود ألف مليون مرة! أي من المستحيل أن نلحظ الطول الموجي لها. بل من المستحيل أن نلحظ الخصائص الموجية لجسيم أبعاده أكبر من $10^{-6}\,\mathrm{m}$ (أو الميكرومتر). لهذا السبب لانلاحظ الطبيعة الموجية للجسيمات المجهرية في حياتنا اليومية. إن صغر ثابت بلانك h مقارنة مع مقياسنا الماكروسكوبي هي التي لاتمكنا من إدراك الخصائص الجسيمية للإشعاعات و العكس، حيث لانلاحظ الخصائص الموجية للجسيمات.

أما بالنسبة لماذا لانرى إشعاعات بعض الجسيمات، فهذا يعود إلى محدودية قدرتنا على الرؤية في نطاق ضيق. نحن نستطيع أن نرى الأشعة الكهرومغناطيسية ضمن نطاق الضوء المرئي و التي لها أطوال موجية تقع بين 4000Å

و 7000Å. لو فرضنا أن الطول الموجي فقط هو معيار الرؤيا بالعين المجردة[9] ، فحتى يمتلك شعاع من الإلكترونات طول موجي في حدود 4000Å فإن طاقته الحركية يجب أن تصبح

$$\begin{aligned} K &= \frac{p^2}{2m_e} = \frac{h^2}{2\lambda^2 m_e} = \frac{(6.63\times10^{-34}\,\mathrm{J.s})^2}{2(4000\times10^{-10}\,\mathrm{m})^2(9.11\times10^{-31}\,\mathrm{kg})}, \\ &= 1.51\times10^{-24}\,\mathrm{J}, \end{aligned}$$

أي بحدود $9.4\times10^{-6}\,\mathrm{eV}$. هذه طاقة منخفضة للغاية درجة حرارة الوسط يجب أن تكون $0.11^\circ\mathrm{K}$ و هي من الصعب تكثيف جسيمات فرميونية إلى هذه الدرجة. للجسيمات أثقل من الإلكترون، فإن الحصول 4000Å يعني طاقة حركة أقل. للبروتون أو النيوترون هذه الطاقة أقل بـ 1835 مرة منها للإلكترون! لهذا السبب فإنه من غير الممكن رؤية الحزم الجسيمية بالعين المجردة.

سؤال (1.5): ما هي طاقة الإلكترون بوحدة eV حتى تصبح طول موجته في حدود 7000Å. (الإجابة: $3.07\times10^{-6}\,\mathrm{eV}$). ♢

سؤال (1.6): ما هي طاقة البروتون بوحدة eV و درجة حرارته بوحدة الكلفن حتى تصبح طول موجته في حدود 4000Å. (الإجابة: $5.12\times10^{-9}\,\mathrm{eV}$، $0.00006^\circ\mathrm{K}$). ♢

1.6 أثر ديراك-كابيتزا The Kapitza-Dirac effect

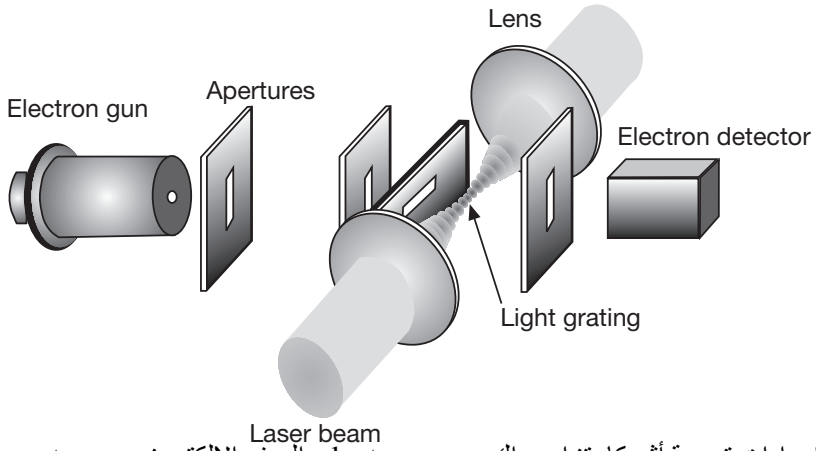
بعيد نشر نتائج تجربة دافيسون و جيرمر في العام 1927م إستنتج العلماء أن الإلكترونات بشكل عام يحدث لها حيود كالموجات من على التركيبات الدورية المادية material periodic structures كالبلورات. فما المانع أن يحدث حيود للإلكترونات من تركيبات دورية من الموجات؟ كالموجات الموقوفة مثلاً؟ هذا ما تنبأ به كابيتزا و ديراك Kapitza and Dirac في عام 1933م بأن الإلكترونات يحدث لها حيود من على موجات ضوئية موقوفة. أي أن الأدوار المادية الوجية تبدلت، بدلاً من أن يكون الحيود مادي-مادي كما هو الحال في تجربة ديفسون و جيرمر، أصبح مادي-موجي كما تنبأ كابيتزا و ديراك.

إن تنبأ كابيتزا-ديراك أو ما يعرف بأثر كابيتزا-ديراك يجب أن ينتظر سنوات طويلة حتى يكتشف الليزر و يتطور علمه حتى العام 2001م عندما تمكن فريموند-أفلاطوني-باتلان D.L.Freimund، K.Aflatooni، and H.Batelaan من مشاهدة أثر كابيتزا-ديراك لدى عبور شعاع من الإلكترونات عمودياً على شعاعين متعاكسين من الليزر مكونين موجات موقوفة من الضوء تعمل عمل محزوز حيود ضوئي light grating يؤدي إلى حيود الإلكترونات إلى نمط يتناسب مع نمط الموجات الموقوفة.

الجهاز المستخدم في التجربة موضح في الشكل (1.16). كي نقف على أبعاد و طاقات التجربة فإن شعاعي الليزر المستخدمان في التجربة نبضي pulse طاقة كل نبضة 0.2 جول و زمن كل نبضة 10 نانوثانية و طول موجتيهما 532 نانومتر تم تركيزهما بإستخدام عدسات ضوئية إلى شعاعين قطر كل منهما 125 ميكرومتر. شعاع الإلكترونات الساقط ينبعث من مدفع إلكتروني بطاقة 380 إلكترون فولت جُمع الشعاع بشقين عموديين من الموليبدنيوم molyb-denum المسافة بينهما 24 سم و عرض كل شق 10 ميكرومتر. بالإضافة إلى شق ثالث أفقي يؤدي إلى قطع إرتفاع الشعاع الإلكتروني إلى عرض الشعاع الضوئي بعد الشق الثالث بـ 1 سم الموجات الضوئية الوقوفة و التي يتشتت عليها الشعاع الإلكتروني. الشعاع المتشتت ينقى بشق رابع على بعد 24 سم من الموجات الضوئية الموقوفة ليقوم كاشف إلكتروني بالكشف عن الإلكترونات المتشتتة.

---

[9] هذا الأمر غير مؤكد و فيه عدة تصورات. هناك من يؤكد أنه حتى نرى الإشعاع يجب أن يكون التردد أيضاً ضمن النطاق المرئي، وهناك آراء ترى أن السرعة تلعب دور. في بعض الأحيان نرى ضوء يخرج عندما ينتشر شعاع من الإلكترونات في الوسط. هذا الضوء ناتج عن ذرات الوسط بسبب تأينها بشعاع الإلكترونات.



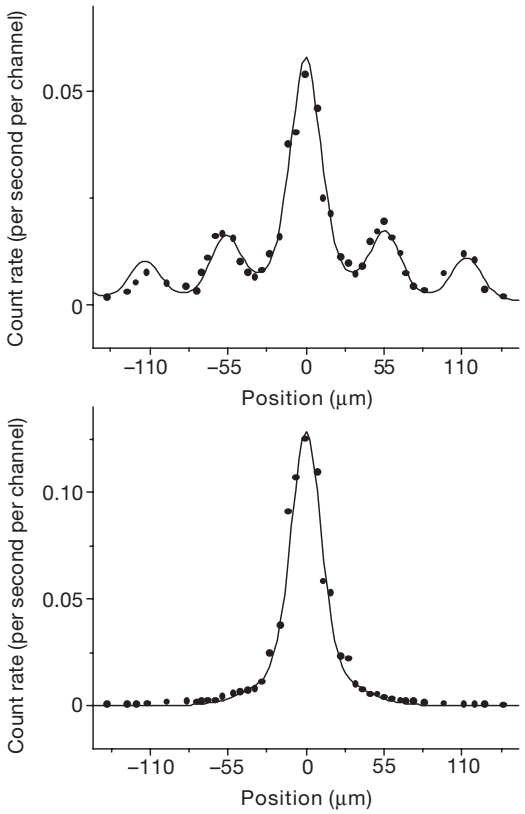
شكل (1.16): إعدادات تجربة أثر كابيتزا-ديراك: electron gun المدفع الإلكتروني، apertures فتحات، lens عدسة، light grating محزوز ضوئي، laser beam شعاع ليزر، electron detector كاشف إلكترونات. المصدر: D.L.Freimund, K.Aflatooni, and H.Batelaan, Nature **413**, 142-143 (2001), MacMaillan publishers Ltd.

إن نمط الحيود يُعْطى في الشكل (1.17) في الأعلى و الذي يوضح أنماط الحيود الإلكتروني في المواقع المتوقعة و التي تتفق مع النمط المحسوب رقمياً من ميكانيكا الكم. النمط هو دلالة كبيرة على حدوث أثر كابيتزا-ديراك. للتأكد تم دراسة نفس الشعاع من الإلكترونات بدون وجود الموجات الموقوفة و التي يُعْطى طيفها في الأسفل.

إن التجارب الحديثة لحيود الجسيمات تُجرى على مقياس أكبر، حيث تستخدم شعاع من الذرات عوضاً عن الإلكترونات. بل و يأمل العلماء من مشاهدة الخصائص الموجية للأجسام الفوق مجهرية macroscopic objects كشعاع من الجزيئات الكبيرة كالبروتين. هذا النوع من التجارب يقرب الهوة بين عالمين، العالم الكمي و العالم التقليدي.

1.7 تجربة الشق المزدوج Double-slit experiment

تُعرف بتجربة شقي يونج Young's experiment سميت بعد العالم توماس يونج Thomas Young عام 1801م حيث إستعمل مقياس التداخل لقياس الأطوال الموجية للضوء. إن تجربة يونج بحد ذاتها برهنت على الطبيعة الموجية للضوء. إن إعدادات التجربة تظهر في الشكل (1.18). تقليدياً، التجربة عبارة عن شقين S_1 و S_2 يسقط عليهما ضوء من مصدر نقطي S. حسب النظرية الموجية لهيجنز، فإن صدر الموجة ينشطر عند الشقين ليتحول الشقين نفسهم إلى مصدرين مترابطين coherent sources يُشِعان صدري موجة مترابطة مما يؤدي إلى تداخل بين صدري الموجة، إما بناء أو هدام، إعتماداً على فرق الطور بينهما. النتيجة إذاً نمط تداخل interference pattern يظهر على اللوح الفوتوجرافي PP photographic plate كأهداب fringes مضيئة و مظلمة كما هو موضح في الشكل (1.19). لقد إستطاعت النظرية الموجية من تفسير ظاهرة الأهداب لتجربة الشقين و التنبأ بمواقع و توزيعات الشدة للأهداب على الشاشة بنجاح كبير. ومن هنا، أُعتبر أن التداخل هو سمة من السمات الموجية، كما هو الحال في ظاهرة الحيود. بعد تغير نظرتنا للإشعاع على أنه يتكون من حزم جسيمية من الفوتونات بدأ العلماء بالتسائل عن إمكانية تفسير نمط التداخل في الشكل (1.19) بإستخدام النظرية الجسيمية الكلاسيكية. لو كان الضوء ينتقل من المصدر إلى الشاشة كجسيم، فإنه حسب وجهة النظر الجسيمية التقليدية عدد الإصابات على الشاشة لابد من ان تساوي مجموع عدد الجسيمات التي تمر من خلال الشقين الأيمن و الأيسر، بإعتبار أن للجسيم (هنا فوتون) إحتمالية متساوية من أن يعبر أحد الشقين دون الآخر. بكلمة أخرى، الإصابات على الشاشة يجب أن تحوي فقط على بقعتين مضئتين تعكسان وجود الشقين. لكن لدى سقوط حزمة الضوء على الشقين فإننا نحصل نمط التداخل الموضح في الشكل (1.19). بالإضافة إلى ذلك، فإن إغلاق أحد الشقين أدى إلى ظهور نمط حيود diffraction على الشاشة، و ليس نمط تداخل. ليس هذا و حسب، بل وجد من التجربة أن محاولة تحديد عدد الفوتونات التي تمر من خلال أحد الشقين أو كلاهما يؤدي إلى تحييد نمط التداخل. هذا حدا ببعض العلماء بالإعتقاد أن الفوتونات في الحزمة تتفاعل فيما بينها (أو تتداخل

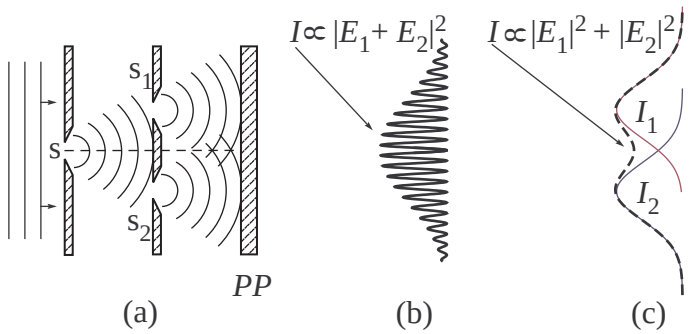


شكل (1.17): نمط الحيود للإلكترونات المتشتتة من على موجات الليزر الموقوفة تعطى كعدد الإلكترونات المتشتتة كدالة للموقع بوحدة الميكرومتر. النقاط تمثل القيم المقاسة عملياً بينما المنحنى يمثل التنبئآت النظرية المحسوبة رقمياً من معادلة شرودنجر. في الاعلى يمثل النمط بوجود الموجات الموقوفة بينما الاسفل يعطي النمط بدون الموجات الموقوفة. المصدر: D.L.Freimund, K.Aflatooni, and H.Batelaan, Nature **413**, 142-143 (2001), MacMaillan publishers Ltd.

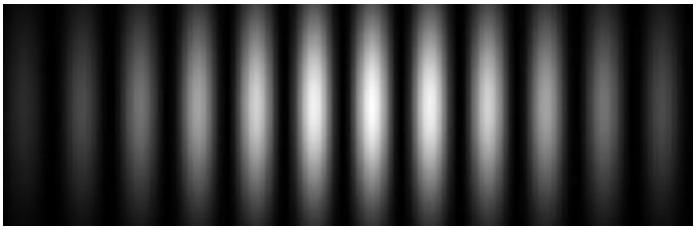
فيما بينها) للحصول على النمط. و عند محاولة القياس، فإنها تتفاعل مع الكاشف كجسيمات و بالتالي تفقد خاصيتها الموجية و لذلك لاتتداخل. بكلام أكثر تفصيل، يمكن القول أن الكشف عن الفوتون يتضمن تفاعل فيزيائي بين الفوتون و الكاشف detector بطريقة تؤثر و تغير في الكاشف. نقول عن فوتونين لهما نفس التردد إنبعثا عند نفس الوقت أنهما مترابطين. هذان الفوتونان يبقيان مترابطين حتى لو عبرا الشقين و عندئذٍ يقعان على الشاشة في نفس الوقت لكن عند نقطتين متباعدتين أفقياً ضمن نمط التداخل. غير أنه إذا صادف أحد الفوتونين أو كلاهما الكاشف، فإن تفاعل الفوتون مع الكاشف يحتاج إلى زمن مما يؤدي إلى فقدان الترابط بين الفوتونين decohere و بالتالي يصلان إلى الشاشة بأزمنة مختلفة و لا يحدث التداخل.

الحل الوحيد لتأكيد الصفة الجسيمية للضوء و الحصول على بقعتين مضئتين دون التأثير على التداخل، هو أن نُسْقِط على الشقين فوتوناً واحداً في المرة الواحدة و من ثم ندرس الناتج على الشاشة بعد زمن كافي من الإسقاط و لعدد كبير كفاية من الفوتونات. في الواقع إنتظر العلماء حتى عام 1986م للتوصل إلى التقنية اللازمة ليقوموا بهذه التجربة، حيث تمكنوا من إرسال فوتونا في كل مرة يسقط على الشقين و منه على الشاشة PP المغطاة بلوح فتوجرافي. الذي حصل أنه لم يتم التحقق من تنبآت النظرية الموجية و لا النظرية الجسيمية أيضاً. الملاحظ هو:

1. أثناء بداية تعرض اللوح الفوتوجرافي PP إلى الفوتونات ظهر أنه لا يوجد نمط تداخل بل أن كل فوتون يسقط بنوع من العشوائية على أماكن محلية localized region من اللوح الفوتوجرافي. لهذا السبب التفسيرات الموجية لا تعمل هنا.
2. بعد زمن طويل من تعرض اللوح الفوتوجرافي للفوتونات المتعاقبة عليه واحد تلو الآخر نجد في النهاية أن نمط الأهداب بدأ بالظهور تدريجياً مما يعني أن إعتبار الأهداب ناتجة عن التفاعل بين الفوتونات، حسب النظرية الجسيمية، غير صحيح.



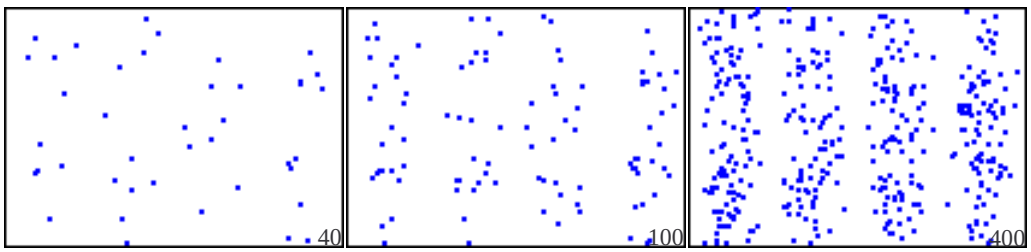
شكل (1.18): (a) إعدادات تجربة توماس يونج Thomas Young لتجربة الشقين لدراسة التداخل بين مصدرين مترابطين للضوء، (b) توزيع الشدة على الشاشة لنمط التداخل و الناتج عن جمع سعات المركبة الكهربائية للشقين. (c) الشدة على الشاشة دون تداخل فيما لو كان الجمع ليس للسعات بل للشدد الناتجة عن الشقين، كما تتنبأ نظرية الجسيمات الكلاسيكية.



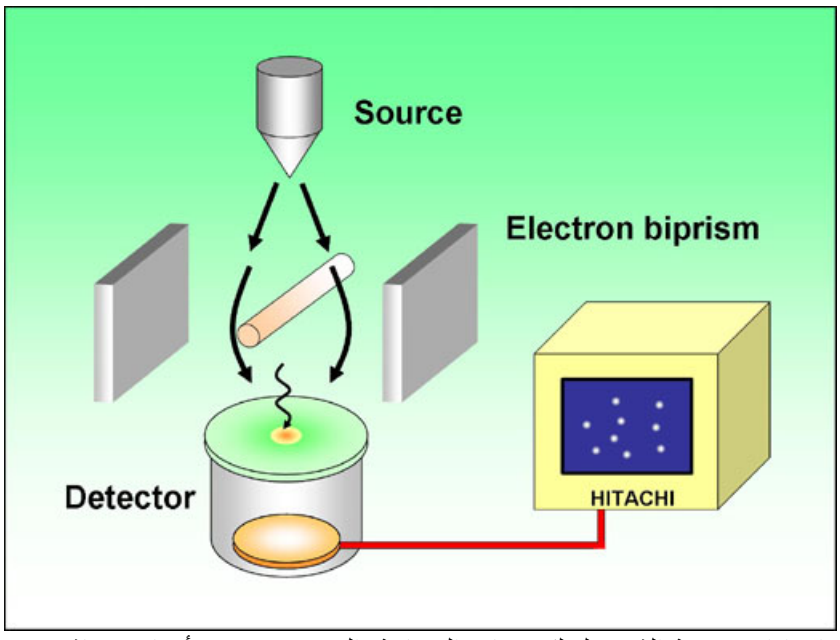
شكل (1.19): نمط التداخل الضوئي interference pattern على الشاشة يظهر كأهداب fringes مضيئة و مظلمة و الناتج عن تداخل الضوء المنبعث من الشقين.

3. لو أُغلق أحد الشقين، فإنه مع الزمن سيتكون على اللوح الفوتوجرافي نمط حيود و ليس نمط تداخل.

إن الملاحظتين الأولى و الثانية موضحتان في الشكل (1.20). هذه النتائج تناقض و تتفق مع النظرية الموجية-الجسيمية في نفس الوقت! لو كان الضوء لا يتصرف كموجة لما حصل التداخل أصلاً. كذلك لماذا يتأثر نمط التداخل بحقيقة غلق أحد الشقين بالرغم من إستبعاد فرصة تفاعل الفوتون مع الفوتون و بالتالي التعامل مع كل فوتون على حدة. و ما هي أهمية حقيقة غلق أو فتح أحد الشقين على الفوتون الواحد؟ في المقابل، لو كان الضوء عبارة عن موجة لما كان من الممكن أصلاً أن يسقط الضوء على شكل كمات متقطعة (فوتونات) و لإنتشر على اللوح بمساحة أكبر كلما إبتعد اللوح عن الشقين و بتوزيع شدة كما في الشكل (1.18) الجزء (c). الأغرب من ذلك حدث عندما حاول العلماء من تحديد أي الشقين سيختاره الفوتون للعبور و ذلك بوضع كاشف على أحد أو كلا الشقين نتج عن هذا إختفاء نمط التداخل مرة أخرى و الحصول على نمط حيود!



شكل (1.20): محاكاة حاسوبية لسقوط فوتون لكل مرة على لوح فوتوجرافي، (a) لـ 40 فوتوناً، (b) لـ 100 فوتون، و أخيراً (c) لـ 400 فوتون. لاحظ كيف يتحول النمط من التوزيع العشوائي إلى نمط يقارب نمط التداخل المعروف لتجربة الشقين.

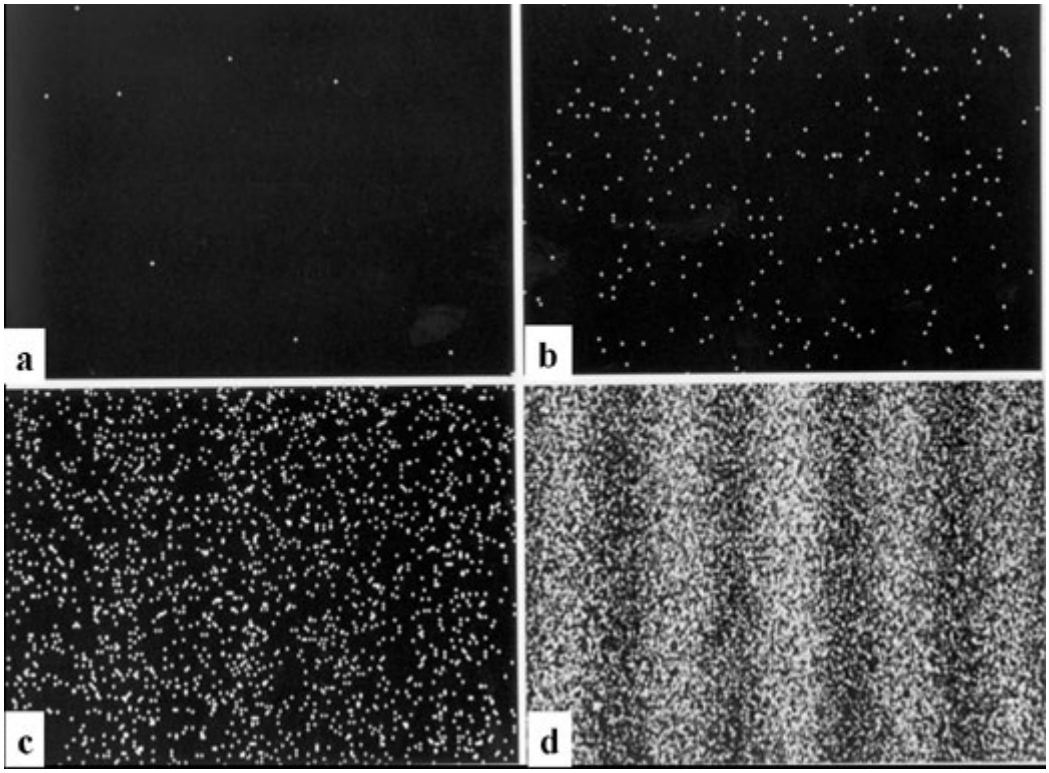


شكل (1.21): إعدادات تجربة الشقين للإلكترونات المتعاقبة. المصدر: مختبر أبحاث هيتاشي Hitachi advanced research lab. Hitachi co. Ltd.

عموماً وضع كاشف على أحد الشقين سيؤدي في الحالات غير المثالية - أو الأكثر واقعية بطبيعة الحال- إلى إختفاء الفوتون بسبب إمتصاصه في مادة الكاشف. السبب يعود إلى أن الفوتون لايحمل شحنة نستطيع قياس أثره الكهربائي أو المغناطيسي، كما أن أغلب الفوتونات الضوئية أو تحت الضوئية يتم الكشف عنها بتفاعلها مع المادة من خلال الأثر الكهروضوئي و الذي يؤدي إلى إختفاء الفوتون بالكامل. هذه الصعوبة في الكشف يمكن التغلب عليها فيما لو إستبدلنا الفوتون بالإلكترون. بالإضافة إلى ذلك إستخدام شعاع من الإلكترونات في تجربة الشقين سيبين ما إذا كان الإلكترون يتصرف مثل الفوتون أم لا و بالتالي هذا يعتبر إختباراً إضافياً لمبدأ دبرولي. نحن لانشكك في الطبيعة الموجية لحزمة شعاعية من الإلكترونات! هذه الطبيعة أثبتها ديفسون و جيرمر في تجربتهم الشهيرة المشروحة في القسم (1.5). و العلماء أثبتوا إمكانية الحصول على نمط تداخل مطابق للنمط الموضح في الشكل (1.19) لحزمة شعاعية من الإلكترونات تسقط على الشقين. لكن الفضول يدفعنا للتساؤل عن مدى التماثل في غرابة النتائج بين الإلكترون و الفوتون لدى إستخدام شعاع من إلكترونات وحيدة و متتابعة في تجربة الشقين.

مع التطور التقني الكبير في صناعة المجهر الإلكتروني، قام العديد من العلماء بتجربة الشقين بشعاع من الإلكترونات تنطلق و تسقط على الشقين بالتتابع (ولكن ليس بالتزامن) من مصدر المجهر الإلكتروني، كما هو موضح من إعدادات التجربة في الشكل (1.21) و الذي قام به فيزيائيو مختبرات الأبحاث و التطوير في شركة هيتاشي العالمية Hitachi Global. الإلكترون المنبعث يعبر جهازاً يطلق عليه موشور الإلكترون الثنائي electron biprism و الذي يتكون من لوحين متوازيين parallel plates و بينهما في المركز تماماً فتيل دقيق fine filament، قطره أرق من 1 ميكرون (أقل من واحد بالألف من المليمتر). الإلكترونات المنبعثة سَتُسَرَّع إلى طاقة 50 keV (عند هذه الطاقة الإكترونات تستطيع أن تلف حول الكرة الأرضية 3 مرات في الثانية الواحدة).

الإلكترونات التي تمر عبر أي الجهتين حول الفتيل تصل إلى الكاشف في زمن صغير جداً (تقريباً واحد على مليون من الثانية حيث يمر 10 إلكترونات لكل ثانية) و سيتم عدهم واحد تلو الآخر عن طريق هذا الكاشف detector و الذي عُدِّل خصيصاً للكشف عن الإلكترونات بدلاً عن الفوتونات بزمن ضئيل جداً و هو من إنتاج شركة Hamamatsu Photonics (PIAS). الكاشف له قدرة على كشف إلكترون واحد بكفاءة تصل إلى 100%. في بداية زمن التجربة بدأ يظهر على الشاشة عدد من النقط العشوائية هنا و هناك كما في الشكل (1.22) (a) و (b). هذه النقط تمثل إلكترونات تم الكشف عنها واحداً تلو الآخر كجسيمات. إلى حد الآن نستطيع القول بثقة أن الإلكترونات عبارة عن جسيمات. من المتوقع أن أهداب التداخل تتكون فقط عندما يمر إلكترونين حول الفتيل في آن معاً. لكن هذا لن يحدث في هذه التجربة بالذات، لأنه لايمكن لأكثر من إلكترون واحد أن يمر في المرة الواحدة. لدى تراكم عدد كبير من الإلكترونات، بدأ نسق هدبي منتظم بالظهور تدريجياً كما يُظْهر الجزء (c) من الشكل (1.22). إن نمط الأهداب



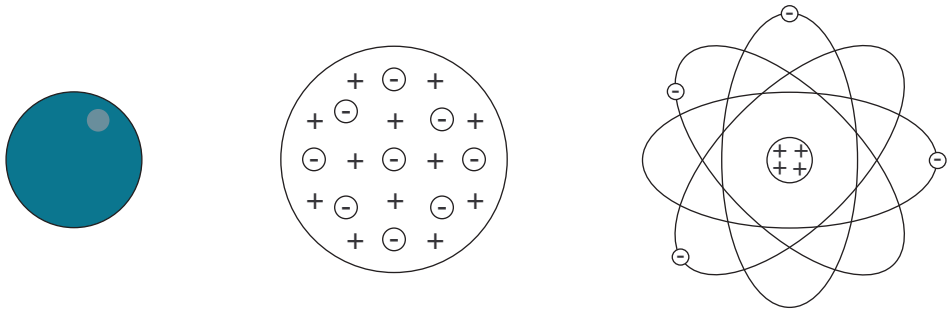
شكل (1.22): تراكم الإلكترون تلو الإلكترون مما يؤدي إلى بناء نمط تداخل في تجربة الشقين لشعاع من الإلكترونات الوحيدة المتعاقبة.

الكامل يمكن مشاهدته بوضوح بعد مرور 20 دقيقة كما هو واضح في الشكل (1.22) الجزء (d). كما تجدر الإشارة إلى أن الأهداب تتكون من النقاط المضيئة، و التي يمثل كل منها سجل للكشف عن إلكترون واحد. على الرغم من أن الإلكترونات أُرسلت واحداً تلو الآخر، فإنه بالإمكان مشاهدة أهداب التداخل بكل وضوح. إن أهداب التداخل هذه تتكون فقط عندما تعبر موجات الإلكترونات (وليس الإلكترون المادي) عبر جهتي موشور الإلكترون الثنائي عند نفس الزمن، ولا منطق غير هذا لتفسير هذا الحدث. لدى محاولة الكشف عن الإلكترونات فإنها تظهر دائماً كجسيمات منفصلة. في المقابل عندما تتراكم فإنها تتجمع في نمط و نسق يظهر كأهداب تداخل. على القاريء أن يتذكر أنه يوجد إلكترون واحد كل لحظة في المجهر. لقد و صلنا إلى إستنتاج بعيد جداً عن قدرة المنطق العام من أن يخبرنا به.

1.8 ذرة بوهر The Bohr atom

يمكن تلخيص تطور النظرية الذرية قبل نيلز بوهر Niels Bohr كالتالي:

- نموذج دالتون الذري تخيل الذرة كرة مصمطة كما في الشكل (a 1.23) و إعتبرها أصغر عنصر في المادة و هي غير قابلة للإنقسام.
- نموذج طومسون: بعد إكتشافه للأشعة المهبطية و تحديد هوية الإلكترون على يد مليكان، إعتبر طومبسون أن الذرة مكونة من توزيع مستمر للشحنة الموجبة خلال حجمها تتضمن إلكترونات سالبة مزروعة داخلها كما في الشكل (b 1.23). لم يصمد هذا النموذج بعد تجربة جيجر و مارسدن عام 1908م عند دراسة إستطارة جسيمات α على شريحة رقيقة من الذهب.
- نموذج رذرفورد: تجربة جيجر و مارسدن عام 1908م بينت أن الذرة معظمها فراغ و أن الشحنة الموجبة متمركزة في حيز صغير جداً، لذلك في عام 1911م، إعتبر رذرفورد الذرة عبارة عن حيز صغير موجب



(*a*) (*b*) (*c*)

شكل (1.23): رسم توضيحي لتطور النظرية الذرية إبتداء من (*a*) ذرة دالتون، (*b*) نموذج طومسون، و (*c*) نوذج رذرفورد.

يحوي كتلة الذرة يسمى النواة و الإلكترونات السالبة تدور حولها بمدارات بيضاوية بفضل قوة كولوم المركزية $\propto 1/r^2$. الشكل (1.23 *c*) يُعْطي رسم توضيحي لذرة رذرفورد.

إن نموذج رذرفورد نجح في تفسير إستطارة جسيمات α، لكنه لم يصمد طويلاً فقد واجه مشكلتين رئيسيتين: أولهما أن النموذج لم يفسر ظاهرة الإنبعاث الطيفي من ذرات العناصر لأن الإلكترون في هذا النموذج مرتبط بحركة دورية، بينما الإنبعاث الطيفي لايبدو أنه يرتبط بأي حركة توافقية (كما هو الحال في إشعاع الجسم الأسود) بل يتبع الصيغة التالية

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \tag{1.34}$$

حيث أن n_1 و n_2 أعداد صحيحة و $R_\infty = 1.097 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$ ثابت، يسمى ثابت رايدبرج . ثانيهما، الذرة في نموذج رذرفورد غير مستقرة عملياً. بما أن الإلكترون في مدارات بيضاوية أو دائرية فإنها في تسارع دائم، و حسب النظرية الكهرومغناطيسية الشحنات المتسارعة تُشع أشعة كهرومغناطيسية مما يؤدي إلى فقدان الإلكترون لطاقته بشكل مستمرخلال زمن قصير جداً (في حدود $10^{-10}\ \mathrm{s}$) و بالتالي إنهيار الإلكترونات على النواة و من ثم نهاية الذرة.

بعد عامين من نموذج رذرفورد، إقترح بوهر عام 1913م سلسلة من الفرضيات، تناقض تماماً الرؤية الكلاسيكية. و إستطاعت أن تفسر ظاهرة الإنبعاث الطيفي و نجحت في إختبار الإستقرارية. إقترح بوهر التالي:

1. تتحرك الإلكترونات حول النواة في مدارات دائرية محددة بدون أن تشع، لأن هذه المدارات ليست مستمرة، بل عبارة عن حالات إرتباط متقطعة discrete عن بعضها البعض.

2. حالات الإرتباط المتقطعة المسموح بها هي التي تكون مجموع عزومها الزاوية على المدار تساوي مضاعفات صحيحة من ثابت بلانك. أو

$$\int_0^{2\pi} L d\theta = nh; \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{1.35}$$

هنا n تسمى العدد الكمي الأساسي. في حالة المدارات الدائرية، فإن العزم الزاوي المداري L لايعتمد على الزاوية القطبية θ، حيث أن $L = rp = mvr$، إذاً العزم المداري يصبح

$$\int_0^{2\pi} L d\theta = L \int_0^{2\pi} d\theta = L(2\pi) = nh.$$

لهذا فإن شرط حالات الإرتباط المتقطعة المسموح به للمدارات الدائرية هي التي تستوفي عزومها المدارية الشرط التالي

$$L = mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar, \tag{1.36}$$

حيث أن $\hbar = h/2\pi$، وتسمى ثابت بلانك المختزل reduced Planck constant، و التي سنكتفي بإعتبارها لاحقاً بثابت بلانك.

3. الإلكترون يستطيع أن ينتقل على شكل قفزات متقطعة من مدار إبتدائي مسموح به له طاقة E_i إلى مدار نهائي آخر مسموح به له طاقة E_f، و فرق الطاقة يظهر على شكل إشعاع تردده ν يعطى من

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}. \tag{1.37}$$

إذا كانت $E_f < E_i$، فإن الذرة تشع الأشعة الكهرومغناطيسية، بينما إذا كانت $E_f > E_i$، فإن هذا الإنتقال لايتم إلا إذا إمتصت الذرة الإشعاع.

هذه الفرضيات بسيطة و تعطي ذرة مستقرة. للحصول على الكميات الفيزيائية التي تتنبأ بها هذه الفرضيات، يمكن إستخدام قانون نيوتن الثاني، $\sum_i F_i = ma$. هنا القوى التي تعمل على الإلكترون (شحنته e-) هي قوى كولوم بفعل النواة (شحنتها $+Ze$). وبالتالي التسارع هو فقط التسارع المركزي. أي أن

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r},$$

منها يمكن أن نوجد علاقة نصف قطر المدار الذي له العدد الكمي n كالتالي

$$r_n = n^2\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{mZe^2} = n^2\frac{\hbar c}{Z\alpha mc^2} = n^2 r_1, \tag{1.38}$$

حيث أن α هو ثابت التركيب الدقيق hyperfine structure constant يُعْطى بـ

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036}. \tag{1.39}$$

الثوابت التالية تظهر دائماً للأنظمة تحت الذرية، مثل

$$\hbar c = 3.16153 \times 10^{-26}\,\mathrm{J.m} = 1973.3\,\mathrm{eV.\AA} = 197.33\,\mathrm{MeV.fm}, \tag{1.40}$$

و الثابت

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 2.30708 \times 10^{-28}\,\mathrm{J.m} = 14.4\,\mathrm{eV.\AA} = 1.44\,\mathrm{MeV.fm}. \tag{1.41}$$

كذلك يمكن حساب سرعة الإلكترون في مدارات بوهر لنحصل على

$$v_n = \frac{1}{n}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} = \frac{Z\alpha c}{n}, \tag{1.42}$$

لننتهي إلى أهم علاقة، و هي علاقة طاقة المدار و التي تُعْطى من علاقة الطاقة الكلية

$$E = K + V(r) = \frac{1}{2}mv_n^2 + \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{-Ze^2}{r_n}\right).$$

بالتعويض من العلاقات (1.38) و (1.42) نحصل على

$$E_n = -\frac{m}{2n^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\right)^2 = -\frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{2n^2}. \tag{1.43}$$



شكل (1.24): رسم توضيحي لمستوى الطاقات لذرة الهيدروجين.

لذرة الهيدروجين ($Z = 1$) علاقة الطاقة أعلاه تصبح

$$E_n = \frac{-13.6\,\mathrm{eV}}{n^2}.$$

إن تكمية quantization العزم الزاوي المداري حسب العلاقة (1.36) أدى إلى تكمية الطاقة في العلاقة (1.43). إن معلومات تكمية الطاقة موضحة في الشكل (1.24). من الشكل، و بسبب الإشارة السالبة و التي تعني حالة الإرتباط، نجد أن أقل طاقة تحدث عند العدد الكمي الأصغر $n = 1$. عندما يزداد العدد الكمي n تصبح الطاقة أقل سالبية و تزداد قيمتها إلى أن تقترب من الصفر عندما تقترب n من المالانهاية. إن حالة أقل طاقة هي الأكثر إستقراراً لذرة الهيدروجين، لهذا يطلق عليها إسم الحالة الأرضية. لقد حققت نظرية بوهر ثلاث نجاحات رئيسة، نلخصها كالتالي:

1. إستطاعت هذه النظرية من التنبأ بدقة عالية بتردد و طاقة أطياف ذرة الهيدروجين ($Z = 1$) و الذرات المثيلة لذرة الهيدروجين hydrogen-like atoms مثل أيون الهيليوم He^+ ($Z = 2$). حيث يتبع من الفرضية رقم 3 و العلاقة (1.37) و علاقة الطاقة (1.43) أن تردد الإنبعاث الناتج من إنتقال الإلكترون من حالة إبتدائية طاقتها E_i إلى حالة نهائية طاقتها E_f يصبح

$$\nu = \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right),$$

و بالتالي فإن الطول الموجي للشعاع الطيفي

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar c}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right), \tag{1.44}$$

و التي تعطي نفس علاقة (1.34)، بل أن الثابت

$$\frac{\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar c} = 1.0973731 \times 10^7\,\mathrm{m}^{-1},$$

هو نفسه قيمة ثابت رايدبرج و بدقة عالية.

2. إن نظرية بوهر تحقق مبدأ التقابل correspondence principle و الذي ينص على أن النتائج الكلاسيكية يجب أن تكون مُتَضمْنة كحالة خاصة من النتائج الكمية و ذلك عند حدود الأعداد الكمية الكبيرة. أو بعبارة أخرى النتائج الكمية تؤول للنتائج الكلاسيكية عند حدود الأعداد الكمية الكبيرة (هنا عندما $n \to \infty$). لتوضيح هذه النقطة يمكن أن نقارن تردد إلكترون ينتقل من حالة $n+1$ إلى n، حيث أن n كبير جداً، بالتردد الكلاسيكي لإلكترون له عزوم زاوية كبيرة جداً (عزوم زاوية كلاسيكية). يمكن التعبير عن إلكترون بعزوم زاوية كبيرة بإلكترون مرتبط عند عدد كمي رئيسي n كبير جداً. من العلاقة (1.36) عندما تكون n كبيرة جداً فإن العزم الزاوي L يحقق $L \gg \hbar$ و بالتالي فإن L غير مكماة. لهذا فإن إلكترون يتحرك في مدار دائري بسرعة v سيشع أشعة لها تردد $\nu_{\rm cl}$ يعطى من العلاقة الكلاسيكية

$$\nu_{\rm cl} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z\alpha c}{n}\frac{Z\alpha mc^2}{2\pi n^2\hbar c} = \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{2\pi n^3\hbar}, \tag{1.45}$$

حيث عوضنا عن قيمة r بالعلاقة (1.38) و v بالعلاقة (1.42). بالمقابل، تردد الإشعاع الناتج عن الإنتقال من $n+1$ إلى n يُعْطى من العلاقة (1.44) ليصبح

$$\nu = \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right) = \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar}\frac{1}{n^2}\left[1 - \frac{1}{(1+\frac{1}{n})^2}\right].$$

الحد الثاني بين القوسين المربعين في أقصى الطرف الأيمن في المعادلة أعلاه يمكن أن يُفَك بإستخدام مفكوك ذو الحدين (لأننا إعتبرنا n كبيرة جداً و بالتالي $1/n$ صغيرة جداً) لنحصل على

$$\nu = \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar n^2}\left[1 - \left(1+\frac{1}{n}\right)^{-2}\right] \approx \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{4\pi\hbar n^2}\left[1 - \left(1 - 2\frac{1}{n} + \cdots\right)\right].$$

بعد التبسيط نحصل على

$$\nu \approx \frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{2\pi n^3\hbar}, \tag{1.46}$$

و هي نفس علاقة التردد الكلاسيكي (1.45). هذه نتيجة هامة جداً و تعني أن التردد المصاحب للإنتقال من $n+1$ إلى n يقابله تردد كلاسيكي رئيسي. بالمقابل الإشعاع المصاحب للإنتقال من $n+2$ إلى n لايوجد مايقابله من الترددات الكلاسيكية و بالتالي هذا الإنتقال لايحقق مبدأ التقابل، لهذا فإنه غير مسموح به للمدارات الدائرية. إذاً مبدأ التقابل فرض علينا قاعدة خيارات أو قاعدة إصطفاء selection rule للإنتقالات الكمية في نموذج بوهر.

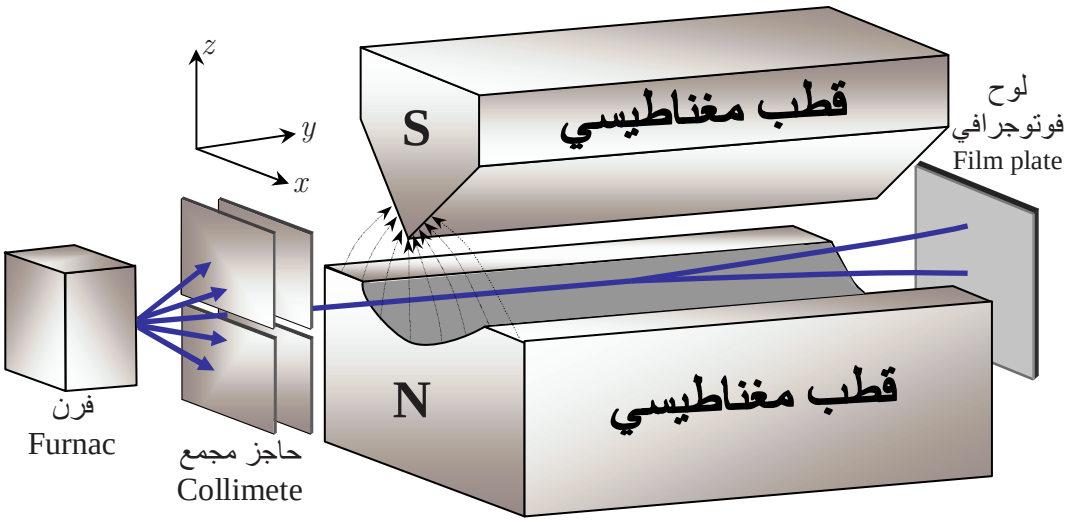
3. إن شرط تكمية العزم الزاوي المداري (1.36) ينطبق أيضاً في حالات أخرى. إن تطبيقه في المدارات البيضاوية يعطي صورة أكمل لطيف الذرات المماثلة للهيدروجين و قد تم إثباته عملياً بتجربة شتيرن و جيرلاخ Stern and Gerlach في عام 1922م. في هذه التجربة أُدخل شعاع من ذرات الفضة المتعادلة و المعروف بإمتلاكها لعزم ثنائي قطبية مغناطيسية magnetic dipole moment μ_L، إلى مجال مغناطيسي غير متجانس inhomogeneous magnetic field $\mathbf{B} = B_z\hat{\mathbf{k}}$، كما هو موضح في الشكل (1.25). إن طاقة جهد تفاعل المجال $\mathbf{B}$ مع متجه العزم $\boldsymbol{\mu}_L$ تُعطى من النظرية الكهرومغناطيسية كالتالي

$$V = -\boldsymbol{\mu}_L \cdot \mathbf{B}, \tag{1.47}$$

و بهذا فإن القوة التي تؤثر على الشعاع تُعطى من العلاقة

$$F = -\nabla V = \mu_{L_z}\frac{dB_z}{dz},$$

هذا يؤدي إلى تَرنُّحْ precess متجه العزم $\boldsymbol{\mu}_L$ حول محور z كرد فعل سريع بما فيه الكفاية بحيث أنه خلال الزمن اللازم للشعاع أن يمر عبر قطبي المغناطيس تختفي المركبات μ_{L_x} و μ_{L_y}. بما أن $\boldsymbol{\mu}_L$ تتناسب مع



شكل (1.25): أدوات تجربة شتيرن-جيرلاخ Stern-Gerlach حيث نستخدم فرن للحصول على بخار الفضة كمصدر للشعاع المتعادل يمر من خلال حاجز مجمع و من ثم إلى قطبين مغناطيسيين مدببي الأطراف كي نحصل على مجال مغناطيسي غير متجانس. ينتج عن ذلك إنقسام شعاع ذرات الفضة المتعادلة بفعل القوة الناتجة عن تفاعل المجال المغناطيسي مع عزم ثنائي القطبية المغناطيسية لذرات الفضة و التي تعتمد على العزم الزاوي للذرات. الشعاعين المنقسمين يُرْصَدا على لوح فوتوجرافي.

متجه العزم الزاوي لذرات الفضة $\mathbf{L}$ و التي تتراوح مقادير مساقطها على محور z، L_z، بين $-L$ و $+L$، فإنه بالتالي ستقوم القوة بإتجاه محور z بصرف الشعاع عن إتجاهه الأصلي المستقيم. لو كانت $\mathbf{L}$ مكماه فإن الأشعة المنحرفة ستتموضع عند نقاط متقطعة على طول محور z و التي تقابل القيم الممكنة لـ L_z على محور z . لقد وجد أن شعاع الفضة إنفلق إلى شعاعين منفصلين، كما هو موضح في الشكل (1.25). لاحقاً، عرفنا أن العزم الزاوي لذرة الفضة له عدد كمي يساوي $1/2$ و لدى تعرض شعاع من ذرات الفضة للمجال المغناطيسي فإن العزم الزاوي له مسقطين كميين على إتجاه المجال، $1/2$ و $-1/2$ مما يثبت أن العزوم الزاوية مكماة.

بالرغم من النجاحات السابقة لنظرية بوهر إلا إنها فشلت في تفسير العديد من الظواهر الطيفية الذرية. على سبيل المثال لم يستطيع نموذج بوهر من تفسير الإختلاف في شدة خطوط (لمعان) الطيف الذري. كذلك لم تفسر النظرية ظاهرة إنقسام خطوط الطيف تحت تأثير المجال المغناطيسي، فيما يُعْرَف بأثر زيمان Zeeman effect. كذلك نموذج بوهر بسيط يعمل فقط للذرات المثيلة للهيدروجين و لايمكن تطبيقه على الذرات المتعددة الإلكترونات.

1.9 أسئلة و تمارين

سؤال (1.7): من العلاقة (1.12)، إحسب كثافة الطاقة في فترة الطول الموجي $\Delta\lambda$. إستخدم هذه النتيجة لحساب قيمة $\lambda_{\max}$ و التي تعطي أعلى شدة. أثبت أن $\lambda_{\max}$ تتناسب عكسياً مع درجة الحرارة أي أن $\lambda_{\max} \propto 1/T$ و إحسب ثابت التناسب. و منها إحسب $\lambda_{\max}$ للإشعاع الشمسي إذا علمت أن درجة حرارة سطح الشمس 6000° K. (عند إيجاد ثابت التناسب ستحتاج إلى حل قيمة x في المعادلة $5 - x = 5e^{-x}$). ♢

سؤال (1.8): إذا سقطت أشعة فوق البنفسجية، طول موجتها 350 نانومتر على سطح من البوتاسيوم و وجد أن الطاقة القصوى للإلكترون الضوئي تساوي 1.6 eV، أوجد دالة الشغل للبوتاسيوم؟ ♢

سؤال (1.9): وجد أن الطاقة القصوى للإلكترون الضوئي من الألمنيوم تساوي 2.3 eV لشعاع طول موجته 200 نانومتر، و 0.90 eV لشعاع طول موجته 258 nm، من هذه البيانات إحسب ثابت بلانك و دالة الشغل للألمنيوم. ♢

سؤال (1.10): فوتون طاقته 100 MeV يصطدم ببروتون في حالة السكون. ماهي أعلى قيمة ممكنة لفقد الطاقة للفوتون؟ ♢

سؤال (1.11): فوتون طاقته 100 keV يصطدم بإلكترون في حالة السكون ليتشتت الفوتون بزاوية 90° . ما هي الطاقة بعد التصادم؟ و ماهي طاقة الإلكترون بعد التصادم بوحدة eV و ماهو إتجاه إرتداده؟ ♢

سؤال (1.12): شعاع من أشعة x يتشتت على إلكترونات في حالة السكون. ماهي طاقة أشعة x قبل التشتت إذا كان طول موجتها عند زاوية التشتت 60° هو 0.035 أنجستروم؟ ♢

سؤال (1.13): إفترض بلورة المسافة بين أسطحها 0.32 نانومتر. ماهو مقدار الطاقة اللازمة لـ (أ) إلكترونات، (ب) جسيمات ألفا، كي نلحظ أول ثلاث أهداب تداخل عظمى؟ ♢

سؤال (1.14): ماهي طاقة الإلكترون اللازمة في مجهر إلكتروني لتحليل مسافات في حدود (أ) 15 نانومتر، (ب) 0.5 نانومتر؟ ♢

سؤال (1.15): إذا فرضنا أن ذرة الهيدروجين عبارة عن حالة موجية موقوفة لإلكترون في مسار دائري بمضاعفات صحيحة للأطوال الموجية. إستنتج نتائج بوهر من هذا الفرض. ♢

سؤال (1.16): إذا أردنا قياس المسافة بين سطحين متتاليين في بلورة، و كشفنا عن أشعة x طول موجتها 0.5 أنجستروم عند زاوية 5°، ما هي هذه المسافة؟ ما هي زاوية القيمة العظمى الثانية؟ ♢

سؤال (1.17): إستخدم تكميات بوهر لحساب طاقة مستويات المتذبذب التوافقي، إذا كانت طاقته $p^2/2m + m\omega^2 r^2/2$، حيث أن القوة المرجعة هي $m\omega^2 r$. إعتبر المدارات دائرية و أستنتج صيغة مشابهه لصيغة رايدبرج (1.34). أثبت أن مبدأ التقابل ينطبق لكل قيم العدد الكمي n المستخدم في تكمية العزم الزاوي. ♢

سؤال (1.18): إعتبر الجهد التالي $V(r) = V_0 \left(\frac{r}{a}\right)^k$. إستخدم تكميات بوهر لحساب طاقة المستويات لهذا الجهد، مع إعتبار أن k كبيرة جداً. أرسم صيغة هذا الجهد و بين ان الطاقة تقارب $E_n \approx Cn^2$. ♢

2

أسس الميكانيكا الموجية و التمثيل الموجي للجسيم الحر
Wave mechanics for free particle

2.1 الحزم الموجية Wave packets

في الفصل السابق راجعنا بعض التجارب الأساسية التي أجريت في بدايات القرن العشرين و التي فشلت الفيزياء الكلاسيكية من تفسيرها. عندها بدأ العلماء بمراجعة تصوراتهم لتصرف المادة و للطبيعة الموجية. فقد تم تفسير طيف إشعاع الجسم الأسود و الظاهرة الكهروضوئية و أثر كومبتون بناء على إعتبار الضوء يتكون من كمات (جسيمات). بالمقابل أثبتت تجربة دافيسون-جرامر مبدأ دبرولي و أعتبر أن للجسيمات طبيعة موجية. هذا حدا العلماء للتساؤل: هل يوجد للجسيمات معادلة موجية؟ وإن وجد ماذا تعني سعاتها و ماهي المعلومات التي تحويها؟

للإجابة على هذه التساؤلات نراجع الأسس التي بنيت عليها الميكانيكا الموجية و نقوم بإيجاد تعميم يشمل الجسيمات. نتذكر ان المعادلة الموجية لموجة تنتشر في الفضاء بسرعة مقدارها v تعطى

$$\nabla^2 f = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}. \tag{2.1}$$

لموجة مستوية تنتشر في إتجاه x الموجب، فإن الحل العام لهذه المعادلة هو

$$f(x,t) = g_k e^{i(kx-\omega t)}, \tag{2.2}$$

حيث ω هو تردد الموجة، k عددها الموجي، و g_k سعتها. هذا الحل البسيط يسمى الموجة المستوية plane wave و حيث أن سرعة الإنتشار تعطى بـ $v = \omega/k$ وتعرف أيضاً بسرعة الطور phase velocity. إذا كانت الموجة تنتشر في الإتجاه السالب و الموجب لـ x، فإننا نكتب الحل بالشكل

$$f(x,t) = g_k e^{i(kx-\omega t)} + g'_k e^{i(kx+\omega t)}. \tag{2.3}$$

في حالة تكون حزمة موجية محلية localized wave packet عن طريق تراكب عدة موجات ذات ترددات مختلفة كما ينص مبدأ التراكب الخطي linear superposition، فإن الحزمة يعبر عنها بالمجموع الخطي للموجات الجزئية، أي أن

$$f(x,t) = \sum_n g_{k_n} e^{i(k_n x-\omega(k_n)t)}, \tag{2.4}$$

حيث ω هي دالة لـ k_n. أحد الأمثلة على الحزم الموجية إنتشار الضوء، حيث أن مركبتيه الكهربائية و المغناطيسية تتبعان المعادلة الموجية (2.1) أي أن

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}; \qquad \nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2}, \tag{2.5}$$

و الحل العام لموجة كهرومغناطيسية مستوية، وحيدة اللون، تنتشر بإتجاه **k**، و مستقطبة بالإتجاه **n** تعطى كالتالي

$$\mathbf{E} = E_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\mathbf{n}; \qquad \mathbf{B} = B_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}(\mathbf{n}\times\mathbf{k}), \tag{2.6}$$

حيث $B_0 = E_0/c$ و كذلك $c = \omega/k$. الضوء يتصرف كموجات حيث يتراكب ليصنع حزم موجية. كما أثبتت التجارب أن الضوء كذلك يتصرف كجسيمات. بالمقابل –وحسب مبدأ ديبرولي- فإن الجسيمات تتصرف كموجات مثل الضوء تماماً، غير أنها لا تنتشر بسرعة الضوء لأن الجسيمات لها كتل. لهذا بدأ العلماء البحث عن المعادلة الموجية للجسيمات و التي ستكون سعتها (أو حلها) تحوي جميع المعلومات الديناميكية عن الجسيم. لأحظ أن المعادلة الموجية الجسيمية يجب أن تكون خطية، أي أنه إذا وجد لهذه المعادلة أكثر من حل مستقل، فإن المجموع الخطي للحلول أيضاً حل وذلك لتحقيق شرط التراكب الخطي، و هو مبدأ أساسي من مباديء الفيزياء.

عند تراكب عدد كبير من الموجات الضوئية المستوية لتكوين حزمة، فإن المجموع $\sum_n$ في المعادلة (2.4) يمكن أن يُستَعاض عنها بالتكامل، لنحصل على

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk, \tag{2.7}$$

حيث أضيف الثابت $1/\sqrt{2\pi}$ من أجل التناظر عند تطبيق تحويلات فوريير. بالمقابل تحويل فوريير يعطي قيمة $g(k)$ كالتالي

$$g(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-i(kx-\omega t)}dx. \tag{2.8}$$

التحويل هنا تم أولاً بكتابة الدالة على الشكل المستقل عن الزمن $f(x) = f(x,0)$ و نضرب بعد ذلك بـ $e^{-ik'x}$ ثم نكامل الطرفين بالنسبة لـ x حيث نحصل على تمثيل لدالة ديراك دلتا و بالتالي نحصل على $g(k)$ بمعلومية $f(x)$. للحصول على الدالة المعتمدة على الزمن $g(k,t)$ نضرب الطرف الأيمن بـ $e^{i\omega t}$.

سؤال (2.1): بإستخدام تحويلات فوريير أثبت العلاقة (2.8) من العلاقة (2.7)؟ ♢

في المعادلة (2.7)، لو أعتبرنا $g(k) = k$ فإننا نحصل على

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} ke^{i(kx-\omega t)}dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{i(kx-\omega t)}dk.$$

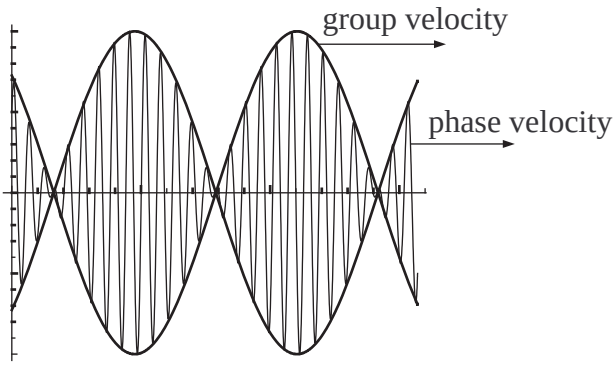
نجد أن قيمة k يمكن التعويض عنها بالمؤثر التفاضلي $-i\partial/\partial x$ في فضاء الأحداثيات $x-$space. بالمقابل و في المعادلة (2.8)، لو أعتبرنا $f(x) = x$ فإننا نحصل على

$$g(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-i(kx-\omega t)}dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(i\frac{\partial}{\partial k}\right)e^{-i(kx-\omega t)}dx.$$

إذًا قيمة المتغير x تظهر في فضاء k كمؤثر تفاضلي $i\partial/\partial k$. السؤال الآن هو كيف تنتشر هذه الحزمة الموجية و التي تعطى سعتها بـ $f(x,t)$؟ الجواب يحتم علينا أولاً معرفة $g(k)$ ثم دراسة إنتشار كل موجة جزئية على حدة. السرعة الطورية لكل موجة جزئية i تساوي $v_i = \omega_i/k_i$. لكن سرعة الحزمة تختلف حيث أنها تمثل سرعة المجموعة v_g group velocity.

في حالة الموجات عديمة التفرق non-dispersive waves و التي تتبع المعادلة الموجية (2.1)، مثل الموجات الكهرومغناطيسية المنتشرة في الفراغ، فإن سرعة المجموعة هي نفسها سرعة الطور لأن سرعات الموجات الجزئية متساوية و ثابتة حيث تنتشر جميعها بسرعة الضوء c. و عليه فإن $\omega = kc$. لتصبح معادلة (2.7) للحزم الضوئية كالتالي

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{ik(x-ct)}dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{ikx'}dk = f(x',0),$$



شكل (2.1): سرعة الطور (phase velocity) و سرعة المجموعة (group velocity).

حيث $x' = x - ct$. هذا يمثل موجة تنتشر من نقطة ليست نقطة الأصل $x = 0$ بل من النقطة $x = ct$. لهذا فإن الحزمة الكهرومغناطيسية تنتشر في الفراغ بدون أية تشوهات بسرعة مجموعة و سرعة طور متساوية و مقدارها c. هذا يحدث فقط إذا كانت سرعة الموجات الجزئية متساوية و ثابتة.

لكن الموجة التي تصف الجسيم لايمكن أن تصل إلى سرعة الضوء لأن الجسيم له كتلة. لذلك لايمكن أن نتطلب من سرعة الحزمة أن تساوي سرعة الطور لحزمة الموجات الجزئية. نطلق على هذا النوع من الموجات إسم الموجات المتفرقة dispersive waves لأن الحزمة تتغير في الشكل إثناء الإنتشار بسبب تفرق الموجات الجزئية بالسرعات. في هذه الحالة ستصبح ω دالة لـ k. لكن لانعلم عموماً شكل الدالة $\omega(k)$ و لا يوجد كذلك صيغة عامة للدالة $g(k)$. إذاً نحن أمام عدة تساؤلات: ماهي السرعة للحزمة و التي تمثل سرعة الجسيم الكلاسيكية؟ و كيف يمكن حساب و تحديد المقادير $\omega(k)$ و $g(k)$؟

للإجابة على التساؤلات أعلاه يجب علينا أن نفرض حالات خاصة. لنأخذ إذاً أبسط حالة: جسيم كلاسيكي حر. يعبر عن طاقة الجسيم الحر كلاسيكياً بـ $E = p^2/2m$ إذا كان حركته غير نسبية و بـ

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

إذا كان الديناميكا نسبية. من معادلة هاميلتون-جاكوبي يمكننا حساب سرعة الجسيم v_p الكلاسيكية particle's classical velocity كالتالي

$$v_p = \frac{dE}{dp}, \tag{2.9}$$

و عليه فإن سرعة الجسيم الحر الكلاسيكية غير النسبية تصبح

$$v_p = \frac{p}{m}. \tag{2.10}$$

النتيجة الكلاسيكية غير النسبية (2.10) تتفق مع صيغة نيوتن لكمية الحركة $p = mv_p$. أما لو كانت سرعة الجسيم الحر نسبية، فإنه يمكن أن تُحْسَب من علاقة (2.9) لنحصل على علاقة سرعة الجسيم النسبية

$$v_p = \frac{pc^2}{E}. \tag{2.11}$$

مرة أخرى يمكن إختبار النتيجة النسبية (2.11) إذا علمنا أن $p = \gamma m v_p$ و $E = \gamma mc^2$، حيث أن

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (v_p/c)^2}},$$

لنجد أن

$$\frac{pc^2}{E} = \frac{\gamma m v_p c^2}{\gamma m c^2} = v_p.$$

لو وظفنا تكمية بلانك و علاقة دبرولي لحزمة ترددها الزاوي $\omega = 2\pi\nu$ و عددها الموجي $k = 2\pi/\lambda$ لنحصل على طاقة و كمية حركة هذه الحزمة كالتالي $E = h\nu = \hbar\omega$ و $p = h/\lambda = \hbar k$، على الترتيب. نستطيع منها إذاً إيجاد سرعة الطور phase velocity للحزمة التي تصف الجسيم الحر

$$v = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p}. \tag{2.12}$$

للجسيم الحر غير النسبي، فإن سرعة الطور في العلاقة (2.12) تصبح

$$v = \frac{E}{p} = \frac{p^2/2m}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2}v_p,$$

و التي تعني أن الجسيم الحر عند السرعات غير النسبية سرعة طور الحزمة له أقل بـ 50% من سرعته الكلاسيكية. الأمر أسوء في حالة الجسيم الحر النسبي، لأن سرعة طور حزمته في هذه الحالة تصبح

$$v = \frac{E}{p} = \frac{\gamma m c^2}{\gamma m v_p} = \frac{c^2}{v_p} > c,$$

و الذي يعني أن سرعة الطور أعلى من سرعة الضوء! هذا يناقض بالطبع المسلمة الأولي للنسبية الخاصة. هذا التناقض بين سرعة الطور v و السرعة الكلاسيكية للجسيم v_p يتفق مع النقاش أعلاه بأن سرعة الطور لاتمثل سرعة الجسيم و لاتحمل أي معنى فيزيائي صحيح. علينا إذاً البحث عن تعبير مناسب لسرعة المجموعة للحزمة الموجية لتمثل سرعة الجسيم الكلاسيكية.

في البداية يجب إيجاد تعبير مناسب للدالتين $\omega(k)$ و $g(k)$ من متطلبات السعة $f(x,t)$ و الشروط الديناميكية و التي تنطبق على ميكانيكية الجسيم الكلاسيكي الحر. لهذا سنختار حزمة $g(k)$ محلية جدا very localized في فضاء k بحيث تكون متمركزة حول قيمة ثابتة k_0. بطبيعة الحال هذا لايعني أن السعة $f(x,t)$ متمركزة في فضاء الأحداثيات $x-$space.

سؤال (2.2): لماذا أعتبرنا أن الحزمة في فضاء k و التي تصف جسيم كلاسيكي حر محلية جداً و متمركزة حول قيمة ثابتة؟ $\diamondsuit$

إن أبسط تمثيل لحزمة متمركزة حول قيمة ثابتة k_0 في فضاء k هي الدالة الجاوسية

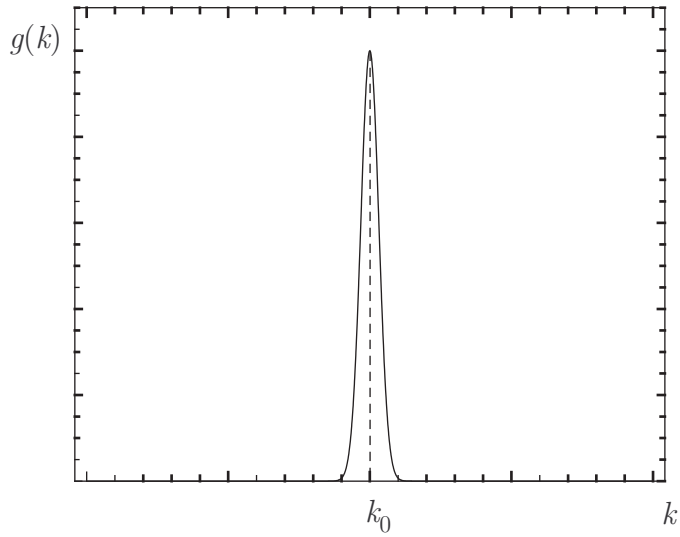
$$g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}, \tag{2.13}$$

حيث α حقيقية و كبيرة جداً. كلما زادت قيمة α زاد تمركز $g(k)$ حول k_0. يمكننا إستخدام مفكوك تايلور Taylor expansion لإيجاد تعبير تقريبي لـ $\omega(k)$ حول النقطة $k = k_0$، حيث نحصل على

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + (k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} + \ldots, \tag{2.14}$$

بسبب التمركز حول k_0 أهملنا الحدود من الرتبة الثالثة و ما فوق. بالتعويض عن $\omega(k)$ في المعادلة (2.7) و إستخدام التمثيل (2.13) نحصل على

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{i\left[kx - \left(\omega(k_0)+(k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} + \ldots\right)t\right]} dk.$$



شكل (2.2): الحزمة الموجية المحلية و المتمركزة حول قيمة ثابتة في فضاء k.

لو ضربنا المعادلة أعلاه بـ e^{ik_0x} و e^{-ik_0x} نحصل على

$$f(x,t)=\frac{e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha(k-k_0)^2}e^{i\left\{(k-k_0)x-\left[(k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}+\frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}+...\right]t\right\}}dk.$$

نأخذ $k'=k-k_0$، لاحظ أن $dk'=dk$، بالتعويض في المعادلة أعلاه نحصل على

$$f(x,t)=\frac{e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha k'^2}e^{i\left[k'x-k'\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t-\frac{1}{2}k'^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}t-...\right]}dk'.$$

بالترتيب نحصل على

$$f(x,t)\approx\frac{e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha k'^2}e^{ik'\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t\right]}e^{-\frac{i}{2}\left[k'^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}t\right]}dk'.$$

المعامل $e^{ik'\left[x-(d\omega/dk)_{k_0}t\right]}$ يطابق المعامل $e^{ik'(x-vt)}$. بالمقابل فإن المعامل $e^{-\frac{i}{2}\left[k'^2\left(d^2\omega/dk^2\right)_{k_0}t\right]}$ يمثل قيمة الطور أو إزاحة الطور. بناء على هذا نعرف سرعة الحزمة أو مايسمى سرعة المجموعة كالتالي

$$v_g=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}, \tag{2.15}$$

كذلك نعرف المعامل β كالتالي

$$\beta=\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}, \tag{2.16}$$

لنحصل على

$$f(x,t)\approx\frac{e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik'(x-v_gt)}e^{-(\alpha+i\beta t)k'^2}dk', \tag{2.17}$$

أو يمكن أن يكتب بالشكل

$$f(x,t) \approx \frac{e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y(k',t)e^{ik'(x-v_gt)}dk' = e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}f(x-v_gt,0),$$

حيث إعتبرنا أن

$$y(k',t) = e^{-(\alpha+i\beta t)k'^2} = g(k')e^{-i\beta tk'^2},$$

أي أنها دالة جاوسية تكافئ $g(k)$ مضروبة بقيمة معامل الطور $e^{-i\beta tk'^2}$ مما يجعل عرضها مركب و متذبذب مع الزمن بتردد زاوي مقداره $\beta k'^2$. لكن تغير عرض دالة سعة العدد الموجي $y(k',t)$ مع الزمن لايعني تغير الدقة في قياس العدد الموجي، لأن هذه الدقة تعتمد على عرض دالة التوزيع للشدة $|y(k',t)|^2$، و الذي بدوره يبقى ثابتاً بدون تغير و ذلك لأن

$$|y(k',t)|^2 = y^*(k',t)y(k',t) = e^{-2\alpha k'^2} = |g(k)|^2.$$

بعبارة أخرى كلما تقدم الزمن و إنتشر الجسيم الحر في الفضاء (وبالتالي نفقد معلومات عن موقعه) فإن الدقة بالنسبة لعدده الموجي و بالتالي كمية حركته، و التي يُعَبر عنها بعرض الدالة الجاوسية $|y(k',t)|^2$ لاتتغير مع الزمن. من الواضح أيضاً أن $y(k',0) = g(k')$. كذلك نلاحظ أن $\lim_{\beta\to 0} y(k') = g(k)$. إن إعتبار β صغيرة هام جداً لحل التكامل أعلاه. مرة أخرى نؤكد من مبدأ دبرولي، بأن كمية الحركة ترتبط بالعدد الموجي من خلال العلاقة $p = \hbar k$.

كذلك هو الحال في دالة سعة الجسيم $f(x,t)$، فبغض النظر عن معامل الطور $e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}$ في (2.17) و الذي لن يغير قيمة شدة الحزمة حيث أن

$$|f(x,t)|^2 = |f(x-v_gt,0)|^2,$$

فإن الحزمة الموجية تنتقل بسرعة المجموعة v_g و ليس بسرعة الطور. لاحقاً سنقوم بالتأكد من أن سرعة المجموعة تمثل سرعة الجسيم الكلاسيكية. لكن أولاً نريد حساب قيمة التكامل في (2.17) للحصول على تعبير رياضي لسعة الحزمة $f(x,t)$.

إن قيمة التكامل يمكن حسابها بشرط أن $\alpha > \beta t$ لنحصل على

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'(x-v_gt)}e^{-(\alpha+i\beta t)k'^2}dk' = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha+i\beta t}}e^{\frac{-(x-v_gt)^2}{4(\alpha+i\beta t)}},$$

و التي ستعطي دالة سعة جاوسية عرضها $\sqrt{2(\alpha+i\beta t)}$. لاحظ إننا إشترطنا مسبقاً أن α كبيرة جداً كي نحصل على حزمة متمركزة. سعة الحزمة تصبح إذاً

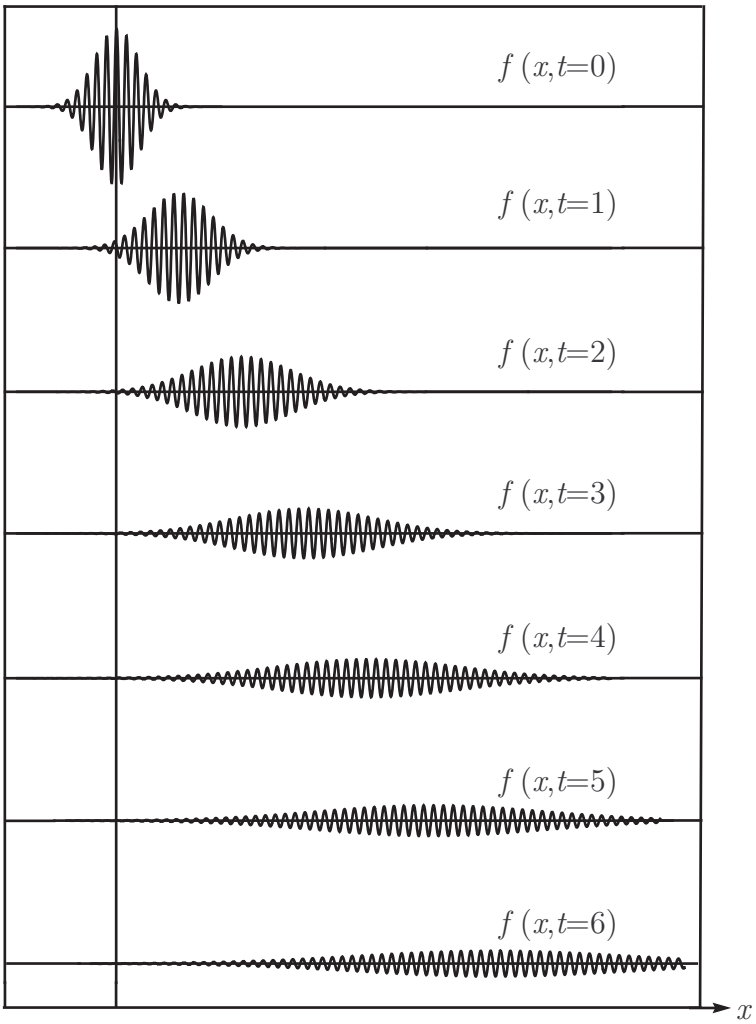
$$f(x,t) \approx \frac{1}{\sqrt{2(\alpha+i\beta t)}}e^{\frac{-(x-v_gt)^2}{4(\alpha+i\beta t)}}e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}, \tag{2.18}$$

والتي تمثل حزمة متمركزة و لكن في فضاء x لموجة مستوية ترددها $\omega(k_0)$ و تنتشر بسرعة v_g. لاحظ الإعتماد الصريح للسعة على الزمن و الإحداثيات و إحتوائها على قيم تخيلية. شكل (2.3) يُظْهر إنتشار الحزمة في بعد واحد بإتجاه x الموجب عند أزمنة متعاقبة كما تبين المعادلة (2.18). لدراسة ديناميكية الحزمة و معرفة تغيرها مع الزمن، نحتاج إلى حساب القيمة الحقيقية لسعة الحزمة $|f(x,t)|^2$ و التي تُعْطى من

$$|f(x,t)|^2 = f(x,t)f^*(x,t),$$

لنحصل على

$$|f(x,t)|^2 \approx \left[\frac{1}{\sqrt{2(\alpha+i\beta t)}}e^{\frac{-(x-v_gt)^2}{4(\alpha+i\beta t)}}e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2(\alpha-i\beta t)}}e^{\frac{-(x-v_gt)^2}{4(\alpha-i\beta t)}}e^{-i[k_0x-\omega(k_0)t]}\right].$$



شكل (2.3): إنتشار و إنتقال الحزمة الموجية في المعادلة (2.18) في الفضاء. لاحظ إزدياد عرض الحزمة و إنخفاض السعة مع إزدياد الزمن أثناء إنتقالها في بعد واحد بإتجاه x الموجب. الزمن يزداد من أعلى إلى أسفل.

المقدار $|f(x,t)|^2$ مربع السعة يمثل توزيع الشدة للحزمة الموجية. لاحظ أن مقدار جمع الأسس الناتج عن ضرب الأساس يصبح

$$\frac{-(x-v_gt)^2}{4(\alpha+i\beta t)}+\frac{-(x-v_gt)^2}{4(\alpha-i\beta t)}=\frac{-(x-v_gt)^2}{4}\left(\frac{1}{\alpha+i\beta t}+\frac{1}{\alpha-i\beta t}\right)=\frac{-\alpha(x-v_gt)^2}{2(\alpha^2+\beta^2t^2)},$$

لننتهي عند توزيع شدة الحزمة يُعْطى كالتالي

$$|f(x,t)|^2\approx\frac{1}{2\sqrt{(\alpha^2+\beta^2t^2)}}e^{\frac{-\alpha(x-v_gt)^2}{2(\alpha^2+\beta^2t^2)}}. \tag{2.19}$$

من الجدير بالملاحظة أن عرض شدة الحزمة يتغير مع الزمن. بمقارنة شدة الحزمة مع الشكل العياري لدالة جاوس، و الذي يُعْطى من

$$e^{-(x-\langle x\rangle)^2/2\sigma^2},$$

حيث أن $\langle x\rangle$ تمثل متوسط قيمة التوزيع، و σ هنا تمثل الإنحراف المعياري standard deviation أو التفاوت، تُعَرف جبرياً بالعلاقة التالية

$$\sigma=\Delta x\equiv\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}, \tag{2.20}$$

و هندسياً يتناسب مع عرض دالة التوزيع. نجد إذاً أن عرض توزيع شدة الحزمة Δx في العلاقة (2.19) يُعْطى كالتالي

$$\Delta x=\sqrt{\frac{\alpha^2+\beta^2t^2}{\alpha}}=\sqrt{\alpha}\left[1+\left(\frac{\beta t}{\alpha}\right)^2\right]^{1/2}. \tag{2.21}$$

من الواضح أنه كلما زاد الزمن t زاد عرض توزيع شدة الحزم Δx و بالتالي يحدث توزيع الإنتشار spreading للحزمة. إن معدل إنتشار الحزمة سيكون أصغر إذا كانت α أكبر. كذلك الشدة في المعادلة (2.19) تنخفض مع الزمن بسبب إعتماد الشدة على المعامل $(\alpha^2+\beta^2t^2)^{-1/2}$. إزدياد عرض شدة الحزمة و إنخفاض الشدة مع الزمن موضح في شكل (2.4).

سؤال (2.3): لماذا تظهر شدة الحزمة في شكل (2.4) جاوسية بينما سعة الحزمة في شكل (2.3) متذبذبة و متخامدة؟ ♢

يمكن بنفس الطريقة إيجاد عرض شدة الحزمة في فضاء k و ذلك بحساب $|g(k)|^2$ و التي نجد أنها

$$|g(k)|^2=e^{-2\alpha(k-k_0)^2},$$

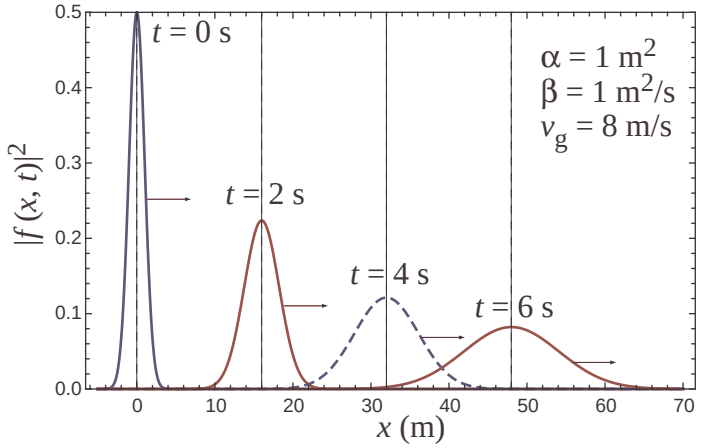
لدى مقارنتها مع الشكل العياري لدالة جاوس نجد عرض شدة الحزمة في فضاء k و الذي يرمز له بالرمز Δk يصبح

$$\Delta k=\frac{1}{2\sqrt{\alpha}}. \tag{2.22}$$

سؤال (2.4): وضح السبب في أن عرض $|g(k)|^2$ للجسيم الكلاسيكي الحر ثابتة و لا تتغير مع الزمن؟ ♢

إن حاصل الضرب $\Delta x\Delta k$ و الذي يمثل الإنحراف أو عدم الدقة في حساب x و k يمكن حسابه مباشرة لنحصل على

$$\Delta x\Delta k=\frac{1}{2}\left[1+\left(\frac{\beta t}{\alpha}\right)^2\right]^{1/2}. \tag{2.23}$$



شكل (2.4): تغير عرض وسعة شدة الحزمة الموجية كدالة لـ x عند أزمنة مختلفة (0 ثانية إلى 6 ثوان) لحزمة تتحرك بإتجاه $+x$ إبتداءً من نقطة الأصل و بسرعة مجموعة مقدارها 8 م/ث.

أو بشكل عام

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}, \tag{2.24}$$

حيث أن المساواة تحدث فقط عندما $t = 0$.

نعود الآن إلى قضية السرعة. بإستخدام علاقة بلانك $E = \hbar\omega$ و علاقة دبرولي $p = \hbar k$ في علاقة سرعة المجموعة (2.15)، نجد أن سرعة المجموعة تُعْطِي

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = v_p, \tag{2.25}$$

هي نفسها سرعة الجسيم الكلاسيكية.

سؤال (2.5): أحد تمثيلات دالة ديراك هو نفس توزيع جاوس عندما يؤول عرض التوزيع إلى الصفر أي أن

$$\delta(k - k_0) = \lim_{\sigma \to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(k-k_0)^2/2\sigma^2}$$

و بالتالي تمثيل ديراك للحزمة $g(k)$ يعني تحديد قيم k بدقة. ماهي قيمة سعة الحزمة $f(x,t)$ فيما لو كانت $g(k) = \delta(k - k_0)$ و ماهو المعنى الفيزيائي لدى إختيارنا دالة ديراك للتعبير عن الحزمة $g(k)$؟ $\diamondsuit$

2.2 مبدأ عدم اليقين The uncertainty principle

عوضاً عن حزمة موجية تتوزع مع الزمن، لها عدد موجي k و تردد ω و سرعة مجموعة $d\omega/dk$، فإنه من المناسب التعبير عن الجسيم الكلاسيكي الحر بحزمة موجية تتوزع بكمية حركة p و طاقة E و بسرعة مجموعة dE/dp. لو عبرنا عن سعة الحزمة الموجية للجسيم في فضاء الإحداثيات $x-$space بالدالة $\psi(x,t)$ و في فضاء كمية الحركة $p-$space بالدالة $\phi(p)$، فإن معادلة الحزمة تصبح

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) e^{i(px-Et)/\hbar} dp, \tag{2.26}$$

على إعتبار أن $p = \hbar k$ و $E = \hbar\omega$. بإستخدام تحويل فوريير يمكننا إثبات أن

$$\phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i(px-Et)/\hbar} dx. \tag{2.27}$$

كذلك بإستخدام قاعدة دبرولي يمكننا أن نُعَمم العلاقة (2.24) لتصبح

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{2.28}$$

و التي تنص على أنه لايمكن أن توجد تجربة أو طريقة قياس تستطيع قياس كمية حركة جسيم حر و إحداثيه معاً بدقة مطلقة. هذا يسمى مبدأ هايزنبرج Heisenberg principle و يتضح أنه كلما تقدم الزمن أزداد الخطأ في القياس. إن صغر قيمة $\hbar$ مقارنة مع الأبعاد الماكروسكوبية أو فوق المجهرية، تؤكد أن هذا المبدأ لايمكن أن يُلاحظ إلا على النظم الميكروسكوبية (المجهرية) فقط، حيث تفشل الفيزياء الكلاسيكية.

فعلى سبيل المثال لمعرفة إحداثي موقع إلكترون حر يجب إرسال سيل من الفوتونات لتسقط عليه و ليتشتت فوتوناً واحداً على هذا الإلكترون الحر بزاوية و إتجاه يعلمنا –بعد كشفه- عن المنطقة التي كان يتواجد فيها هذا الإلكترون. بالإضافة إلى ذلك فإن إنعكاسية الفوتون إلى الكاشف لاتعني إنها حدثت من على جسم أو مادة الإلكترون نفسه، بل قد تكون حدثت من على مساحة محيطة بجسم الإلكترون، تُسمى محيط التفاعل و يعبر عنها بما يسمى بالمقطع العرضي للتفاعل. لذلك فإن الموقع المادي للإلكترون لايمكن تحديده بدقة. كل مايمكن تحديده هو حجم أو حيز يُمكن أن يتواجد فيه الإلكترون بإحتمالية كبيرة نسبياً و ذلك قبل حدوث الإنعكاس من على محيطه. بالمقابل، هذا الفوتون سيخسر جزء من كمية حركته بعد التشتت إلى الإلكترون الحر مغيراً كمية حركته الأصلية و التي لم تكن محددة في الأصل. إن هذا المبدأ ينطبق بشكل أكبر أيضاً على الجسيمات غير الحرة و التي تكون تحت تأثير جهود و بالتالي قوى تغير كمية الحركة مع الزمن.

يمكن تمديد مبدأ هايزنبرج ليشمل الطاقة و الزمن للجسيم الحر. نعلم أن $E = p^2/2m$ و بالتالي فإن

$$\Delta E = \frac{p}{m}\Delta p \quad \Rightarrow \quad \Delta p = \frac{m}{p}\Delta E.$$

بما أن الجسيم حر، فإن سرعته منتظمة. لذلك فإن p/m ثابتة و لهذا من قوانين الحركة للجسيم الحر نستنتج أن

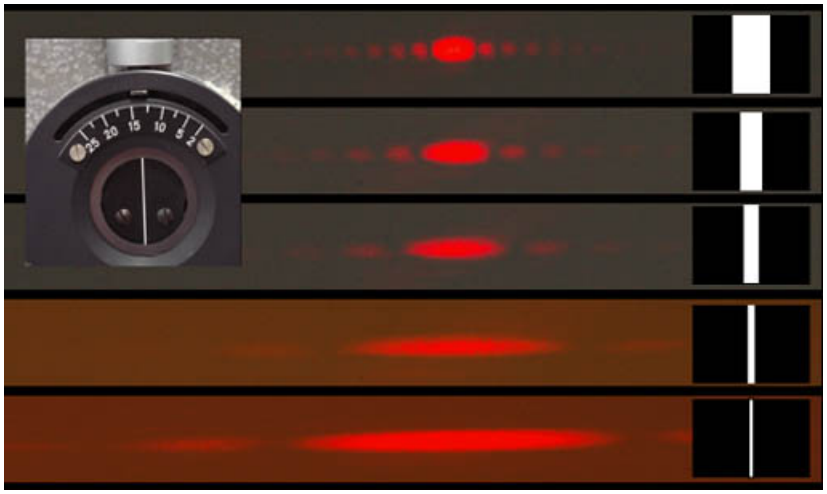
$$\Delta x = v\Delta t = \frac{p}{m}\Delta t.$$

بالتعويض في العلاقة (2.28) نحصل على

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{2.29}$$

و التي تعني أن أي تغير في الطاقة لابد ان يحدث خلال فترة زمنية بحيث أن حاصل ضرب تغير الطاقة مع الزمن أكبر من المقدار $\hbar/2$. بمعنى آخر الزمن لايتوقف بل يوجد قيمة دنيا للزمن يحتاجها النظام ليغير فيها النظام طاقته. علاقة (2.29) لاتنطبق فقط على الجسيم الحر بل تشمل جميع الأنظمة الميكروسكوبية و يمكن إثباتها بشكل عام بإستخدام النسبية الخاصة.

إن طبيعة الإزدواجية الجسيمية-الموجية لاتزال أيضاً متحققة في مبدأ عدم التحديد لهايزنبرج. هذا المبدا يظهر جلياً في الطبيعة الموجية في مايُعْرف بظاهرة الحيود. فعلى سبيل المثال لو أخذنا الحيود من على شق منفرد single-slit diffraction أو مايعرف بحيود فرانهوفر Fraunhofer diffraction، نجد أن المسافة بين مركزي هدبين (مضيئين أو معتمين) يتناسب عكسياً مع عرض الشق w. هذا يعني أنه كلما صغر عرض الشق زاد عرض الأهداب على الشاشة. هذا موضح في الشكل (2.5) و الذي يوضح كيفية الزيادة في عرض الهدب المركزي central

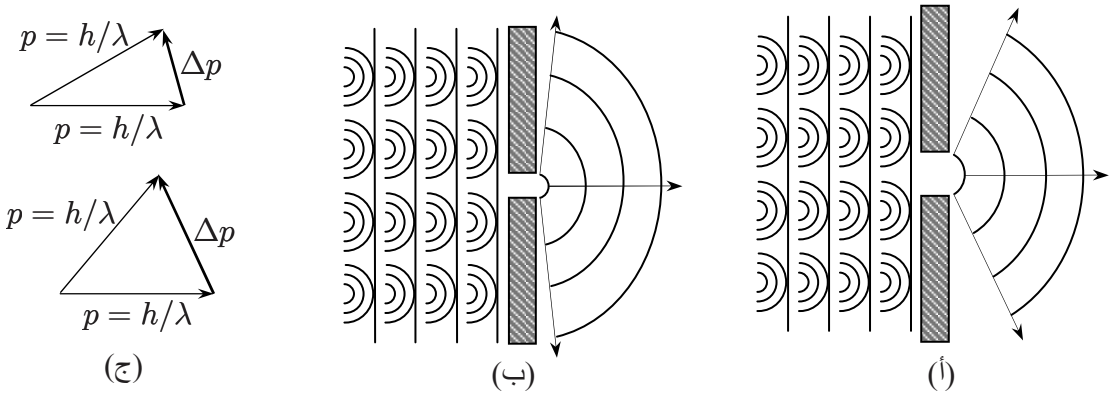


شكل (2.5): أنماط الحيود لليزر الهيليوم-نيون من على شق منفرد عرضه متغير بواسطة ميكرومتر. صور عرض الشق موضحة على يمين الصورة. حسب تقريب الزاوية الصغيرة فإن عرض النمط يتناسب عكسياً مع عرض الشق. المصدر "http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/phyopt/fraungeo.html".

fringe مع النقصان في عرض الشق. منطقياً، حسب مفهوم الضوء الهندسي geometrical optics، نتوقع أن عرض شعاع الضوء المار خلال الشق يقل مع تضيق عرض الشق! هذا صحيح إذا كان عرض الشق كبير جداً مقارنة مع الطول الموجي $w \gg \lambda$، أي لايمكن ملاحظة الحيود. لكن عندما يصبح عرض الشق w قريب من الطول الموجي، نستطيع ملاحظة الحيود و نلاحظ أثر إستعراض الاهداب على الشاشة مع تضيق الشق، حسب مايتنبأه الضوء الفيزيائي physical optics.

لقد إستطاع هيجنز Huygens عام 1678م من تفسير الظواهر الموجية للإشعاع بإستخدام مصطلح صدر الموجة wave front و الذي يعتبر كل نقطة عليه مصدر ثانوي للإشعاع يُعطي صدر موجة متقدم و هكذا. هذا موضح في الشكل (2.6)، و الذي يوضح صدر موجة مستوية تسقط على حاجز له شق slit عرضها قريب من الطول الموجي. لدى إرتطام صدر الموجة بالشق فإن تشوه يحدث لصدر الموجة بسبب تقدم النقاط البعيدة عن حواف الشق مقارنة بالنقاط القريبة منه مما يؤدي إلى تحدب في صدر الموجة. قطر التحدب يتناسب مع عرض الشق، أي أن تحدبها يزداد مع صغر عرض الشق. كلما قل عرض الشق زاد تحدب صدر الموجة و بالتالي زاد عرض الحيود. هذا موضح في الشكل (2.6) حيث في (أ) عرض الشق أكبر منه في (ب) و بالتالي التحدب في صدر الموجة في (أ) أقل منه في (ب) و بالتالي الحيود اقل.

من وجهة نظر مبدأ عدم التحديد، من المعادلة (2.28) فإن Δx تمثل عرض الشق w. تصغير عرض الشق يعني صغر في قيمة Δx و بالتالي لابد من ان قيمة Δp تزداد كي تبقى العلاقة (2.28) متحققة. إن Δp ليست الخطأ أو الحيود في قياس الزخم الخطي في المقدار فقط، بل أيضاً في الإتجاه، لأن الزخم الخطي كمية متجهة. إن الضوء الوحيد اللون monochromatic، كالليزر يحوي على حزمة من الفوتونات و التي لها مقدار زخم خطي ثابت $p = h/\lambda$. ثبات الزخم الخطي في المقدار للفوتونات ناتج عن ثبات الطول الموجي، لكن تختلف في الإتجاهات. إن زيادة الإختلاف في الإتجاهات تعني زيادة في تبعثر الإتجاهات للفوتونات في جميع الإتجاهات المتاحة لها، كما يوضح الجزء (ج) من الشكل (2.6).



شكل (2.6): صدر موجة مستوية يسقط على حاجزين بشقين منفردين مختلفي العرض، كما في (أ) و (ب). ينتج عنه تحدب في صدر الموجة النافذة. قطر التحدب يتناسب مع عرض الشق. و عليه فإن التحدب في (أ) اقل منه في (ب) و بالتالي الحيود الموجي في (أ) أقل منه في (ب). الحيود يفسر حسب مبدأ عدم التحديد بأنه كلما ضاق الشق نقصت Δx و بالتالي يجب أن تزداد Δp. لو كانت الموجة وحيدة اللون فإن الزيادة في Δp في الإتجاه فقط كما هو موضح في (ج).

2.3 معادلة شرودنجر للجسيم الحر
Schrödinger equation for free particle

ذكرنا أن معادلات الحزم الموجية (2.26) و (2.27) تمثلان سعات الجسيم الحر في فضاء الإحداثيات (أو الموقع) و كمية الحركة (أو الزخم)، على الترتيب. لو أخذنا إشتقاق المعادلة (2.26) بالنسبة للزمن نحصل على

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)\frac{\partial}{\partial t}e^{i(px-Et)/\hbar}dp.$$

المشتقة الزمنية $\partial/\partial t$ ستُأثر فقط على الأس الذي يحوي حد الطاقة، و بالتالي يمكن إستبدالها بالمعامل $-iE/\hbar$، إذاً نكتب

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)\left(\frac{-iE}{\hbar}\right)e^{i(px-Et)/\hbar}dp.$$

للجسيم الحر فإن $E = p^2/2m$، إذاً

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)\frac{p^2}{2m}e^{i(px-Et)/\hbar}dp.$$

مرةً أُخْرى نجد أن

$$p^2e^{i(px-Et)/\hbar} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{i(px-Et)/\hbar},$$

لنحصل على الإشتقاق الزمني للدالة الموجية على الشكل

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)e^{i(px-Et)/\hbar}dp,$$

و ننتهي إلى

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}, \tag{2.30}$$

و التي تمثل معادلة تفاضلية تصف حركة جسيم حر حلها يعطى بالعلاقة (2.26). تسمى هذه المعادلة بمعادلة شرودنجر للجسيم الحر. لعل من أهم خصائص معادلة شرودنجر (2.30) هو كونها خطية. أي أنه إذا كان للمعادلة حلين مستقلين ψ_1 و ψ_2، فإن المجموع الخطي لهما أي $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ أيضاً حل للمعادلة. هنا α_1 و α_2 ثوابت مركبة. كما ذكرنا سابقاً، إن خطية المعادلة مطلب هام لتحقيق مبدأ التراكب الخطي.

بالإضافة إلى ذلك، المعادلة (2.30) من الرتبة الأولى للزمن. أي أنه إذا علمنا قيمة ψ الإبتدائية فإن تطور ψ لاحقاً مع الزمن يمكن تحديده على أساس أن

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\psi(x,t+\Delta t)-\psi(x,t)}{\Delta t},$$

بالأخذ بعين الإعتبار أن Δt صغيرة جدا بما فيه الكفاية، فإن

$$\psi(x,t+\Delta t) = \psi(x,t) + \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\Delta t. \tag{2.31}$$

من معادلة شرودنجر (2.30) نعوض عن تفاضل الزمن لنحصل على معادلة التطور الزمني للجسيم الحر

$$\psi(x,t+\Delta t) = \psi(x,t) + i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\Delta t. \tag{2.32}$$

عند $t = 0$ فإن حل معادلة شرودنجر للجسيم الحر تصبح

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)e^{ipx/\hbar}dp,$$

و بالتالي بعد فترة زمنية صغيرة جداً $\Delta t \to 0$ فإن

$$\psi(x,\Delta t) = \psi(x,0) + i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,0)}{\partial x^2}\Delta t.$$

بشكل عام لوكانت قيمة $\phi(p)$ معروفة في المعادلة (2.26) تصبح قيمة ψ معروفة عند أي زمن t.

2.4 التفسير الإحصائي للدالة الموجية
Statistical interpretation of the wave function

بالمقارنة مع معادلة الموجات الكهرومغناطيسية المركبة (2.6) و التي تصف الفوتون، فإنه من المعلوم أن شدة الإشعة تتناسب مع $|\mathbf{E}(\mathbf{r},t)|^2$ و هي منطقياً تمثل إحتمال أن نجد الفوتون في محيط $\mathbf{r}$ عند زمن t. بالتالي فإنه لمعرفة معنى ψ يجب الأخذ بالحسبان التالي :

1. الدالة الموجية ψ بشكل عام تحتوي على العدد التخيلي فهي دالة مركبة complex function.
2. إن قيمة $|\psi(x,t)|$ تعطي معلومات عن مكان تواجد الجسيم، أي أنها كبيرة عند المناطق الي يتواجد فيها الجسيم و صغيرة عند الأماكن الأخرى.

هذا حدا بماكس بورن Max Born أن يقدم الإقتراح التالي: أي جسيم يوصف بالدالة الموجية $\psi(x,t)$ له كثافة إحتمالية $P(x,t)$ بحيث أن $P(x,t)dx$ هي إحتمالية أن يتواجد الجسيم بين النقطة x و $x+dx$ عند زمن t و تُعْطى بالعلاقة التالية

$$P(x,t)dx \equiv |\psi(x,t)|^2dx. \tag{2.33}$$

واضح أن كثافة الإحتمالية $P(x,t)$ حقيقة و موجبة، كما هو مطلوب فيزيائياً. كذلك من الواضح أنه خلال تقدم الزمن فإنه يصبح لدينا إحتمالية أقل أن نجد الجسيم عند النقطة x و التي كان عندها الجسيم وقت $t=0$. أذا كانت $P(x,t)$ تمثل كثافة الإحتمالية، فإن إحتمال أن يتواجد الجسيم الحر في بعد واحد بين $-\infty < x < \infty$ لابد أن يكون 100%. هذا يسمى شرط المعايرة normalization condition أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1. \tag{2.34}$$

لكي يصبح التكامل أعلاه قابلاً للحل يجب أن تكون الدالة $|\psi(x,t)|^2$ قابلة للتكامل، هذا يعني أن ψ يجب أن تكون متصلة لـ x. كذلك كي يتحقق التكامل في شرط المعايرة (2.34) يجب أن تؤول $P(x,t)$ إلى الصفر في المالانهاية أي أن

$$\lim_{x\to\pm\infty} P(x,t)dx = \lim_{x\to\pm\infty} |\psi(x,t)|^2 \to 0, \tag{2.35}$$

تماماً كما هو الحال لشدة الحزمة الموجية و الموضح في الشكل (2.4). و عليه فإن الدالة الموجية ψ يجب أن تكون متناهية finite، أي أن

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x,t) \to 0. \tag{2.36}$$

المعادلة (2.36) تسمى شرط التناهي للدالة الموجية. في حالة أن الفضاء المعرفة عليه الدالة الموجية محدد بين نقطتين، فإن الدالة الموجية يجب أن تكون متناهية ضمن نطاق تعريف الفضاء.

إن التحويل الطوري $\psi \to e^{i\theta}\psi$ لايغير في قيمة كثافة الإحتمالية $|\psi(x,t)|^2$ أي أن طور $\psi(x,t)$ يصبح عديم الأهمية. لكن هذا غير صحيح بشكل عام بسبب خطية معادلة شرودنجر. فلو كان للمعادلة حلين مستقلين ψ_1 و ψ_2، فإن المجموع الخطي لهما أي $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ يمثل حلاً للمعادلة، حيث α_1 و α_2 ثوابت مركبة. لو أخذنا Ψ لتكون الحل العام فإن كثافة الإحتمالية $|\Psi|^2$ تحتوي على حدين إضافيين نتيجة التداخل بين الحلين ψ_1 و ψ_2. رياضياً، إذا كانت Ψ تُعْطى كالتالي

$$\Psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2, \tag{2.37}$$

فإن كثافة الإحتمالية تصبح

$$P(x,t) = \Psi^*\Psi = |\alpha_1|^2|\psi_1|^2 + |\alpha_2|^2|\psi_2|^2 + \alpha_1^*\alpha_2\psi_1^*\psi_2 + \alpha_2^*\alpha_1\psi_2^*\psi_1. \tag{2.38}$$

نجد أن الحد الثالث و الرابع يمثلان حدود التداخل بين ψ_1 و ψ_1. التداخل هنا بناء بسبب عدم وجود أي فروقات في الطور بين الحلول الجزئية لـ Ψ. في حالة إحتواء أي من الحلين الجزئيين أو كلاهما على عامل الطور فإن فرق الطور يلعب دور هام في تحديد التداخل بين الحلول الجزئية. فلو أعدنا تعريف الحلول الجزئية بحيث أن $\psi_1 \to e^{i\theta_1}\psi_1$ و $\psi_2 \to e^{i\theta_2}\psi_2$، لأصبح الحل العام

$$\Psi = \alpha_1 e^{i\theta_1}\psi_1 + \alpha_2 e^{i\theta_2}\psi_2, \tag{2.39}$$

و لأصبحت كثافة الإحتمالية كالتالي

$$P(x,t) = |\alpha_1|^2|\psi_1|^2 + |\alpha_2|^2|\psi_2|^2 + \alpha_1^*\alpha_2 e^{i(\theta_2-\theta_1)}\psi_1^*\psi_2 + \alpha_2^*\alpha_1 e^{i(\theta_1-\theta_2)}\psi_2^*\psi_1. \tag{2.40}$$

في حالة أن فرق الطور $|\theta_1 - \theta_2|$ يساوي $2n\pi$ حيث $n = 0, 1, 2, \ldots$ فإن إشارة الحدين الثالث و الرابع موجبة و التداخل بناء و نحصل على معادلة مشابهه للمعادلة (2.38). في حالة أن فرق الطور $|\theta_1 - \theta_2|$ يساوي $(2n+1)\pi$ حيث $n = 0, 1, 2, \ldots$ فإن إشارة الحدين الثالث و الرابع سالبة و التداخل في هذه الحالة هدام. إذاً نلاحظ هنا أن الطور النسبي يلعب دوراً هاماً في التداخل بين الحلول الجزئية عند حساب كثافة الإحتمالية للنظام تماماً كما يلعب فرق الطور في تجربة شقي يانج دوراً هاماً في جمع سعتي الموجتين المنبعثتين من خلال الشقين و بالتالي الحصول على نمط توزيع شدة الضوء على الشاشة بعد التداخل.

2.5 علاقة الإستمرارية Continuity relation

لو أخذنا الإشتقاق الزمني لصيغة كثافة الإحتمالية (2.33) نحصل على

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*(x,t)\psi(x,t)\right] = \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi.$$

بإستخدام معادلة شرودنجر (2.30) فإنه يمكن التعويض عن تفاضل الزمن لـ ψ و ψ^*، على الترتيب، كالتالي

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2},$$

و

$$\frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2 \psi^*(x,t)}{\partial x^2},$$

لنحصل على

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi\right) = \frac{-\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right),$$

حيث إستخدمنا العلاقة

$$\psi^*\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right).$$

نعرف كثافة التيار في بعد واحد J one dimension current density كالتالي

$$J(x,t) \equiv \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x}\psi(x,t)\right], \tag{2.41}$$

و بالتالي فإن إشتقاق كثافة الإحتمالية مع الزمن تصبح

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}. \tag{2.42}$$

المعادلة (2.42) تسمى معادلة الإستمرارية و هي معادلة حفظ و تنص على أن تغير كثافة الإحتمالية مع الزمن يقابله إنتقال بالفيض أو التيار عبر الفضاء. لاحظ الإشارة السالبة تعني أن إنخفاض كثافة الإحتمالية يقابله زيادة في إنتقال التيار عبر الفضاء. حتى تكون كثافة التيار $J(x,t)$ محددة، فإن الدالة الموجية ψ يجب أن تكون قابلة للإشتقاق، اي أنها دالة مستمرة و ملساء و لايوجد فيها أي نقاط إنكسار و إلا حصلنا على قيم غير معرفة لكثافة التيار أو قيم متفردة singularities.

السؤال الذي يطرح نفسه: هل يتغير شرط المعايرة (2.34) مع تغير كثافة التيار مع الزمن؟ بكلمة أخرى هل يجب معايرة الدالة الموجية كلما تقادم الزمن - بسبب معادلة الإستمرارية- أم يكفي أن نعاير الدالة الموجية لمرة واحدة فقط؟ الإجابة على السؤال من وجهة نظر فيزيائية هو لا! لأن الجسيم الحر مع تطور الزمن قد ينتقل في الفضاء و قد نفقد معلومات عن تواجده، لكن يبقى موجوداً في الفضاء و لاينعدم. و بالتالي فإن مجموع إحتمال تواجده في الفضاء يساوي الوحدة دائماً. هذا صحيح فقط ضمن نطاق ميكانيكا الكم التي نعنى بدراستها في هذا الكتاب و التي نفترض فيها أن الجسيمات لاتفنى و لا تستحدث حتى لو تفاعلت.

رياضياً يمكن إثبات أن شرط المعايرة (2.34) لايتغير مع الزمن بإيجاد تفاضل الزمن له، أي أن

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}dx = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}dx,\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\left[J(x,t)\right]dx = -J(x,t)|_{-\infty}^{+\infty},\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا معادلة الإستمرارية (2.42) للتعويض عن $\partial P/\partial t$ في المعادلة أعلاه. وبذلك فإن

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = -\left[\lim_{x\to+\infty} J(x,t) - \lim_{x\to-\infty} J(x,t)\right].$$

من شرط تناهي الدالة الموجية (2.36) فإن كثافة التيار في التعريف (2.41) يجب أن يكون متناهياً أيضاً، أي أن

$$\lim_{x\to\pm\infty} J(x,t) \to 0, \tag{2.43}$$

مما يعني أن

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx = 0, \tag{2.44}$$

والذي يعني أن شرط المعايرة ثابت ولايتغير مع الزمن، تماماً كما هو متوقع فيزيائياً.

إن تغير الإحتمالية بين نقطتين في فضاء البعد الواحد a و b يقابله تغير في التيار بين هاتين النقطتين، يمكن أن يحسب كالتالي

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{a}^{b} P(x,t)dx = -J(x,t)|_{a}^{b} = J(a,t) - J(b,t),$$

مما يعني أن التغير في المعايرة مع الزمن في المنطقة $[a,b]$ يتغير نتيجة لكثافات التيارات عند حدود المنطقة. تحديداً نقول إن إحتمال تواجد الجسيم داخل المنطقة $[a,b]$ يزداد مع التيارات التي تدخل المنطقة. هنا $J(a,t)$ يمثل التيار الداخل إلى $[a,b]$ من عند النقطة a عند زمن t و $-J(b,t)$ يمثل التيار الداخل إلى $[a,b]$ من عند النقطة b عند نفس زمن t.

2.6 أسئلة و تمارين

سؤال (2.6): إعتبر جسيم كمية حركته p و طاقته الكلية E تعطى دالته الموجية من علاقات فوريير (2.26) و (2.27)، أجب على مايلي:

1. أثبت أن الشكل التكاملي لمعادلة شرودنجر يُعْطى كالتالي

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x,x';t)\psi(x',0)dx'.$$

2. أوجد تمثيل الدالة $G(x,x';t)$ على شكل تكامل و اثبت أن $G(x,x';0) = \delta(x-x')$.

هذه الدالة $G(x,x';t)$ إحدى تمثيلات دالة جرين Green's function و تحوي المعلومات عن إنتقال النظام من نقطة x' إلى نقطة x خلال فترة زمنية t. فإذا كانت $t=0$ هذا يعني لابد أن يكون النظام عند x ، لذا فإن x'=x

$\diamondsuit$.

سؤال (2.7): إعتبر حزمة موجية موجية عند $t = 0$ معرفة في (2.7) و (2.8) حيث أن قيمة $g(k)$ تُعْطى كالتالي

$$g(k) = \begin{cases} 0, & k < -k_0. \\ N, & -k_0 < k < k_0. \\ 0, & k > k_0. \end{cases}$$

حيث k_0 و N ثوابت حقيقية و موجبة.

أ) أوجد صيغة الدالة $f(x)$.

ب) أوجد قيمة N بحيث تكون $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = 1$.

ج) بإختيار N أعلاه إحسب $\int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$.

د) بإستخدام تعريف مناسب لـ Δx و Δ أوجد قيمة $\Delta x \Delta k$.

التكامل التالي سيكون مفيدا $\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\sin u}{u}\right)^2 du = \pi$. $\diamondsuit$

سؤال (2.8): لديك الحزمة في فضاء k كالتالي

$$g(k) = \frac{N}{k^2 + \alpha^2}$$

حيث N و α ثوابت موجبة و حقيقية. أوجد صيغة الدالة $f(x)$ و أرسم الدالتين و منها إحسب $\Delta x \Delta k$ و أثبت أنها مستقلة عن قيمة الثابت α. $\diamondsuit$

سؤال (2.9): لديك الدالة الموجية في فضاء x كالتالي

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha|x|},$$

حيث A و α ثوابت موجبة و حقيقية. أجب على مايلي

1. ماهي أبعاد الثوابت A و α.
2. إستخدم شرط المعايرة لحساب قيمة A.
3. أوجد سعة الدالة الموجية في فضاء كمية الحركة $\phi(p)$.
4. أوجد الدالة $\psi(x,t)$ عل شكل تكامل.
5. ناقش بنوع من التفصيل إستيفاء الدالة الموجية ψ للشروط الرياضية، و بناء على ذلك هل يمكن حساب قيمة كثافة التيار؟
6. ناقش الحالات عندما تكون α كبيرة جداً و عدما تكون صغيرة جداً.

من الأفضل رسم الدالة الموجية و التحقق من الشروط الرياضية. إستخدم تعريف القيمة المطلقة عندما $x < 0$ و $x > 0$. لاحظ أن الدالة حقيقية و بالرغم من أي تناقض رياضي لهذه الدالة مع الشوط الرياضية، إلا أن كثافة التيار يمكن حسابها بسهولة. هل تعلم لماذا؟ ♢

سؤال (2.10): إعتبر إنتشار حزمة موجية جاوسية لجسيم حر كتلته m. حيث العلاقة التالية تنطبق $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$. إستخدم العلاقة (2.19) لحساب التغير النسبي في حجم الحزمة الموجية في ثانية واحدة إذا

أ) الحزمة تمثل إلكترون حجم حزمته $10^{-4}\,\mathrm{cm}$.

ب) الحزمة تمثل إلكترون حجم حزمته $10^{-8}\,\mathrm{cm}$.

ج) الحزمة تمثل جسم كتلته $1\,\mathrm{gm}$ و حجمه $1\,\mathrm{cm}$.

سيكون من المناسب التعبير عن العرض بوحدة $\hbar/mc$. ♢

سؤال (2.11): إعتبر شعاع من الإلكترونات سيطلق إلى مسافة $10^4\,\mathrm{km}$. إذا كان سعة size الحزمة الإبتدائية هو $1\,\mathrm{mm}$، ماهي سعة الحزمة عند الوصول إذا كانت طاقة الحركة هي (أ) $13.6\,\mathrm{eV}$ (ب) $100\,\mathrm{MeV}$. (ملاحظة: العلاقة بين طاقة الحركة و كمية الحركة ليست دائما $K = p^2/2m$). ♢

سؤال (2.12): إن حجم الأنوية في حدود $10^{-15}\,\mathrm{m}$ و عادة ما تشع الأنوية إلكترونات خلال ما يعرف بإنحلال β بطاقة تتروح ما بين $1 - 10\,\mathrm{MeV}$. بإستخدام مبدأ عدم اليقين أثبت أن ألكتروناً طاقته $1\,\mathrm{MeV}$ لايمكن أن يتواجد داخل النواة قبل إنحلال β. (إعتبر أن الإلكترون يتحرك بسرعة الضوء كأعلى تقدير). ♢

3

التركيب الأساسي لميكانيكا الكم
Fundamental structure of quantum mechanics

3.1 تمثيل المتغيرات الديناميكية وحساب القيم المتوقعة
Dynamical variables and expectation values

إن نجاح إختيار الدالة الموجية لتمثيل الجسيم يعتمد بشكل كبير على إمكانية أستخراج و حساب المعلومات الديناميكية المتضمنة في الدالة الموجية. لقد إعتمدنا تفسير ماكس بورن الإحصائي للدالة الموجية كما ذكرنا سابقاً في المعادلة (2.33) وعليه فإنه لدى حساب أي مقادير فيزيائية تحويها الدالة الموجية يجب أن تتم خلال كثافة الإحتمالية (2.33) و إعتبار هذه المقادير كمتوسطات حسابية أو قيم متوقعة.

على الرغم من أن مناقشاتنا السابقة تدور حول الجسيم حر، إلا أن جميع التعريفات و الإشتقاقات لكثافة الإحتمالية (2.33)، شرط المعايرة (2.34)، تناهي كثافة الإحتمالية و الدالة الموجية (2.36)، تعريف فيض التيار (2.41)، معادلة الإستمرارية (2.42)، و جميع قوانين الحفظ تنطبق كذلك على الجسيم تحت تأثير جهد، بشرط أن يكون الجهد حقيقياً، كما سنرى لاحقاً. إذاً ما سوف نشتقه في هذا الباب هي نتائج عامة و ليست خاصة.

إن أول مقدار فيزيائي يتبادر في ذهننا هو إحداثي الجسيم عند زمن ما. إذا كان إحداثي الجسيم هو x عند زمن t له إحتمالية $P(x,t)$ فإن القيمة المتوقعة للجسيم عند زمن t تُعْطى من التعريف الإحصائي كالتالي

$$\langle x\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x,t)|^2 dx. \tag{3.1}$$

لاحظ أنه لو كانت الإحتمالية في زمن t_0 عند نقطة x_0 تُعْطِي $P(x_0,t_0)=1$، هذا يعني من شرط المعايرة أن $P(x,t_0)=0$ لأي قيمة $x\neq x_0$ و بالتالي فإن $\langle x\rangle = x_0$. بسبب مبدأ عدم اليقين فإن هذا الفرض لاينطبق على الإنظمة المجهرية، أي أنه لايمكن التأكد من أن إحداثي نقطة واحدة لها إحتمالية 100% ليكون الجسيم عندها عند زمن ما.

كذلك نلاحظ من التعريف (3.1) أن القيمة المتوقعة $\langle x\rangle$ بشكل عام تعتمد على الزمن لذلك هي لاتمثل متوسط قيمة x عند إعادة القياس مرات عديدة لنظام أو لترتيب setup واحد، لأن هذا يعني قياس x عند أزمنة مختلفة، بل تمثل متوسط قيمة x لعدد كبير من الأنظمة أو الترتيبات حضرت عند نفس الظروف و دونت نتائج x لها عند نفس الزمن. يمكن إذاً إعتبار $\langle x\rangle$ كمتوسط القيمة لـتجمعات ensemble من التجارب.

حالما يتغير الزمن فإن $\langle x\rangle$ تتغير بسبب إعتماد ψ على الزمن. لو إهتممنا بسرعة تغير $\langle x\rangle$ يجب أن نجده خلال

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}dx,$$

حيث إعتبرنا $\partial x/\partial t = 0$. من معادلة الإستمرارية (2.42)، يمكن التعويض عن $\partial P/\partial t$ في المعادلة أعلاه بـ $-\partial J/\partial x$ لنحصل على

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}dx.$$

نكامل بالتجزيء حيث نعلم من تعريف التفاضل أن

$$x\frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left[xJ(x,t)\right] - J(x,t),$$

و عليه يصبح الطرف الأيمن في التكامل كالتالي

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left[xJ(x,t)\right]dx + \int_{-\infty}^{+\infty} J(x,t)dx,$$

و الذي يصبح

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -xJ(x,t)|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} J(x,t)dx.$$

من الشرط (2.43) نستنتج أن J تؤول إلى الصفر على الأقل بنفس السرعة التي تؤول فيها x إلى المالانهاية، وعليه نعتبر أن

$$\lim_{x\to\pm\infty} xJ(x,t) \to 0,$$

و بذلك الحد الأول من ناتج التكامل في الطرف الأيمن يختفي ليبقى الحد الثاني لتكامل كثافة التيار و الذي نعوض بعلاقة فيض التيار (2.41) لنحصل على

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} J(x,t)dx = \frac{\hbar}{2im}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)dx.$$

مرة أخرى نستخدم التكامل بالتجزيء، من تعريف التفاضل

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\psi\right) - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x},$$

نعوض لنحصل على

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\hbar}{2im}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\psi\right) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dx.$$

أو

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\hbar}{2im}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\psi\right)\right]dx.$$

لننتهي إلى

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\hbar}{im}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx - \frac{\hbar}{2im}\psi^*\psi|_{-\infty}^{+\infty}.$$

من الشرط (2.35) فإن $\psi^*\psi|_{-\infty}^{+\infty} = 0$ و بذلك ننتهي إلى أن

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\hbar}{im}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}dx. \tag{3.2}$$

لكن ماذا تمثل السرعة $d\langle x\rangle/dt$ في ميكانيكا الكم؟ إن مفهوم السرعة في ميكانيكا الكم غير واضح لأننا لا نتحدث عن جسيم بل عن التغير في الموقع للدالة ψ. لو أخذنا أن $d\langle x\rangle/dt$ تمثل متوسط سرعة المجموعة و التي رأينا أنها هي نفسها سرعة الجسيم كما في العلاقة (2.25)، فإننا نحصل على

$$\langle v_g\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m} = \frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\hbar}{im}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}dx.$$

أو بعبارة أخرى

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)dx. \tag{3.3}$$

من التعريف الإحصائي نعلم أن

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} pP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)p\psi(x,t)dx,$$

لكن عوضاً عن مقدار كمية الحركة p في فضاء الإحداثيات إستخدمنا في المعادلة (3.3) المؤثر التفاضلي $-i\hbar\partial/\partial x$ أي أن

$$p \to \hat{p} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \tag{3.4}$$

هنا p تعني مقدار كمية الحركة و$\hat{p}$ تعني مؤثر كمية الحركة. كذلك من التعريف (3.1) نجد أنه في فضاء الإحداثيات فإن x كمؤثر (أي $\hat{x}$) هي نفسها x، أي أنه في فضاء الإحداثيات

$$x \to \hat{x} \equiv x. \tag{3.5}$$

من الأهمية بمكان إن نؤكد على أن تمثيلاتنا للمؤثرات أعلاه هي في فضاء الإحداثيات فقط، لأن هذه التمثيلات تختلف في الفضاءات الأخرى كفضاء كمية الحركة على سبيل المثال، كما سنرى لاحقاً.

كلاسيكياً، جميع المتغيرات الديناميكية يمكن التعبير عنها كدالة للموقع و كمية الحركة. على سبيل المثال الطاقة الحركية $K = p^2/2m$ و العزم الزاوي المداري (في ثلاث أبعاد بالطبع) $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$. لهذا يمكن أن نعمم و نقول أي كمية فيزيائية $Q(x,p)$ يعبر عنها في ميكانيكا الكم بالمؤثر $\hat{Q}(\hat{x}, -i\hbar\partial/\partial x)$ بحيث أن قيمتها المتوقعة expectation value عند زمن معين t تُعْطى كالتالي

$$\langle Q(x,p)\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\hat{Q}(\hat{x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)dx. \tag{3.6}$$

في هذه الحالة نقول أن الدالة ψ هي دالة مميزة eigenfunction للمؤثر $\hat{Q}(\hat{x}, -i\hbar\partial/\partial x)$ بقيمة مميزة eigen-value q، أي أنه إذا أثر $\hat{Q}(\hat{x}, -i\hbar\partial/\partial x)$ على ψ نحصل على القيمة المميزة q. رياضياً نكتب

$$\hat{Q}(\hat{x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t) = q\psi(x,t). \tag{3.7}$$

على سبيل المثال الطاقة الحركية K يعبر عنها كمؤثر كالتالي

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

و بهذا فإن القيمة المتوقعة للطاقة الحركية تصبح

$$\langle K\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)dx.$$

لاحظ أن القيمة المميزة هنا تُعطي المقدار الفيزيائي للنظام و المُتَضمن في الدالة الموجية عند زمن معين في مكان معين. بينما القيمة المتوقعة تُعطى المقدار الفيزيائي عند زمن معين فقط.

للجسيم الحر و بإستخدام معادلة هاميلتون نجد أنه يكافيء معادلة الطاقة الحركية، أي أن $H_{\text{free}} = p^2/2m$. على شكل مؤثرات نكتب الهاميلتون للجسيم الحر كالتالي

$$\hat{H}_{\text{free}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}. \tag{3.8}$$

لو أثر على الدالة الموجية $\psi(x,t)$ نحصل على

$$\hat{H}_{\text{free}}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}.$$

بمقارنة المعادلة أعلاه مع معادلة شرودنجر للجسيم الحر (2.30)، نستنتج أن المؤثر الهاميلتوني للجسيم الحر يمكن أن يعوض عنه أيضاً بمؤثر زمني، أي أن

$$\hat{H}_{\text{free}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{3.9}$$

سؤال (3.1): ما هو الشرط اللازم تحقيقه حتى تتساوى القيمة المميزة مع القيمة المتوقعة؟ ◇

الآن نريد أن نوسع منظور دراستنا إلى حالة أكثر عمومية و ننتقل إلى حالة الجسيم تحت تأثير جهد. بالرغم من ذلك سنجد أن قوانينا و نقشاتنا السابقة لن تتأثر بهذه النقلة، كما سنرى الآن.

3.2 معادلة شرودنجر لجسيم تحت تأثير جهد في بعد واحد
Schrödinger equation with potential in one dimension

في حالة وجود جهد في بعد واحد مستقل عن الزمن $V(x)$ يؤثر على الجسيم فإن الطاقة الكلية تحوي على حدين أحدهما يمثل الطاقة الحركية و الآخر يمثل طاقة الجهد. معادلة هاميلتون للنظام تصبح دالة لـ x و p كالتالي

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \tag{3.10}$$

يمكن التعبير عن معادلة هاميلتون كمؤثر فقط بتمثيل x و p كمؤثرات لنحصل على

$$\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \tag{3.11}$$

لكن معادلة هاميلتون هي معادلة عامة لجميع الإنظمة الديناميكية. لذلك فإن المؤثر الهاميلتوني في حالة وجود جهد يمكن التعبير عنه بمؤثر زمني تماماً كما هو الحال للمؤثر الهاميلتوني للجسيم الحر في العلاقة (3.9). لهذا فلو كانت ψ دالة مميزة eigenfunction للمؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ فإن

$$\hat{H}\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t). \tag{3.12}$$

عندئذ تصبح معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن في وجود جهد في بعد واحد كالتالي

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t). \tag{3.13}$$

نذكر مرة أخرى: إن جميع التعريفات و الإشتقاقات لكثافة الإحتمالية (2.33)، شرط المعايرة (2.34)، تناهي كثافة الإحتمالية و الدالة الموجية (2.36)، تعريف فيض التيار (2.41)، معادلة الإستمرارية (2.42)، و جميع قوانين الحفظ تنطبق كذلك على الجسيم تحت تأثير جهد، بشرط أن يكون الجهد حقيقياً.

سؤال (3.2): أثبت أن معادلة الإستمرارية (2.42) تنطبق أيضاً فيما لو أن ψ حلاً لمعادلة شرودنجر (3.13) بإعتبار أن الجهد حقيقي، و الدالة الموجية ψ تتبع العلاقة (2.33) و (2.34)، و شرط التناهي (2.36). $\diamondsuit$

سؤال (3.3): إذا كان الجهد $V(x)$ يحتوي على حد ثابت V_0 (لايعتمد على x و t)، فإنه فى الميكانيكا الكلاسيكية لايغير هذا الجهد النظام. لكن ماذا عن ميكانيكا الكم؟ أثبت أن الدالة الموجية تأخذ طور معتمد على الزمن $e^{-iV_0t/\hbar}$ وما أثر هذا الطور على كثافة الإحتمالية و القيم المتوقعة للمتغيرات الديناميكية؟ $\diamondsuit$

بشكل عام، فإنه في نهاية المطاف جميع القيم المتوقعة يجب أن تتبع القوانين الكلاسيكية. هذه تسمى نظرية إيرنفيست Ehrenfest. فعلى سبيل المثال لو حسبنا التغير الزمني للقيمة المتوقعة لكمية الحركة سنجد إنها

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{dV(x)}{dx} \right\rangle, \tag{3.14}$$

و التي تماثل إحدى معادلات الحركة الكلاسيكية للأنظمة المحافظة.

سؤال (3.4): بإستخدام علاقة (3.3) و (3.13) مع تطبيق الخاصية التبادلية للتفاضل المكاني مع الزماني، أثبت علاقة إيرنفيست (3.14). $\diamondsuit$

3.3 معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن
Time-independent Schrödinger equation

بسبب خطية المعادلة (3.13) و عدم إعتماد دالة الجهد على الزمن، فإنه بالإمكان فصل المتغيرات للدالة $\psi(x,t)$ لنكتبها كالتالي

$$\psi(x,t) = u(x)T(t). \tag{3.15}$$

بالتعويض في معادلة شرودنجر (3.13) نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}T(t)\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x)T(t) = i\hbar u(x)\frac{dT(t)}{dt}.$$

بالقسمة على $u(x)T(t)$ نحصل على

$$\frac{1}{u(x)}\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt}. \tag{3.16}$$

نجد في المعادلة (3.16) أن الطرف الأيسر و الذي يعتمد فقط على الإحداثيات x يساوي الطرف الأيمن و الذي يعتمد فقط على الزمن t. بسبب إستقلالية x و t عن بعضهما البعض، لايمكن أن يحدث هذا التساوي إلا إذا كان الطرف الأيمن و الأيسر يساويان ثابتاً مستقلاً عن x و t. في واقع الأمر، هذا الثابت هو الطاقة الكلية E. وعليه تجزأ المعادلة (3.16) لتصبح

$$i\hbar\frac{dT(t)}{dt} = ET(t), \tag{3.17}$$

و هي المعادلة المعتمدة على الزمن، و حلها هو

$$T(t) = Ce^{-iEt/\hbar}, \tag{3.18}$$

حيث C ثابت مركب. الحل (3.18) يمثل حل الجزء الزمني temporal part للدالة الموجية $\psi(x,t)$. أما حل الجزء الإحداثي space part من الدالة الموجية فيُعْطى من حل المعادلة التفاضلية التالية

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x), \tag{3.19}$$

و تسمى معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن time-independent Schrödinger equation و تسمى أيضاً معادلة القيمة المميزة eigenvalue equation لأنه من الواضح أن المؤثر الهاميلتوني (3.11) يؤثر على الدالة $u(x)$ لنحصل على القيمة المميزة E. أي أن

$$\hat{H}u(x) = Eu(x). \tag{3.20}$$

الدالة $u(x)$ تسمى الدالة المميزة eigenfunction للمؤثر $\hat{H}$ و تصبح E القيمة المميزة eigenvalue أو طيف المؤثر $\hat{H}$. وللتأكيد على أن $u(x)$ هي الدالة المميزة لمؤثر الطاقة سنقوم بإعادة كتابتها على الشكل $u_E(x)$. إذاً الحل الكلي لمعادلة شرودنجر يصبح

$$\psi(x,t) = Cu_E(x)e^{-iEt/\hbar}, \tag{3.21}$$

لنحصل على الدالة الموجية بصيغة أكثر توسعاً. إن طريقة فصل المتغيرات ماكانت لتنجح لو كانت دالة الجهد معتمدة على الزمن. من المعادلة (3.21) نلاحظ أن كثافة الإحتمالية $|\psi(x,t)|^2$ لا تعتمد على الزمن حيث أن

$$|\psi(x,t)|^2 = |C|^2|u_E(x)|^2,$$

و بالتالي فإن القيم المتوقعة (3.6) لا تعتمد على الزمن أيضاً. كذلك من شرط معايرة $|\psi(x,t)|^2$ فإن $|C|^2|u_E(x)|^2$ معايرة ايضاً. أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = |C|^2\int_{-\infty}^{+\infty}u_E^*(x)u_E(x)dx = 1.$$

فلو قمنا بمعايرة الدالة $u_E(x)$ فإنه بالإمكان أن نُسْقِطَ الثابت C. لهذا يكفي إستخدام الدالة المستقلة عن الزمن $u_E(x)$ أو $\psi(x,0)$ لوصف النظام عوضاً عن الدالة $\psi(x,t)$. هنا نحن لاتناقض نقاشنا السابق بأن القيم المتوقعة بشكل عام تعتمد على الزمن. لكننا هنا نتكلم عن طريقة حل بفصل المتغيرات لنظام في حالة واحدة single state يوصف بدالة موجية وحيدة $\psi(x,t)$.

لو أردنا حساب القيمة المتوقعة للمؤثر الهاميلتوني، نستخدم العلاقة (3.6) لنحصل على

$$\langle H\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\hat{H}\psi(x,t)dx. \tag{3.22}$$

بالتعويض عن $\psi(x,t)$ بإستخدام الصيغة (3.21)، و بتطبيق المعادلة المميزة (3.20) و إستخدام شرط المعايرة، نحصل على

$$\langle H\rangle = |C|^2\int_{-\infty}^{+\infty}u_E^*(x)\hat{H}u_E(x)dx = |C|^2\int_{-\infty}^{+\infty}u_E^*(x)Eu_E(x)dx = E.$$

و بنفس الطريقة يمكننا حساب $\langle H^2\rangle$، لنحصل على

$$\langle H^2\rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u_E^*(x)\hat{H}^2 u_E(x)dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u_E^*(x)E^2 u_E(x)dx = E^2.$$

الإنحراف في قياس الطاقة يحسب كالتالي

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2}.$$

إذا كان الإنحراف يساوي صفر فهذا يعني أن كل عنصر من العينة له نفس القيمة من الطاقة، بعبارة أخرى لايوجد أي تفاوت في التوزيع. لهذا نقول إن الحل بفصل المتغيرات لحالة واحدة single state له الخاصية بأن أي قياس للطاقة سيعطي قيمة مؤكدة بأنها E.

سؤال (3.5): إحسب كلاً من $\langle H\rangle$ و $\langle H^2\rangle$ بإستخدام الصيغة (3.21) في (3.22)، و لكن عوضاً عن تطبيق المعادلة المميزة (3.20)، إستخدم التمثيل فقط (3.12) و أثبت أنها تُعْطِي نفس النتائج. ♢

3.4 نظرية التحليل الطيفي
Spectral decomposition theorem

النظم الفيزيائية عادة تحوي على أكثر من حالة كمية واحدة كل حالة لها مستوى طاقة مميز eigenstate و توصف بدالة مميزة eigenfunction تكون حلاً لمعادلة شرودنجر. بما أن معادلة شرودنجر خطية فإن الحل الكلي يشمل جميع قيم الطاقة الممكنة أي أن

$$\Psi(x,t) = \left[\sum_E + \int dE\right] a_E \psi_E(x,t), \tag{3.23}$$

حيث أن الجمع $\sum_E$ يكون على قيم الطاقة المتقطعة discrete energy levels و التكامل يكون على قيم الطاقة المستمرة continuous energy states، و a_E ثوابت مركبة تمثل مقدار الحالة، الموصوفة بـ ψ_E و لها طاقة E، المُتَضمنة في الدالة الكلية Ψ. يمكننا التعويض عن $\psi(x,t)$ في (3.23) بإستخدام الصيغة (3.21) لنحصل على

$$\Psi(x,t) = \left[\sum_E + \int dE\right] a_E\, C(E) u_E(x) e^{-iEt/\hbar},$$

هنا $C(E)$ دالة عشوائية arbitrary function تمثل ثابت المعايرة للقيم المميزة لكل حالة طاقة.

لنأخذ على سبيل المثال حالة القيم المتقطعة فقط حيث أن حل معادلة شرودنجر (3.13) يعطى مجموعة الدوال المستقلة التالية $\{\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n, \ldots\}$ (سنرمز لها لاحقاً بـ $\{\psi_n\}$ حيث أن $n = 1, 2, \ldots$) و التي ترتبط بقيم مميزة $\{E_1, E_2, \ldots, E_n, \ldots\}$ (أو $\{E_n\}$) بحيث أن

$$\psi_1(x,t) = u_{E_1}(x)e^{-iE_1 t/\hbar}; \quad \ldots \quad \psi_n(x,t) = u_{E_n}(x)e^{-iE_n t/\hbar}; \quad \ldots,$$

أو بشكل أكثر إختصاراً

$$\psi_n(x,t) = u_{E_n}(x)e^{-iE_n t/\hbar}; \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{3.24}$$

لاحظ أن ثوابت المعايرة

$$\{C_1, C_2, \ldots, C_n, \ldots\},$$

قد أسْقِطت لأننا سنعاير مجموعة الدوال المميزة $\{u_{E_1}, u_{E_2}, \ldots, u_{E_n}, \ldots\}$ كما نوهنا سابقاً. من معادلة التحليل (3.23) سيكون الحل الكلي إذاً الجمع الخطي للحلول المستقلة، أي أن

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n \psi_n(x,t) = \sum_n a_n u_{E_n}(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{3.25}$$

لاحظ أن $\Psi(x,t) = 0$ بشرط واحد فقط هو أن جميع السعات $a_1 = a_2 = a_3 = \cdots = 0$ و الذي يعني أن مجموعة الدوال $\{\psi_1, \psi_2, \ldots\}$ مستقلة خطياً. بما أن المجموعة مستقلة خطياً، فإننا نقول إنها مجموعة أيضاً عيارية متعامدة orthonormal set، أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x,t)\psi_n(x,t)dx = \begin{cases} 1, & n = m. \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

أو بإختصار نكتب

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x,t)\psi_n(x,t)dx = \delta_{mn}, \tag{3.26}$$

حيث δ_{mn} تسمى كرونكر دلتا Kronecker delta، تُعَرف كالتالي

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & n = m. \\ 0, & n \neq m. \end{cases} \tag{3.27}$$

إن علاقة التعامد العيارية orthonormality relation (3.26) تعميم لشرط المعايرة normalization condition (2.34) و تعني أنه كل حالة كمية مستقلة عن الحالة الأخرى.

سؤال (3.6): من العلاقة التعامد العيارية (3.26)، أثبت أن $\int_{-\infty}^{+\infty} u_{E_m}^*(x)u_{E_n}(x)dx = \delta_{mn}$، أي أن الدوال غير المعتمدة على الزمن أيضاً متعامدة إذا تعامدت الدوال المعتمدة على الزمن. $\diamondsuit$

إن كثافة الإحتمالية للدالة الكلية $\Psi(x,t)$ في هذه الحالة تعتمد على الزمن، حيث

$$|\Psi(x,t)|^2 = \sum_m a_m^* \psi_m^*(x,t) \sum_n a_n \psi_n(x,t),$$

بشكل صريح، يمكن أن نكتب $|\Psi(x,t)|^2$ بمعلومية الحلول المنفصلة (3.24) لنحصل على

$$|\Psi(x,t)|^2 = \sum_{m,n} a_m^* a_n u_{E_m}^*(x) u_{E_n}(x) e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}. \tag{3.28}$$

من الواضح أن الحدود المتقاطعة و التي فيها $n \neq m$ فإن المعامل $e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar} \neq 1$ و بالتالي تتذبذب كثافة الإحتمالية $|\Psi(x,t)|^2$ مع الزمن بتردد مقداره $(E_n - E_m)/\hbar$.

إن شرط المعايرة مطلب أساسي للدالة الكلية $\Psi(x,t)$، أي أن

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x,t)\psi_n(x,t)dx,$$

أو بإستخدام الحلول المنفصلة (3.24) أو مباشرة من (3.28)، نكتب المعايرة

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} u_{E_m}^*(x) u_{E_n}(x) dx.$$

من شرط التعامد العيارية لمجموعة الدوال $\{u_{E_n}(x)\}$ (أنظر إلى السؤال (3.6) صفحة (62) للإستعلام) فإن المعايرة تصبح

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \delta_{mn},$$

بإستخدام خصائص دالة كرونكر، ننتهي إلى أن

$$\sum_n |a_n|^2 = 1 \tag{3.29}$$

سيكون جدير بالإهتمام أن نحسب القيمة المتوقعة للمؤثر الهاميلتوني

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \hat{H} \psi_n dx,$$

بمعلومية الحلول المنفصلة (3.24) نحصل على

$$\langle H \rangle = \sum_{m,n} a_m^* a_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} u_{E_m}^*(x) \hat{H} u_{E_n}(x).$$

نستخدم العلاقة المميزة $\hat{H} u_{E_n} = E_n u_{E_n}$ لنحصل على و نطبق خاصية التعامد العيارية لنحصل على

$$\langle H \rangle = \sum_{m,n} a_m^* a_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} E_n \int_{-\infty}^{+\infty} u_{E_m}^*(x) u_{E_n}(x) = \sum_{m,n} a_m^* a_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} E_n \delta_{mn}.$$

بتطبيق خصائص دالة كرونكر ننتهي إلى أن

$$\langle H \rangle = \sum_n |a_n|^2 E_n. \tag{3.30}$$

من المعادلتين (3.29) و (3.30) نجد أن معنى $|a_n|^2$ هو إحتمالية. لكن هناك عدة تصورات لهذه الإحتمالية. من هذه التصورات هو أن $|a_n|^2$ تمثل إحتمالية أن يتواجد النظام في الحالة الكمية n بطاقة مقدارها E_n. في الواقع هذا تصور غير عملي. لأن النظام موجود فعلاً في الدالة الموجية الكلية $\Psi(x,t)$ كما توضح لنا المعادلة (3.25). كذلك عملياً نحن لانقيس أو نستطيع أن نلاحظ وجود جسيم في حالة كمية معينة. كل ما نقوم فيه في المختبر هو قياس كميات ديناميكية و الحصول على نتائج رقمية. التصور الهام الآخر و هو إعتبار أن a_n تمثل كمية الدالة الموجية $\psi_n(x,t)$ المُحتَواة ضمن الدالة الموجية الكلية $\Psi(x,t)$، كما هو الحال في جبر المتجهات. وبالتالي فإن $|a_n|^2$ تمثل إحتمالية الحصول على القيمة E_n لدى إجراء قياس لطاقة النظام. نرمز لهذه الإحتمالية بالدالة $P(E_n)$ و هي تساوي إذاً $|a_n|^2$.

إن إجراء أي قياس لطاقة النظام دائماً تعطي في كل مرة إحدى كميات الطاقة المسموحة: E_1، E_2، ...، أو E_n، ... إلخ. لو هيئنا عدد كبير من التجارب للنظام أعلاه عند نفس الظروف (دعنا نقول N تجربة حيث أن N عدد كبيرمناسب) و قمنا بقياس الطاقة لكل تجربة عند نفس الزمن سنجد أن عدد المرات التي حصلنا فيها على قيمة الطاقة E_1 هي $|a_1|^2 N$ و عدد المرات التي حصلنا فيها على قيمة الطاقة E_2 هي $|a_2|^2 N$ و لـ E_n هي $|a_n|^2 N$. لذلك فإن المتوسط الحسابي لهذه الطاقات يصبح

$$\frac{N|a_1|^2 E_1 + N|a_2|^2 E_2 + \cdots + N|a_n|^2 E_n + \ldots}{N}$$

و التي في نهاية المطاف تُعطي نفس العلاقة (3.30). هذا أيضاً يتفق مع نقاشنا السابق فيما يتعلق بمعنى القيمة المتوقعة. في كل الأحوال نتكلم الآن عن إحتمالية و ليس تأكيدات كما هو الحال في معادلة الحالة الواحدة (3.21). عطفاً على ما سبق يمكن حساب $\langle H^2 \rangle$ حيث نستخدم $\hat{H}^2 u_{E_n} = E_n^2 u_{E_n}$ لنحصل على

$$\langle H^2 \rangle = \sum_n |a_n|^2 E_n^2. \tag{3.31}$$

سؤال (3.7): إستخدم $\Psi(x,t)$ في معادلة التحليل (3.25) لحساب $\langle H^2\rangle$ بالتفصيل و بالتالي إثبات النتيجة (3.31). ♢

بإستخدام النتيجتين (2.30) و (3.31) نستطيع حساب الإنحراف في الطاقة لنجد أنه

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2} = \sqrt{\sum_n |a_n|^2 E_n^2 - \left(\sum_m |a_m|^2 E_m\right)^2} \geq 0. \tag{3.32}$$

المساوة للصفر تحدث فقط إذا كانت هناك حالة واحدة j لها إحتمالية $|a_j|^2 = 1$ و بالتالي سعات الحالات الأخرى تساوي الصفر. بكلمة أخرى، يختفي التفاوت في الطاقة إذا وجد حالة كمية واحدة فقط مسموح بها. يوجد التفاوت في قياس الطاقة إذا وجد حالتين كميتين أو أكثر مسموح بها.

نستنتج مما سبق أن النظام الكمي يكون في حالة إتزان مع الزمن إذا كان له حالة كمية واحدة فقط مسموح له بالتواجد فيها. و أن التغير مع الزمن يحدث أذا سمح للنظام بالتواجد في حالتين كميتين مستقلتين أو أكثر. إن قياس طاقة النظام و الحصول على أحد النتائج المسموح بها ضمن قائمة القيم المميزة للمؤثر $\hat{H}$ يعني أن النظام أُسْقِط على هذه الحالة المميزة بفعل القياس نفسه، لأن النظام ذاته حساس لطبيعة القياس المُجْرى عليه. و بالتالي فإن إعادة القياس مرة أخرى على نفس النظام في أزمنه لاحقة ستُعْطي بالتأكيد نفس القيمة المميزة!

يهمنا الآن ايجاد طريقة لحساب سعة كل حالة كمية من حالات النظام. رياضياً نحسب السعة a_n بإيجاد مسقط الدالة الموجية الكلية $\Psi(x,t)$ على الحالة الكمية n المُمَثلة بـ $\psi_n(x,t)$. هذا يتم بحسابنا للتكامل التالي

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x,t)\Psi(x,t)dx &= \sum_m a_m \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x,t)\psi_m(x,t)dx, \\ &= \sum_m a_m \delta_{nm} = a_n.\end{aligned}$$

إذاً سعة كل حالة كمية للنظام تُحْسَب دائماً من العلاقة

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x,t)\Psi(x,t)dx, \tag{3.33}$$

وبالتالي فإن إحتمال الحصول على مقدار الطاقة E_n عند إجراء قياس لطاقة النظام يُعْطى كالتالي

$$P(E_n) = |a_n|^2 = \left|\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x,t)\Psi(x,t)dx\right|^2. \tag{3.34}$$

نؤكد مرة أخرى بأن عملية الإسقاط للنظام المُقَاس و الموصوف بـ $\Psi(x,t)$ على الحالة ψ_n لدى قياسنا للكمية الفيزيائية H و الحصول على القيمة E_n ينتج عملياً عن التفاعل بين وسيلة القياس means of measurement و بين النظام المُسْتَهدَف. حيث تُسْقِط وسيلة القياس النظام على الكمية التي تم قياسها بحيث لو قيس النظام مباشرة لحصلنا على نفس النتيجة. هذا الأثر يظهر فقط في الإنظمة المجهرية و التي تتأثر بطرق القياس العملية، على سبيل المثال تأثر الإلكترون و تغير كمية حركته لدى تحديد موقعه بالفوتون.

إن مناقشتنا السابقة كانت للمؤثر الهاميلتوني و دواله المميزة المستقلة و المتعامدة. لاحقاً سنجد إن جميع ماذكر ينطبق تماماً على جميع المؤثرات المُعْتَمَدة في ميكانيكا الكم. عندما نقول مؤثرات معتمدة نعني أنه يوجد شروط رياضية يجب على المؤثرات أن تحققها حتى يصبح لها معنى فيزيائي. هذا سوف نناقشه لاحقاً.

3.5 تمثيل المتغيرات الديناميكية وحساب القيم المتوقعة في فضاء كمية الحركة Momentum space representation

بحثنا في السابق عن معنى الدالة الموجية ψ و تمثيل المتغيرات الديناميكية في فضاء الإحداثيات في بعد واحد. لكن لم نتطرق إلى الدالة في فضاء كمية الحركة $\phi(p,t)$ ومعناها الفيزيائي بشكل صريح. إن أول ما قد يتبادر في أذهاننا أن هناك تناظر بين فضاء كمية الحركة و فضاء الإحداثيات. إذا ماكان هذا التصور صحيح فإن الدالة ϕ في فضاء p لها نفس خصائص الدالة ψ في فضاء x. لهذا فإن الإجابة تنطوي على بحث معنى الدالة ϕ. إن الإنتقال بين ϕ و ψ يتم من خلال تحويلات فوريير في المعادلتين (2.26) و (2.27). للتبسيط، نأخذ المعادلتين (2.26) و (2.27) عند $t=0$، لنحصل على المعادلتين التكامليتين

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp, \tag{3.35}$$

و

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \tag{3.36}$$

لنبحث شرط المعايرة للدالة $\phi(p)$ في فضاء كمية الحركة

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p)\phi(p)dp \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x) e^{ipx/\hbar}\right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, \psi(x') e^{-ipx'/\hbar}\right], \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, \psi(x') \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{i(x-x')p/\hbar}.
\end{aligned}$$

لكن التكامل الأخير ليس إلا دالة ديراك، أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{i(x-x')p/\hbar} = 2\pi\hbar\delta(x-x'), \tag{3.37}$$

و بالتالي و بإستخدام دالة ديراك يصبح شرط المعايرة

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p)\phi(p)dp &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, \psi(x')(2\pi\hbar)\delta(x-x'), \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\psi(x) = 1.
\end{aligned}$$

لنؤكد أن الدالة $\phi(p)$ معايرة، أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p)\phi(p)dp = 1. \tag{3.38}$$

هذه تسمى نظرية بارسيفال Parseval's theorem و التي تنص على أنه إذا كانت هناك دالة معرفة على فضاء ما معايرة إلى الوحدة فإن تحويل فوريير لها على فضاء آخر مقابل يكون أيضاً معاير إلى الوحدة.

من علاقة (3.3) يمكن حساب القيمة المتوقعة للمؤثر $\hat{p}$ في فضاء p كالتالي

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)dx,\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dx\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)e^{-ipx/\hbar}\right]\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\,\phi(p')e^{ip'x/\hbar}\right],\\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left[\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)e^{-ipx/\hbar}\right](-i\hbar)\left[\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\left(\frac{ip'}{\hbar}\right)\phi(p')e^{ip'x/\hbar}\right],\\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\,p'\phi(p')\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,e^{i(p'-p)x/\hbar}}_{2\pi\hbar\delta(p'-p)} = \int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)p\phi(p).
\end{aligned}$$

لننتهي إلى أن

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}dp\;\phi^*(p)p\,\phi(p). \tag{3.39}$$

العلاقة (3.39) تعني أن مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ في فضاء كمية الحركة هو نفسه p تماماً كما أن المؤثر $\hat{x}$ في فضاء الإحداثيات هو x. هذا يجعلنا نتسائل عن تمثيل المؤثر $\hat{x}$ في فضاء كمية الحركة. للإجابة على هذا التساؤل نعود للعلاقة (3.1) لحساب القيمة المتوقعة لـ x ومنها نحاول إيجاد تمثيل المؤثر $\hat{x}$ في فضاء كمية الحركة كالتالي

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}x\,\psi^*(x)\psi(x)dx,\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dx\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)\,x\,e^{-ipx/\hbar}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\,\phi(p')e^{ip'x/\hbar}\right],\\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)e^{-ipx/\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\phi(p')e^{ip'x/\hbar},\\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\,\phi(p')\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,e^{i(p'-p)x/\hbar}}_{2\pi\hbar\delta(p'-p)}.
\end{aligned}$$

لننتهي إلى أن

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}dp\,\phi^*(p)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\phi(p), \tag{3.40}$$

أي أننا مثلنا المؤثر $\hat{x}$ في فضاء كمية الحركة بـ $i\hbar\partial/\partial p$ تماماً كما مثلنا مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ في فضاء الإحداثيات بـ $-i\hbar\partial/\partial x$.

نستنتج من أعلاه أن الدالة $\phi(p)$ هي دالة موجية في فضاء كمية الحركة، لذلك فإن $|\phi(p)|^2dp$ تعطي الإحتمالية لكي نجد الجسيم عند كمية حركة بين p و $p+dp$. إن إعتماد الدالة $\phi(p,t)$ على الزمن لايغير العلاقات العلاقات المشتقة أعلاه و لا يغير شرط المعايرة و لا شرط الإحتمالية السابق. إذاً $|\phi(p,t)|^2dp$ تعطي الإحتمالية لكي نجد الجسيم عند كمية حركة بين p و $p+dp$ عند زمن t.

ملاحظة: خطأ شائع في مفهوم الإحتمالية و كثافة الإحتمالية. $|\phi(p,t)|^2$ هي كثافة إحتمالية و $|\phi(p,t)|^2dp$ هي إحتمالية. هذا ينطبق أيضاً على الدالة ψ.

3.6 علاقات التبديل Commutation relations

رأينا سابقاً إن الكميات الفيزيائية و المتغيرات الديناميكية يعبر عنها بمؤثرات. إن شكل تمثيل المؤثر يعتمد على الفضاء الذي نعرفه فيه، كما هو الحال للمؤثر $\hat{x}$ و الذي يكون x في فضاء الإحداثيات أو يصبح مؤثر تفاضلي $i\hbar\partial/\partial p$ في فضاء كمية الحركة. كذلك الحال مع مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ و الذي يكون تفاضلياً $-i\hbar\partial/\partial x$ في فضاء الإحداثيات و p في فضاء كمية الحركة.

على الرغم من أن المؤثرات هي أداة رياضية تنسخ الدالة التي تؤثر عليها إلى دالة أخرى و تستعمل لحساب الكميات الفيزيائية في ميكانيكا الكم إلا إن عملياً لها مغزى فيزيائي كبيرا جداً. فعلى سبيل المثال المؤثر في المختبر هو أداة القياس الخارجية و التي يقوم الفيزيائي بإستخدامها للتأثير على التجربة لقياس كمية فيزيائية ما. كأن نؤثر على الذرة مثلاً بمجالات كهرومغناطيسية لدراسة أثر زيمان أو أثر ستارك. هذه المجالات الكهرومغناطيسية تعتبر مؤثرات لأن النظام المجهري يتفاعل معها و يحدث له تغيرات كرد فعل لأثرها. كذلك إرسال فوتون ليتشتت على إلكترون لقياس موقعه أو كمية حركته يعتبر مؤثراً حيث نتيجة لذلك يتغير موقع و كمية حركة الإلكترون بسبب هذا المؤثر.

من المهم ذكره هنا إن قياس موقع جسيم ثم قياس كمية حركته يختلف تماماً فيما لو قسنا كمية الحركة أولاً ثم الموقع. السبب يعود إلى أن قياس الموقع x عند زمن t يتضمن تغير كمية الحركة عن كمية الحركة الإبتدائية p عند t وذلك بسببين، أولاً: بسبب تشتت الجسيم لدى قياس موقعه، و ثانياً: بفعل عامل الزمن و الذي تعتمد عليه الكميات الفيزيائية غير المحفوظة. كذلك الحال عند قياس كمية الحركة أولاً فإن الموقع يتغير عن الموقع الإبتدائي بسبب تشتت الجسيم و بسبب عامل الزمن.

بكلمة أخرى نقول عن مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ و مؤثر الإحداثيات $\hat{x}$ بأنهما مؤثرين غير متزامنين القياس non-simultaneous operators لأن قياس أحدهما عند زمن معين يتضمن تغير الآخر عند ذلك الزمن، لذلك عملية القياس غير إبدالية non-commute measurement. لذلك لايمكن أن يقاسا بدقة في آن واحد. لاحظ أيضاً أن هذا يتفق تماماً مع مبدأ هايزنبرج لعدم اليقين في العلاقة (2.28). رياضياً نعبر عن هذه الحقيقة كالتالي $\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$.

بشكل عام -و على عكس الأرقام و الدوال القياسية- فإن المؤثرات ليست دائماً إبدالية commute. فلو كان هناك مؤثر $\hat{A}$ و مؤثر $\hat{B}$ فإن $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. نعرف علاقة التبديل commutation relation للمؤثر $\hat{A}$ و المؤثر $\hat{B}$ كالتالي

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{3.41}$$

لذلك نقول أنه إذا كان المؤثر $\hat{A}$ و المؤثر $\hat{B}$ غير متزامنين non-simultaneous operators فإن $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$، أي أنه لايمكن قياسهم بدقة بشكل متزامن، أو مؤثرين مترابطين، أي أحدهما يتأثر بحدوث الآخر، و العكس.

من التعريف (3.41) يمكن إستنباط بعض أهم خصائص علاقات التبديل

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{A}^n] &= 0, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \\
[\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}], \\
[a\hat{A}, b\hat{B}] &= ab[\hat{A}, \hat{B}], \\
[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \\
[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}], \\
[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= 0.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

في العلاقة الثالثة a و b ثوابت. العلاقة السادسة تسمى متساوية جاكوبي Jacobi identity.

قد تكون علاقة التبديل $[\hat{x},\hat{p}]$ اول ما يتبادر لذهن القاريء. لحساب هذه العلاقة في فضاء الإحداثيات في بعد واحد، نفترض أن $[\hat{x},\hat{p}]$ تؤثر على الدالة الموجية ψ كالتالي

$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}]\psi &= \hat{x}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{x}\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi\right), \\ &= -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\psi + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}.\end{aligned}$$

لنكتب أن

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \tag{3.43}$$

و الذي يتفق مع نقاشنا في بداية المقطع في إعتبار المؤثرين $\hat{x}$ و $\hat{p}$ غير إبداليين أو مؤثرين لايمكن قياسهم بشكل متزامن ولايمكن التنبأ بقيمهما المتوقعة أو المميزة عند نفس اللحظة، مما يتفق مع مبدأ عدم اليقين لهايزنبرج.

سؤال (3.8): أثبت علاقة التبديل (3.43) بإستخدام الدالة الموجية في فضاء كمية الحركة $\phi(p)$. ♢

لنعتبر الآن الحالة الخاصة للمؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ عندما يكونان إبداليين. نُعَبر عن هذه الحالة رياضياً بأن نكتب $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ أو

$$[\hat{A},\hat{B}] = 0. \tag{3.44}$$

في هذه الحالة نقول أن $\hat{A}$ و $\hat{B}$ مؤثرين مستقلين independent operators (لا يؤثر قياس أحدهما على قياس الآخر) أو مؤثرين متزامنين simultaneous operators (يمكن قياسهما في زمنٍ واحد) و بالتالي يمكن قياس كمياتهما الفيزيائية بدقة و في آن واحد. هذا يعني أن المؤثرات الإبدالية لها نفس الدالة المميزة أو نفس مجموعة الدوال المميزة.

إذاً نضع النظرية التالية: الشرط اللازم والكافي لأن تكون للمؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ دالة مميزة متزامنة simultaneous eigenfunction أو دالة مميزة مشتركة في أن واحد هو أن يحققا معادلة (3.44). يمكن إثبات هذه النظرية رياضياً عن طريق التناقض contradiction و ذلك بفرض أن ψ هي دالة مميزة للمؤثر $\hat{A}$ بقيمة مميزة a، و بنفس الوقت نعتبر ψ هي دالة مميزة للمؤثر $\hat{B}$ بقيمة مميزة b، ثم نتحقق من إستيفاء أو تناقض المؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ للشرط (3.44) كنتيجة لهذا الفرض. لعمل ذلك نعبر عن الفرضين رياضياً كالتالي

$$\hat{A}\psi = a\psi, \tag{3.45}$$

و

$$\hat{B}\psi = b\psi. \tag{3.46}$$

بالتأثير على علاقة الفرض (3.45) بـ $\hat{B}$ (من جهة اليسار إلى اليمين) و بنفس الطريقة نقوم بالتأثير على علاقة الفرض (3.46) بـ $\hat{A}$، لنحصل على

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}a\psi = a\hat{B}\psi = ab\psi, \tag{3.47}$$

و

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}b\psi = b\hat{A}\psi = ba\psi. \tag{3.48}$$

بما أن $ab = ba$، فعند طرح (3.47) من (3.48) نحصل على

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = (ab - ba)\psi = 0,$$

بما أن $\psi \neq 0$ فهذا يعني أن $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$، مما يحقق الشرط (3.44). إذاً لا تناقض، مما يثبت صحة النظرية. فقط ملاحظة، أثناء البرهان إعتبرنا المؤثرات لا تعمل على الثوابت. هذا عموماً صحيح إذا كانت المؤثرات خطية. سنرى لاحقاً أن شرط الخطية linearity مطلب أساسي للمؤثرات المُعْتَمَدة في ميكانيكا الكم.

3.7 المؤثرات الهيرميشية Hermitian operators

في ميكانيكا الكم نسمي الفضاء التي تعرف فيه المؤثرات بفضاء هلبرت Hilbert space. و هو فضاء مركب complex plane و أعم من الفضاء الإقليدي لأن جبر المتجهات في مستوى بعدين أو في ثلاث أبعاد يمكن أن يعمم إلى الفضاءات غير المتناهية البعد. كذلك تتميز الفضاءات المركبة بمرونة أكبر بتمثيل ابعاد الدوال المميزة.

إن وجود الأعداد المركبة و العدد التخيلي i في تمثيل المؤثرات -على سبيل المثال المؤثر الهاميلتوني (3.12) ومؤثر كمية الحركة (3.4)- و الدوال الموجية، يثير تساؤل فيما يتعلق بالقيمة المتوقعة هل هي حقيقية أم لا؟ بالطبع يجب أن تكون القيمة المتوقعة حقيقية لأنها قيمة مُقَاسة عملياً. من المستحيل عملياً قياس أية قيمة مركبة. من هنا نشترط لأي مؤثر في ميكانيكا الكم يجب أن تكون قيمته المتوقعة دائماً و عند أي زمن حقيقية. تسمى هذه المؤثرات بالمؤثرات الهيرميشية.

رياضياً، لأي مؤثر $\hat{A}$ يكفي أن نعتبره هيرميشي إذا تحقق الشرط التالي و عند أي زمن

$$\langle A\rangle = \langle A\rangle^*. \tag{3.49}$$

يمكن التحقق من إستيفاء مؤثر كمية الحركة للشرط (3.49) بحساب التالي

$$\langle p\rangle - \langle p\rangle^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) dx - \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) dx\right]^*.$$

بشكل عام لدى أخذ المرافق conjugate نقوم بعكس الترتيب، أي ان $(AB)^* = B^*A^*$ و بالتالي فإن

$$\left[\psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]^* = \left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^* (\psi^*)^* = i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi,$$

و بالتالي فإن

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle - \langle p\rangle^* &= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx - i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi dx, \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right) dx, \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\psi\right) dx.
\end{aligned}$$

بإستخدام التعريف (2.33) و الشرط (2.35)، نحصل على

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle - \langle p\rangle^* &= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial P(x,t)}{\partial x}dx = -i\hbar\, P(x,t)\big|_{-\infty}^{+\infty}, \\
&= -i\hbar\left[\lim_{x\to\infty} P(x,t) - \lim_{x\to-\infty} P(x,t)\right] = 0.
\end{aligned}$$

النتيجة أعلاه تنطبق أيضاً فيما لو كانت الدالة الموجية ψ دورية، على دورة مقدارها L بحيث أن

$$\psi(x) = \psi(x+L),$$

فإننا نختصر الفضاء لدورة واحدة فقط، لنحصل على

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle - \langle p\rangle^* &= -i\hbar\int_0^L \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\psi\right) dx = -i\hbar\,|\psi(x,t)|^2\big|_0^L, \\
&= -i\hbar\left[|\psi(L,t)|^2 - |\psi(0,t)|^2\right] = 0.
\end{aligned}$$

من أعلاه نستنتج أن مؤثر كمية الحركة (3.4) مؤثر هيرميشي لأن قيمه المتوقعة تستوفي الشرط (3.49).

سؤال (3.9): إعتبر الدالة $\psi(\theta)$ للمتغير θ محددة في الفترة $-\pi \leq \theta \leq \pi$. إذا كانت الدوال الموجية تحقق الشرط $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$، أثبت أن المؤثر $\hat{L} = -i\hbar\partial/\partial\theta$ مؤثر هيرميشي. $\diamondsuit$

3.8 المؤثرات الخطية Linear operators

ذكرنا سابقاً أن المعادلة الموجية للجسيمات يجب أن تكون خطية لتحقيق مبدأ التراكب. و لدى حصولنا على معادلة شرودنجر للجسيم الحر (2.30) أو للجسيم تحت تأثير جهد (3.13) ذكرنا أن معادلة شرودنجر خطية أي أنه إذا وجد حلين مستقلين ψ_1 و ψ_2 فإن المجموع الخطي لهما أي $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ أيضاً حل لمعادلة شرودنجر. هنا α_1 و α_2 ثوابت مركبة. و بالتالي فهي تحقق مبدأ التراكب الخطي.

لكن بشكل مختصر يمكن القول أن المؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ مؤثر خطي. و عندها نعيد صياغة الخطية بالقول أنه إذا وجد لـ $\hat{H}$ دالتين مميزتين مستقلتين ψ_1 و ψ_2 فإن المجموع الخطي لهما أي $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ أيضاً دالة مميزة لـ$\hat{H}$. في هذه الحال α_1 و α_2 تتعدى كونها مجرد ثوابت عشوائية مركبة لتمثل $|\alpha_1|^2$ أو $|\alpha_2|^2$ إحتمالية الحصول على القيم المميزة E_1 أو E_2، على الترتيب، لدى إجراء قياس لطاقة النظام.

بطبيعة الحال و من أجل التعميم فإن ميكانيكا الكم لاتشمل فقط حل معادلة شرودنجر، بل حل أي معادلة مميزة على الشكل $\hat{Q}\psi_q = q\psi_q$ حيث $\hat{Q}$ تمثل المؤثر الذي يمثل المتغير الديناميكي Q (قد يكون كمية حركة، طاقة حركة، عزم زاوي مداري ... إلخ)، ψ_q تمثل حل المعادلة المميزة و تسمى الدالة المميزة للمؤثر $\hat{Q}$، و q تمثل القيمة المميزة. لاحظ إننا إستخدمنا الدالة المميزة ψ_q عوضاً عن ψ للدلالة على إنها دالة مميزة للمؤثر $\hat{Q}$ و الذي يمثل المتغير الديناميكي Q.

قد يوجد للمعادلة المميزة أكثر من حل مستقل. لو نظرنا على سبيل المثال لمعادلة شرودنجر المميزة و المستقلة عن الزمن (3.19) نجد أنها من الرتبة الثانية، أي يوجد لها حلين مستقلين، أو بكلمة اخرى دالتين مميزتين مستقلتين، مجموعهما الخطي ايضاً دالة مميزة للمؤثر الهاميلتوني. لنفترض أن للمؤثر $\hat{Q}$ دالتين مميزتين ψ_{q_1} و ψ_{q_2} بقيمتين مميزتين q_1 و q_2، على الترتيب، بحيث أن

$$\hat{Q}\psi_{q_1} = q_1\psi_{q_1}; \qquad \hat{Q}\psi_{q_2} = q_2\psi_{q_2}. \tag{3.50}$$

فإذا كان المجموع الخطي للدالتين المميزتين $a_1\psi_{q_1} + a_2\psi_{q_2}$، حيث a_1 و a_2 ثوابت عشوائية مركبة، هي أيضاً دالة مميزة للمؤثر $\hat{Q}$ نقول عندئذ أن المؤثر $\hat{Q}$ خطي، أي أن

$$\hat{Q}\left(a_1\psi_{q_1} + a_2\psi_{q_2}\right) = a_1\hat{Q}\psi_{q_1} + a_2\hat{Q}\psi_{q_2}, \tag{3.51}$$

و بذلك يتحقق مبدأ التراكب. إن جميع المؤثرات في ميكانيكا الكم يجب أن تكون خطية و ذلك لتحقيق مبدأ التراكب الخطي بالإضافة إلى الشرط السابق و هو أن تكون المؤثرات هيرميشية للحصول على قيم مميزة و متوقعة حقيقية. من الجدير بالذكر أنه في المعادلتين المميزتين (3.50) إذا تساوت القيم المميزة $q_1 = q_2$ حيث أن $\psi_{q_1} \neq \psi_{q_2}$ فإن هذا يسمى إنحلال أو تفسخ (بعض المراجع تستخدم مصطلح الحطوط) degeneracy. بمعنى آخر نعرف الإنحلال بأنه حالتين مستقلتين لهما نفس القيمة المميزة. سوف نناقش هذا لاحقاً بتفصيل أكثر لاحقاً.

إن شرط الخطية (3.51) يمكن أن يكتب على شكل شرطين منفصلين و بشكل رياضي عام لأي مؤثر $\hat{O}$ التالي

$$\hat{O}\left[f_1(x) + f_2(x)\right] = \hat{O}f_1(x) + \hat{O}f_2(x); \quad \hat{O}\left[cf(x)\right] = c\hat{O}f(x), \tag{3.52}$$

حيث أن المعامل c ثابت. إذا حقق المؤثر $\hat{O}$ الشرطان في (3.52)، عندها نقول أن المؤثر $\hat{O}$ خطي.

سؤال (3.10): أي من المؤثرات التالية خطية:

1. $\hat{O}f(x) = f(x) + x^2$
2. $\hat{O}f(x) = [f(x)]^2$
3. $\hat{O}f(x) = f(2x^3 + 1)$
4. $\hat{O}f(x) = \left[\frac{df(x)}{dx}\right]^2$
5. $\hat{O}f(x) = \frac{df(x)}{dx} - 2f(x)$
6. $\hat{O}f(x) = \lambda f(x)$

يكفي أن يخالف المؤثر شرط واحد من الشرطين (3.52) ليتم إستبعاده. $\diamondsuit$

3.9 علاقات التمام و التعامدات العيارية
Completeness relations and orthonormality

تُصنَّف علاقات التمام و التعامدات العيارية على إنها من السمات الهامة للفضاءات الكاملة. إن الفضاء الكامل المراد به هنا هو فضاء المؤثر و الذي يختلف عن، ولكن قد يعتمد على، الفضاء الأقليدي الذي يتواجد فيه النظام و الذي فيه نستخرج طيف المؤثر. إن فضاء المؤثر يكون في بعض الأحيان أوسع من الفضاء الأقليدي، لذلك سنوظف فضاء هلبرت Hilbert space لدراسة فضاء المؤثرات. كما ذكرنا لاحقاً يتميز فضاء هلبرت بأنه فضاء ضرب داخلي و يعتبر تعميم للفضاء الإقليدي لأن الجبر الخطي فيه يمكن أن يمتد إلى أبعاد لامتناهية غير ان الفضاء الإقليدي يمتد إلى ثلاثة أبعاد فقط.

سنقوم بتعميم نقاشنا السابق في القسم (3.4) ليشمل جميع المؤثرات الهيرميشية و الخطية. لكن سنُحَدْ قياسنا في هذا القسم عند بعد واحد من فضاء الإحداثيات و عند زمن إبتدائي $t = 0$، أو سنعتبر النظام في حالة إتزان و لا يتغير مع الزمن. و بالتالي سيعتمد متغيرات النظام على x فقط. هذا بالطبع لايعني أن نتائجنا خاصة، بل على العكس هي عامة و الفكرة نفسها تبقى حقيقة بذاتها بغض النظر عن البعد و الزمن. العلاقات و النتائج المُستنبطة يمكن أن تُمَد بسهولة لأي بعد في الفضاء و عند أي زمن فيما لو حُدد الإعتماد على الزمن للمتغيرات الديناميكية المُمَثلة بالمؤثرات الهيرميشية الخطية.

لو عرفنا المؤثر الخطي الهيرميشي $\hat{Q}$ في فضاء هلبرت على N بُعْد، حيث N تنتمي لمجموعة الأعداد الصحيحة integer number، فإن لهذا المؤثر مجموعة مستقلة خطياً و متعامدة من الدوال المميزة عددها N تكتب على الشكل $\left\{\psi_{q_i}\right\}_{i=1}^{N}$ و مجموعة من القيم المميزة عددها على الأكثر N تكتب على الشكل $\{q_i\}_{i=1}^{N}$ بحيث أن المعادلة المميزة تصبح

$$\hat{Q}\psi_{q_i} = q_i\psi_{q_i}; \qquad i = 1, 2, \ldots, N. \tag{3.53}$$

إن القول أن مجموعة الدوال المميزة مستقلة خطياً يقصد به رياضياً أنه إذا كان المجموع الخطي

$$a_1\psi_{q_1} + a_2\psi_{q_2} + \cdots + a_N\psi_{q_N} = 0,$$

يحدث إذا و إذا فقط كانت

$$a_1 = a_2 = \cdots = a_N = 0.$$

بالمقابل، إن القول أن مجموعة الدوال المميزة متعامدة يقصد به رياضياً أن

$$\int \psi^*_{q_i}\psi_{q_j}\,dx = \delta_{ij}, \tag{3.54}$$

حيث أن δ_{ij} تسمى كرونكر دلتا Kronecker delta المعطاة في العلاقة (3.27).

إن علاقة التعامد أعلاه تعميم لشرط المعايرة (2.34) و تعني أنه كل حالة كمية مستقلة عن الحالة الأخرى. بسبب شرط الإستقلالية الخطية و التعامد فإن مجموعة الدوال المميزة $\left\{\psi_{q_i}\right\}_{i=1}^{N}$ تكون كاملة، أي إنها أساسيات يمكن أن تستخدم للتعبير عن أي دالة في الفضاء $f(x)$ تتبع نفس الشروط الحدية[1] boundary conditions لمجموعة الدوال المميزة $\left\{\psi_{q_i}\right\}_{i=1}^{N}$ و $|f(x)|^2$ قابل للتكامل على الفضاء اي أن

$$\int |f(x)|^2 dx < \infty,$$

إذاً يمكن التعبير عن الدالة $f(x)$ كالتالي

$$f(x) = \sum_j a_j \psi_{q_j}(x). \tag{3.55}$$

يمكن تحديد قيمة المعاملات $\{a_i\}_{i=1}^{N}$ بإستخدام علاقة التعامد. لو ضربنا طرفي المعادلة أعلاه بـ $\psi^*_{q_i}(x)$ نحصل على

$$\psi^*_{q_i}(x) f(x) = \sum_j a_j \psi^*_{q_i}(x) \psi_{q_j}(x),$$

نكامل الطرفين لنحصل على

$$\int \psi^*_{q_i}(x) f(x) dx = \sum_j a_j \int \psi^*_{q_i}(x) \psi_{q_j}(x) dx = \sum_j a_j \delta_{ij} = a_i.$$

إذاً تكتب أي دالة $f(x)$ كالتالي

$$f(x) = \sum_j \psi_{q_j}(x) \left[\int \psi^*_{q_j}(x) f(x) dx \right]. \tag{3.56}$$

إن الجبر أعلاه يماثل جبر المتجهات الإقليدية حيث نعتبر في الفضاء الإقليدي ثلاثي الأبعاد ثلاث وحدات متجه أساسية مستقلة خطياً و متعامدة و عليه يمكن كتابة أي متجه بالفضاء الإقليدي بمعلومية وحدات المتجه الأساسية. لهذا فإن علاقة التعامد (3.54) إحدى تمثيلات الضرب الداخلي في فضاء هلبرت. والمعامل a_i يمثل مسقط ψ_{q_i} على الدالة $f(x)$.

إذاً يمكننا كتابة الدالة الموجية الكلية التي تصف النظام الفيزيائي كمجموع خطي لجميع الدوال المميزة لنحصل على

$$\Psi(x) = \sum_j A_j \psi_{q_j}(x), \tag{3.57}$$

هنا A_j تمثل كمية الحالة ψ_{q_j} المتضمنة في الدالة الكلية Ψ أو مسقط ψ_{q_j} على الدالة Ψ، حيث نستطيع الإثبات بإستخدام علاقات التعامد (3.54) أن

$$A_j = \int \psi^*_{q_j}(x) \Psi(x) dx, \tag{3.58}$$

---

[1] لو كانت مجموعة الدوال المميزة $\left\{\psi_{q_i}\right\}_i$ تعتمد على الزمن، فإننا نقول أن الدالة f تتبع نفس الشروط الحدية و نفس الشروط الإبتدائية لمجموعة الدوال المميزة. فائدة الشروط الحدية و الإبتدائية تتجلى لدى قيامنا بإيجاد الثوابت الناتجة عن حل المعادلة المميزة (3.53).

وهي تقابل العلاقة (3.33). إن عملية الإسقاط للنظام المُقَاس و الموصوف بـ Ψ على الحالة ψ_{q_i} لدى قياسنا للكمية الفيزيائية Q و الحصول على القيمة المميزة q_i ينتج عملياً عن التفاعل بين وسيلة القياس means of measurement و بين النظام المُستَهدَف. حيث تُسْقِط وسيلة القياس النظام على الكمية التي تم قياسها بحيث لو قيس النظام مباشرة لحصلنا على نفس النتيجة.

كذلك من شرط المعايرة للدالة Ψ و من علاقات التعامد (3.54) نجد أن

$$\begin{aligned}\int \Psi^*(x)\Psi(x)dx &= 1 = \sum_{i,j} A_i^* A_j \int \psi_{q_i}^*(x)\psi_{q_j}(x)dx, \\ &= \sum_{i,j} A_i^* A_j \delta_{ij} = \sum_i |A_i|^2 ,\end{aligned}$$

أو

$$\sum_i |A_i|^2 = 1. \tag{3.59}$$

تماماً كما هو الحال في المعادلة (3.29) و المستنبطة من معادلة شرودنجر.

يمكن الآن إستخدام النتيجة (3.59) و الرجوع إلى الوراء بطريقة رياضية آخرى و الحصول على علاقة أخرى مكافئة لكمالية أو تمام مجموعة الدوال المميزة $\left\{\psi_{q_i}\right\}_{i=1}^{N}$، و تسمى علاقة الكمالية أو علاقة التمام completeness relation حيث أن

$$\begin{aligned}1 &= \sum_i |A_i|^2 = \sum_i A_i^* A_i, \\ &= \sum_i \left[\int \psi_{q_i}^*(x')\Psi(x')dx'\right]^* \int \psi_{q_i}^*(x)\Psi(x)dx,\end{aligned}$$

لكن نعلم أن

$$\left[\int \psi_{q_i}^*(x')\Psi(x')dx'\right]^* = \int \Psi^*(x')\psi_{q_i}(x')dx',$$

و بالتالي فإن

$$\begin{aligned}1 &= \sum_i A_i^* A_i = \sum_i \int \Psi^*(x')\psi_{q_i}(x')dx' \int \psi_{q_i}^*(x)\Psi(x)dx, \\ &= \iint \Psi^*(x')\left[\sum_i \psi_{q_i}(x')\psi_{q_i}^*(x)\right]\Psi(x)dx'dx.\end{aligned}$$

لكننا نعلم أن Ψ معايرة إلى الوحدة، أي أن

$$\begin{aligned}1 &= \int \Psi^*(x')\Psi(x')dx' = \int \Psi^*(x)\Psi(x)dx, \\ &= \iint \Psi^*(x')\left[\sum_i \psi_{q_i}(x')\psi_{q_i}^*(x)\right]\Psi(x)dx'dx.\end{aligned}$$

و بالتالي فإن الحالة الو حيدة التي يمكن فيها للتكامل الثنائي أن يساوي الوحدة هو أن يكون المجموع بين القوسين [ ] داخل التكامل يساوي دالة ديراك $\delta(x'-x)$، أو نكتب

$$\delta(x'-x) = \sum_i \psi_{q_i}(x')\psi_{q_i}^*(x). \tag{3.60}$$

هذه صيغة رياضية أخرى للقول أن مجموعة الدوال المميزة $\left\{\psi_{q_i}\right\}_{i=1}^{N}$ كاملة، وتسمى العلاقة (3.60) علاقة التمام completeness relation و هي تكافيء نظرية المفكوك الطيفي أو التحليل الطيفي spectral decomposition المعطاة في الصيغة (3.55) أو في الصيغة (3.57).

القيمة المتوقعة للمتغير الديناميكي Q و الذي يعبر عنه بالمؤثر الخطي الهيرميشي $\hat{Q}$ وبإستخدام العلاقة المميزة (3.53)، علاقات التعامد (3.54)، و التمثيل (3.57) نحصل على

$$\begin{aligned}\langle Q\rangle &= \int \Psi^*(x)\hat{Q}\Psi(x)dx = \sum_{i,j} A_i^* A_j \int \psi_{q_i}^*(x) q_j \psi_{q_j} dx,\\ &= \sum_{i,j} A_i^* A_j q_j \delta_{ij} = \sum_j |A_j|^2 q_j,\end{aligned}$$

لنقول أن

$$\langle Q\rangle = \sum_i |A_i|^2 q_i. \tag{3.61}$$

و التي تقابل القيمة المتوقعة للمؤثر الهاميلتوني في العلاقة (3.30). من (3.59) و (3.61) نستنتج أن $|A_i|^2$ تمثل إحتمالية إجراء أي قياس للمتغير الديناميكي Q سيُعْطِي القيمة المميزة q_i، أو تمثل دالة الإحتمالية $P(q_i)$. إذاً نكتب

$$P(q_i) = |A_i|^2 = \left|\int \psi_{q_i}^*(x)\Psi(x)dx\right|^2. \tag{3.62}$$

تماماً كما هو الحال في العلاقة (3.34) عند قياسنا لطاقة النظام. مرة أخرى نؤكد أن إجراء قياس القيمة المتوقعة الكمية Q يتم عملياً لعدد كبير من الأنظمة جُهْزت عند نفس الظروف و أجري القياس عند نفس الزمن، كل نظام سيعطي إحدى القيم المميزة المسموح بها، q_1، q_2، ...، أو q_N. و بالتالي $\langle Q\rangle$ تمثل المتوسط الحسابي لهذه القيم الناتجة عن القياس.

المناقشة أعلاه توضح أن ميكانيكا الكم بصورة عامة ليست فقط لحل معادلة شرودنجر، بل حل أي معادلة مميزة بالعلاقة (3.53) لأي متغير ديناميكي Q و الذي يعبر عنه بالمؤثر الخطي الهيرميشي $\langle Q\rangle$. إن قياس أي كمية فيزيائية و الحصول على نتيجة مسموح بها ضمن قائمة القيم المميزة يعني أن النظام أُسقط على هذه الحالة المميزة بفعل القياس نفسه، لأن الأنظمة الكمية حساسة لطبيعة إجراء القياس. إن إعادة القياس مرة أخرى على النظام ستُعْطِي بالتأكيد نفس القيمة المميزة!

3.10 معادلة شرودنجر في ثلاث أبعاد
Three dimension Schrödinger equation

إن التعميم من بعد واحد إلى ثلاث ابعاد مباشر و يبدأ من إعتبار إحداثيات الجسيم يعبر عنه بالمتجه $\mathbf{r}$ و الذي يُعْطَى من

$$\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}} + z\hat{\mathbf{k}}, \tag{3.63}$$

حيث أن $\hat{\mathbf{i}}$، $\hat{\mathbf{j}}$، و $\hat{\mathbf{k}}$ هي وحدات المتجه unit vectors في الفضاء الإقليدي. كذلك لاحظ إننا إستخدمنا الإصطلاح بكتابة المتجه بالخط الغامق bold phase للتعبير عن المتجه أي أن $\mathbf{r} \equiv \vec{r}$ و المقدار يعبر عنه بإحدى الإصطلاحات التالية $r \equiv |\mathbf{r}| \equiv |\vec{r}|$. الدالة الموجية في ثلاث أبعاد تصبح $\psi(\mathbf{r},t)$. متجه كمية الحركة يصبح

$$\mathbf{p} = p_x\hat{\mathbf{i}} + p_y\hat{\mathbf{j}} + p_z\hat{\mathbf{k}}. \tag{3.64}$$

معادلة الحزمة للجسيم الحر تصبح

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \phi(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar} d^3p. \tag{3.65}$$

بإستخدام تحويل فوريير يمكننا إثبات أن

$$\phi(\mathbf{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\psi(\mathbf{r})e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar}d^3r. \tag{3.66}$$

من أجل المعادلات التكاملية أعلاه، يمكننا أن نُمَثل و نستخدم دالة ديراك دلتا في فضاء الإحداثي ثلاثي الأبعاد كالتالي

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}d^3p, \tag{3.67}$$

وفي فضاء كمية الحركة ثلاثي الأبعاد تصبح دالة ديراك دلتا كالتالي

$$\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar}d^3r. \tag{3.68}$$

بإستخدام تمثيل المؤثرات لمتجه كمية الحركة في ثلاث أبعاد نحصل على

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &= \hat{p}_x\hat{\mathbf{i}}+\hat{p}_y\hat{\mathbf{j}}+\hat{p}_z\mathbf{k},\\ &= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\hat{\mathbf{i}}+\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\hat{\mathbf{j}}+\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)\hat{\mathbf{k}}=-i\hbar\boldsymbol{\nabla}.\end{aligned} \tag{3.69}$$

و عليه فإن مؤثر مربع كمية الحركة يصبح

$$\hat{p}^2=\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}=-\hbar^2\nabla^2, \tag{3.70}$$

لتصبح معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن في ثلاث أبعاد

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t). \tag{3.71}$$

إن كثافة الإحتمالية في ثلاث أبعاد تُعرف إذاً

$$P(\mathbf{r},t)\equiv|\psi(\mathbf{r},t)|^2, \tag{3.72}$$

و ليصبح شرط المعايرة على الفضاء

$$\int P(\mathbf{r},t)d^3r\equiv\int|\psi(\mathbf{r},t)|^2d^3r\equiv 1. \tag{3.73}$$

إن الشروط الرياضية للدالة الموجية في بعد واحد تنطبق تماماً أيضاً في حالة الثلاث ابعاد.

يمكن كذلك إثبات علاقة كثافة التيار في ثلاث ابعاد لتصبح

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r},t)\equiv\frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t)-\left(\boldsymbol{\nabla}\psi^*(\mathbf{r},t)\right)\psi(\mathbf{r},t)\right], \tag{3.74}$$

لتصبح معادلة الإستمرارية

$$\frac{\partial P(\mathbf{r},t)}{\partial t}=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r},t). \tag{3.75}$$

أي كمية فيزيائية[2] $Q(\mathbf{r},\mathbf{p})$ يعبر عنها في ميكانيكا الكم بالمؤثر $\hat{Q}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})$ بحيث أن قيمتها المتوقعة expectation value عند زمن معين t تعطى كالتالي

$$\langle Q(\mathbf{r},\mathbf{p})\rangle \equiv \int \psi^*(\mathbf{r},t)\hat{Q}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{3.76}$$

حيث أن الدالة ψ هي دالة مميزة eigenfunction للمؤثر $\hat{Q}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})$ بقيمة مميزة eigenvalue $q(\mathbf{r},\mathbf{p})$، أي أن إذا أثر $\hat{Q}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})$ على ψ نحصل على القيمة المميزة $q(\mathbf{r},\mathbf{p})$. رياضياً نكتب

$$\hat{Q}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\psi(\mathbf{r},t) = q(\mathbf{r},\mathbf{p})\psi(\mathbf{r},t) \tag{3.77}$$

لاحظ أنه كذلك يمكن إثبات أن متجه الفضاء $\mathbf{r}$ يعبر عنه في فضاء كمية الحركة ثلاثي الأبعاد بالمؤثر

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}} + z\hat{\mathbf{k}} \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\hat{\mathbf{i}} + i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}\hat{\mathbf{j}} + i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}\hat{\mathbf{k}} = i\hbar\boldsymbol{\nabla}_p\end{aligned}$$

و بالتالي يمكن حساب القيمة المتوقعة للكمية الفيزيائية $Q(\mathbf{r},\mathbf{p})$ في فضاء كمية الحركة كالتالي

$$\langle Q(\mathbf{r},\mathbf{p})\rangle \equiv \int \phi^*(\mathbf{p},t)\hat{Q}(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_p,\mathbf{p})\phi(\mathbf{p},t)d^3p$$

سؤال (3.11): بإستخدام العلاقات (3.71) إلى (3.73) و بإعتبار أن الجهد حقيقي، اثبت العلاقات (3.74) و (3.75). ♢

سؤال (3.12): أثبت أن مقدار علاقة التبديل في ثلاث أبعاد $[\mathbf{r},\mathbf{p}] = 3i\hbar$. يمكن الإستعانة بنتيجة علاقة التبديل (3.43). ♢

3.11 ملخص الفرضيات الأساسية في ميكانيكا الكم
Postulates of Quantum mechanics

إن القوائم الأساسية التي تقوم عليها نظرية الكم تكمن في ثلاث أسس: الدالة الموجية، تمثيل المتغيرات الديناميكية كمؤثرات، و أخيراً القيم المتوقعة. قبل أن نكمل يجب أن نؤكد مرة أخرى على مبدأ التقابل correspondence principle و الذي ينص على أن النتائج الكلاسيكية يجب أن تكون متضمنة كحالة خاصة من النتائج الكمية و ذلك للأعداد الكمية الكبيرة و/أو إذا إعتبرنا أن قيمة ثابت بلانك $\hbar \to 0$.

أولاً: الدالة الموجية

1. تصف الدالة الموجية ψ التطور الزمني و الإحداثي للنظام المكون من جسيم واحد عند درجات الحرية الخارجية الممكنة. (الدرجات الحرية الداخلية كالحركة المغزلية غير متضمنة في معالجتنا)

[2] إذا كانت الكمية الفيزيائية Q غير محفوظة فهي تعتمد على الزمن و تصبح دالة للزمن t و نكتب الكمية الفيزيائية بالشكل $Q(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$.

2. الدالة الموجية ψ كبيرة في الأماكن التي يتواجد فيها الجسيم بإحتمالية عالية وصغيرة في الأماكن التي تكون إحتمالية تواجد الجسيم منخفضة.

3. إن حاصل الضرب $\psi^*\psi$ يمثل كثافة الإحتمالية ضمن الفضاء المعرف به ψ.

4. لابد أن تكون كثافة الإحتمالية معايرة normalized أي أن تكامل $\psi^*\psi$ على الفضاء المعرفة عليه ψ يجب أن يعطي الوحدة.

5. حتى يتحقق شرط المعايرة لابد أن تكون الدالة الموجية قابلة للتكامل، اي يجب أن تكون متصلة و كذلك يجب أن تكون متناهية في اللانهاية. (الدوال غير المتناهية لايمكن أن تكون معايرة.)

6. لتحقيق قانون الحفظ و معادلة الإستمرارية، الدالة الموجية يجب أن تكون قابلة للإشتقاق أي يجب أن تكون ملساء و مشتقتها على الفضاء يجب أن تكون متصلة أيضاً.

ثانياً: المتغيرات الديناميكية

يعبر عن المتغيرات الديناميكية dynamical variables بمؤثرات operators تتبع الشروط التالية:

1. يجب أن تكون خطية و ذلك لتحقيق مبدأ التراكب الخطي.

2. يجب أن تكون هيرميشية hermitian حتى تكون القيم المميزة و القيم المتوقعة حقيقية دائماً كي نتمكن من قياسها عملياً.

3. لكل مؤثر في فضائه المعرف عليه مجموعة كاملة و مستقلة خطياً و متعامدة من الدوال المميزة عددها يساوي بعد فضاء المؤثر يقابلها مجموعة القيم المميزة أو اطياف المؤثر، بحيث تتبع هذه المجموعات المعادلة المميزة (3.53).

جدول (3.1) يوضح أشهر المتغيرات الديناميكية و تمثيلاتها الرياضية في بعد واحد و في ثلاث أبعاد لفضائي الإحداثيات و كمية الحركة.

جدول (3.1): أشهر المتغيرات الديناميكية و تمثيلاتها في بعد واحد و في ثلاث أبعاد.

المتغير الديناميكي	رمز المتغير	تمثيله كمؤثر في فضاء الإحداثيات	تمثيله كمؤثر في فضاء كمية الحركة	مؤثر زمني
الإحداثي في بعد واحد	x	x	$i\hbar\partial/\partial p$	لايوجد
كمية الحركة في بعد واحد	p	$-i\hbar\partial/\partial x$	p	لايوجد
الإحداثي في 3 أبعاد	$\mathbf{r}$	$\mathbf{r}$	$i\hbar\boldsymbol{\nabla}_p$	لايوجد
كمية الحركة في 3 أبعاد	$\mathbf{p}$	$-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$	$\mathbf{p}$	لايوجد
أي متغير ديناميكي في بعد	$Q(x,p)$	$\hat{Q}(x,-i\hbar\partial/\partial x)$	$\hat{Q}(i\hbar\partial/\partial p,p)$	لايوجد
أي متغير ديناميكي في 3 أبعاد	$Q(\mathbf{r},\mathbf{p})$	$\hat{Q}(\mathbf{r},-i\hbar\boldsymbol{\nabla})$	$\hat{Q}(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_p,\mathbf{p})$	لايوجد
معادلة هاميلتون في بعد واحد	$H(x,p)$	$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$	$\frac{p^2}{2m}+V(i\hbar\partial/\partial p)$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
معادلة هاميلتون في 3 ابعاد	$H(\mathbf{r},\mathbf{p})$	$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})$	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(i\hbar\boldsymbol{\nabla}_p)$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

ثالثاً: القيم المتوقعة

لأي كمية فيزيائية أو متغير ديناميكي Q يعبر عنه بمؤثر خطي و هيرميشي $\hat{Q}$ فإن القيمة المتوقعة $\langle Q \rangle$ تمثل المتوسط الحسابي لقياسات Q لعدد كبير من التجارب أو الأنظمة، أعدت جميعها سوياً عند نفس الظروف و بنفس الشروط الإبتدائية و أخذت القياسات عند نفس الزمن.

رياضياً و بشكل معمم في ثلاث أبعاد تحسب القيمة المتوقعة $\langle Q \rangle$ بإستخدام العلاقة (3.76). إذا كان بُعْد فضاء المتغير الديناميكي Q هو N، فإن لمُؤَثِرَه الخطي الهيرميشي مجموعة مستقلة و متعامدة و كاملة من الدوال المميزة $\left\{\psi_{q_i}\right\}_{i=1}^{N}$ و مجموعة من القيم المميزة $\{q_i\}_{i=1}^{N}$ و التي تقابل قيم المتغير الديناميكي للحالات المسموح له بها. الدالة الكلية للنظام Ψ ستكون المجموع الخطي للدوال المميزة كما في العلاقة (3.57)، كل حد له سعة A_i تُعْطى من (3.58)، بحيث أن:

1. نتيجة قياس الكمية الفيزيائية المُلاحظة observable Q ستُعْطي إحدى القيم المميزة المسموح بها، q_1، q_2، ...، أو q_N.

2. إحتمالية أن نحصل على القيمة المميزة q_i هي $|A_i|^2$ و التي تُعْطى في العلاقة (3.62).

3. بعد القياس مباشرة لإحدى الأنظمة المشمولة بالقياس من التجميع الذي لدينا و الذي أعطى، على سبيل المثال القيمة المميزة q_i، فإن القياس أسقط هذا النظام بالتحديد على الحالة ψ_{q_i}. أي إعادة للقياس لهذا النظام سيُعْطي مؤكداً نفس النتيجة.

4. إذاكان للنظام حالة واحدة مسموح بها، فإن النظام و بالتالي المتغير الديناميكي لايعتمد على الزمن و يكون في حالة إتزان.

3.12 أسئلة و تمارين

سؤال (3.13): لديك المؤثرات التالية:
(أ) $O_1\psi(x) = x^3\psi(x)$ (ب) $O_2\psi(x) = x(d/dx)\psi(x)$ (ج) $O_3\psi(x) = \lambda\psi^*(x)$ (د) $O_4\psi(x) = e^{\psi(x)}$ (هـ) $O_5\psi(x) = [d\psi(x)/dx] + a$ (و) $O_6\psi(x) = \int_{-\infty}^{x} x'\psi(x')dx'$
أي من المؤثرات المذكورة أعلاه خطية؟ ♢

سؤال (3.14): لديك مسألة المعادلة المميزة التالية

$$O_6\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

أوجد حل المعادلة المميزة أعلاه و أوجد القيم الممكنة لـ λ للحصول على دالة مميزة مربعها قابل للتكامل. ♢

سؤال (3.15): إحسب علاقات التبديل التالية $[O_1, O_2]$ و $[O_2, O_6]$ بإستخدام التعريف المعطى في (3.41). ♢

سؤال (3.16): وجد عملياً أن الديوترون (نواة نظير الهيدروجين) في حالته الأرضية (لاتوجد حالة إثارة للديوترون) خليط بين حالتين كميتين. حيث يقضي الديوترون 96% في حالة S (أي ان العزم الزاوي المداري $l = 0$) و يقضي 4% في حالة D (العزم الزاوي المداري $l = 2$). وعليه نكتب الدالة الموجية الكلية Ψ للديوترون كالتالي

$$\Psi = A_S\psi_S + A_D\psi_D$$

حيث أن الدوال الجزئية ψ_S و ψ_D مستقلة و متعامدة. A_S و A_D ثوابت مركبة تمثلان سعات حالة S و D على الترتيب.

أ- ماهي القيم العددية لـ $|A_S|^2$ و $|A_D|^2$؟

ب- أثبت أن الدالة الموجية الكلية Ψ معايرة.

ج- أوجد تعبير رياضي لحساب قيمتي السعة A_S و A_D.

د- لو فرضنا جدلاً أن $\Psi = 0$، فما هي قيمة كل من A_S و A_D و لماذا؟ $\diamondsuit$

سؤال (3.17): في السؤال السابق إذا كان المؤثر الهاميلتوني للديوترون $\hat{H}$ يؤثر على الدوال الجزئية ψ_S و ψ_D حسب المعادلات المميزة التالية

$$\hat{H}\psi_S = E_S\psi_S; \qquad \hat{H}\psi_D = E_D\psi_D,$$

حيث E_S و E_D هما القيم المميزة للطاقة لحالات S و D على الترتيب. إحسب القيمة المتوقعة $\langle H\rangle$ للديوترون. و أكتب الدالة الموجية الكلية للديوترون بشكلها المعتمد على الزمن. $\diamondsuit$

سؤال (3.18): أثبت علاقة التحويل التالية للمؤثر x:

$$e^{i\hat{p}a/\hbar}xe^{-i\hat{p}a/\hbar} = x + a.$$

لاحظ أن المؤثرات الأسية يمكن أن تفك كالتالي:

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\hat{A}^n}{n!},$$

حيث $\hat{A}$ هو مؤثر. $\diamondsuit$

سؤال (3.19): لديك الحزمة الموجية الجاوسية غير المعتمدة على الزمن تعطى كالتالي:

$$\psi(x) = Ne^{-\alpha x^2},$$

حيث N و α ثوابت حقيقية. إحسب مايلي:

أ- قيمة ثابت المعايرة N.

ب- القيم المتوقعة $\langle x\rangle$ و $\langle x^2\rangle$.

ج- التفاوت في حساب الإحداثيات Δx.

د- الدالة $\phi(p)$ بإستخدام تحويل فوريير (2.27).

ه- القيم المتوقعة $\langle p\rangle$ و $\langle p^2\rangle$.

و- التفاوت في حساب كمية الحركة Δp.

ز- إحسب قيمة $\Delta x\Delta p$ و أستنتج إن أمكن قيمة α حتى يتفق الناتج مع مبدأ هايزنبرج.

(إستخدم التكامل (C.15) للحصول على الحلول مباشرة) $\diamondsuit$

4

تطبيقات ميكانيكا الكم في بعد واحد Applications in one dimension

4.1 جسيم في بئر لانهائي Particle in infinite well

نعتبر جسيم محصور في جهد مُعَرَّف على بعد واحد كالتالي

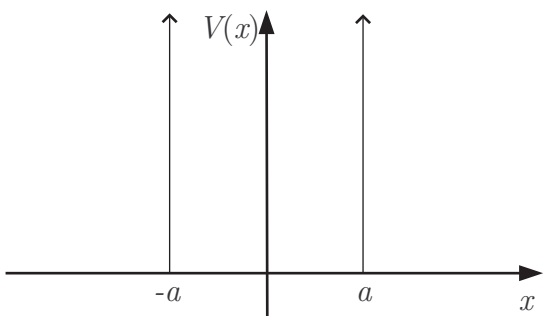
$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a < x < a \\ \infty & elswhere \end{cases}$$

إن الدالة الموجية ψ لايمكن أن تتواجد خارج نطاق $(-a, a)$ حيث أن الجهد لانهائي وبذلك تعتبر هذه منطقة محظورة على الجسيم. لذلك لانهتم إلا في المنطقة التي تقع بين $(-a, a)$ حيث تُعْطى معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن كالتالي

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

أو يمكن أن تكتب على الشكل التالي

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \tag{4.1}$$



شكل (4.1): جهد البئر اللانهائي في بعد واحد. الجهد عند a و $-a$ يؤول إلى مالانهاية.

حيث أن

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{4.2}$$

رياضياً حل المعادلة أعلاه يتمثل في الموجة المستوية، أي أن

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}. \tag{4.3}$$

إن حل المعادلة المستوية سيكون مفيداً في حالة جسيم حر معرف على الفضاء $x \in (-\infty, \infty)$ بالرغم من أن معايرة الدالة المستوية على الفضاء $(-\infty, \infty)$ لا تعطي قيم معرفة. فلو أردنا معايرة الدالة $\psi = A\exp(ikx)$ سنجد أن

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik'x} e^{ikx} dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = 2\pi A^2 \delta(k-k').$$

لكن في حالة جسيم محصور بين نقطتين، كما هو الحال في جهد البئر اللانهائي، فإنه يوجد شروط حدية يجب تطبيقها على الدالة الموجية و لايمكن تطبيقها على حل الموجة المستوية. بما أن حل الموجة المستوية (4.3) يمكن أن يكتب كمجموع دوال جيبية كما في معادلة أويلر $e^{\pm ikx} = \cos(kx) \pm i\sin(x)$، فإننا نستعيض عن حل الموجة المستوية بحل الدوال الجيبية، لنحصل على

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx. \tag{4.4}$$

لاحظ أن معادلة (4.4) تكافيء معادلة (4.3) إذا إعتبرنا أن $A = C_1 + C_2$ و $B = i(C_1 - C_2)$.

بتطبيق الشروط الحدية للدالة الموجية، أي أن $\psi(a) = \psi(-a) = 0$ و التي تعني أن الدالة الموجية و بالتالي الجسيم لايتواجد إلا في داخل منطقة الجهد $-a < x < a$ ، نحصل على

$$A\cos ka + B\sin ka = 0, \tag{4.5}$$

و

$$A\cos ka - B\sin ka = 0. \tag{4.6}$$

المعادلتان (4.5) و (4.6) صحيحتان في الحالات $A = 0$ أو $B = 0$ أو كلاً من $A = B = 0$. الأخير لايمثل حلاً فيزيائياً البتة، لأن معنى إختفاء السعات $A = B = 0$ أنه لايوجد جسيم محصور داخل الجهد. وهذا يخالف الفرض الإبتدائي اساساً. لذلك نأخذ الحالتين إما $A = 0$ أو $B = 0$.

في حالة أن $A = 0$، فإننا نبقى مع الحل الفردي و الذي سنرمز له بالرمز (-). أي أن

$$\psi^{(-)}(x) = B\sin kx. \tag{4.7}$$

و بتطبيق الشروط الحدية من إختفاء الدالة الموجية عند حدود الجهد نحصل على

$$\psi^{(-)}(x = \pm a) = 0 \quad \Rightarrow \quad \sin ka = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = n\pi,$$

حيث أن $n = 1, 2, 3, \ldots$. لاحظ أنه لايوجد معنى فيزيائي للحالة $n = 0$ بالرغم من أنها رياضياً تتفق مع الشروط الحدية. من العلاقة (4.2)، نحصل على طاقة الحلول الفردية و التي تُعطى كالتالي

$$E_n^{(-)} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}; \;\; n = 1, 2, \cdots. \tag{4.8}$$

يمكننا إيجاد قيمة الثابت B من شرط المعايرة للحل الفردي (4.7)، أي

$$\int_{-a}^{a} \psi^{(-)*}(x)\psi^{(-)}(x)dx = 1 = B^2 \int_{-a}^{a} \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx,$$

بإستخدام العلاقة المثلثية $\sin^2\theta = \frac{1}{2}(1-\cos 2\theta)$ نحصل على

$$\int_{-a}^{a} \psi^{(-)*}(x)\psi^{(-)}(x)dx = \frac{B^2}{2}\left[\int_{-a}^{a} dx - \int_{-a}^{a} \cos\frac{2n\pi x}{a}dx\right] = B^2 a = 1,$$

تكامل الحد الثاني في الطرف الأيمن دائماً يساوي صفر. و بالتالي فإن ثابت المعايرة B يصبح

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

ليصبح الحل الفردي (4.7) في صورته المعايرة كالتالي

$$\psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x. \tag{4.9}$$

من الجدير بالإهتمام حساب التكامل التالي

$$\int_{-a}^{a} \psi_m^{(-)*}(x)\psi_n^{(-)}(x)dx = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx,$$

لاحظ التكامل أعلاه في الطرف الأيمن لدالتين جيبيتين على دورة كاملة لهما. إن حل تكامل الطرف الأيمن بشكل عام يعطى

$$\int_{-a}^{a} \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx = \frac{a}{\pi}\left(\frac{\sin(m-n)\pi}{m-n} - \frac{\sin(m+n)\pi}{m+n}\right),$$

الحد الثاني من الطرف الأيمن دائماً صفر مادامت m و n أعداد صحيحة حيث أن $m, n > 0$. لهذا يصبح التكامل

$$\int_{-a}^{a} \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx = a\frac{\sin(m-n)\pi}{(m-n)\pi},$$

لاحظ عندما $n = m$ فإن الطرف الأيمن يساوي a لأننا نعلم أن $\lim_{x\to 0}\sin x/x = 1$. بينما لو كانت $n \neq m$ فإن الطرف الأيمن يساوي صفر. بعبارة أخرى يمكن أن نكتب

$$\frac{\sin(m-n)\pi}{(m-n)\pi} = \delta_{mn},$$

و بالتالي يصبح التكامل

$$\int_{-a}^{a} \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx = a\delta_{mn},$$

و منه نحصل على

$$\int_{-a}^{a} \psi_m^{(-)*}(x)\psi_n^{(-)}(x)dx = \delta_{mn}, \tag{4.10}$$

والذي يؤكد علاقة التعامد للحلول الفردية. لهذا فإنه لدينا مجموعة لانهائية من الحلول الفردية $\{\psi_n^{(-)}\}_{n=1}^{n=\infty}$ المستقلة و المتعامدة و الكاملة في مجموعة الدوال الفردية. أي أن أية دالة فردية يمكن أن يعبر عنها بدلالة مجموعة الحلول الفردية $\{\psi_n^{(-)}\}_{n=1}^{n=\infty}$. إن هذه المجموعة تتبع المعادلة المميزة للمؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ و الذي يعطى بالعلاقة (4.1)، بحيث أن

$$\hat{H}\psi_n^{(-)} = E_n^{(-)}\psi_n^{(-)}, \tag{4.11}$$

حيث أن طاقة الحل الفردي $E_n^{(-)}$ تعطى من العلاقة (4.8).

في حالة أن $B = 0$، فإننا نبقى مع الحل الزوجي و الذي سنرمز له بالرمز (+). أي أن

$$\psi^{(+)}(x) = A\cos kx, \tag{4.12}$$

و بتطبيق الشروط الحدية من إختفاء الدالة الموجية عند حدود الجهد نحصل على

$$\psi^{(+)}(x = \pm a) = 0 \quad \Rightarrow \quad \cos ka = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = (n - \frac{1}{2})\pi,$$

حيث أن $n = 1, 2, 3, \ldots$. من العلاقة (4.2)، نحصل على طاقة الحلول الزوجية و التي تعطى كالتالي

$$E_n^{(+)} = \frac{(n - \frac{1}{2})^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}; \;\; n = 1, 2, \cdots . \tag{4.13}$$

يمكننا إيجاد قيمة الثابت A من شرط المعايرة للحل الزوجي (4.12)، أي

$$\int_{-a}^{a} \psi^{(+)*}(x)\psi^{(+)}(x)dx = 1 = A^2 \int_{-a}^{a} \cos^2 \frac{(n - \frac{1}{2})\pi}{a} x dx.$$

بإستخدام العلاقة المثلثية $\cos^2\theta = \frac{1}{2}(1 + \cos 2\theta)$ نحصل على

$$\int_{-a}^{a} \psi^{(+)*}(x)\psi^{(+)}(x)dx = \frac{A^2}{2}\left[\int_{-a}^{a} dx + \int_{-a}^{a} \cos\frac{(n-1)\pi x}{a} dx\right] = A^2 a = 1.$$

تكامل الحد الثاني في الطرف الأيمن دائماً يساوي صفر. و بالتالي فإن ثابت المعايرة A يصبح

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

ليصبح الحل الزوجي (4.12) في صورته المعايرة كالتالي

$$\psi_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\frac{(n - \frac{1}{2})\pi}{a} x. \tag{4.14}$$

من الجدير بالإهتمام حساب التكامل التالي

$$\int_{-a}^{a} \psi_m^{(+)*}(x)\psi_n^{(+)}(x)dx = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \cos\frac{(m - \frac{1}{2})\pi x}{a} \cos\frac{(n - \frac{1}{2})\pi x}{a} dx.$$

لاحظ مرة أخرى أن التكامل أعلاه في الطرف الأيمن لدالتين جيبيتين على دورة كاملة لهما. إن حل تكامل الطرف الأيمن بشكل عام يعطى

$$\int_{-a}^{a} \cos\frac{(m - \frac{1}{2})\pi x}{a} \cos\frac{(n - \frac{1}{2})\pi x}{a} dx = \frac{a}{\pi}\left(\frac{\sin(m-n)\pi}{m-n} + \frac{\sin(m+n-1)\pi}{m+n-1}\right),$$

الحد الثاني في الطرف الأيمن دائماً صفر مادام m و n أعداد صحيحة و $m + n > 1$. لهذا، يصبح التكامل أعلاه

$$\int_{-a}^{a} \cos\frac{(m - \frac{1}{2})\pi x}{a} \cos\frac{(n - \frac{1}{2})\pi x}{a} dx = a\frac{\sin(m-n)\pi}{(m-n)\pi} = a\delta mn,$$

كما هو الحال في نقاشنا السابق. وبالتالي نحصل على علاقة التعامد

$$\int_{-a}^{a} \psi_m^{(+)*}(x)\psi_n^{(+)}(x)dx = \delta_{mn}, \tag{4.15}$$

والذي يؤكد علاقة التعامد للحلول الزوجية أيضاً. لهذا فإنه لدينا مجموعة لانهائية من الحلول الزوجية $\{\psi_n^{(+)}\}_{n=1}^{n=\infty}$ المستقلة و المتعامدة و الكاملة في مجموعة الدوال الزوجية. أي أن أية دالة زوجية يمكن أن يعبر عنها بدلالة مجموعة الحلول الزوجية $\{\psi_n^{(+)}\}_{n=1}^{n=\infty}$. إن هذه المجموعة تتبع المعادلة المميزة للمؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ و الذي يعطى بالعلاقة (4.1)، بحيث أن

$$\hat{H}\psi_n^{(+)} = E_n^{(+)}\psi_n^{(+)}, \tag{4.16}$$

حيث أن طاقة الحل الزوجي $E_n^{(+)}$ تعطى من العلاقة (4.13).

لاحظ بأننا لم نصف مجموعة الحلول الفردية $\{\psi_n^{(-)}\}_{n=1}^{n=\infty}$ أو الزوجية $\{\psi_n^{(+)}\}_{n=1}^{n=\infty}$ على حدة بأنها كاملة لأي دالة. بل قلنا أنها مستقلة و متعامدة و كاملة للدوال الفردية أو الزوجية، على الترتيب. لكن إتحاد مجموعتي الحلول الفردية و الزوجية $\{\psi_n^{(+)}\}_{n=1}^{n=\infty} \cup \{\psi_n^{(-)}\}_{n=1}^{n=\infty}$ (متحدتين) مستقلة و متعامدة و كاملة لأي دالة. لذلك أي دالة في فضاء البعد الواحد يمكن كتابتها كمجموع خطي للحلول الفردية و الزوجية ($\sin$ و $\cos$) كما هو معروف من متسلسلة فوريير.

سؤال (4.1): أثبت أن أي دالة $f(x)$ يمكن أن تكتب بمعلومية مجموعة الحلول الفردية $\{\psi_n^{(-)}\}_{n=1}^{n=\infty}$ إذا و إذا فقط كانت فردية. هذا ينطبق أيضاً مع الحالة الثانية، إذا كانت $f(x)$ زوجية. $\diamondsuit$

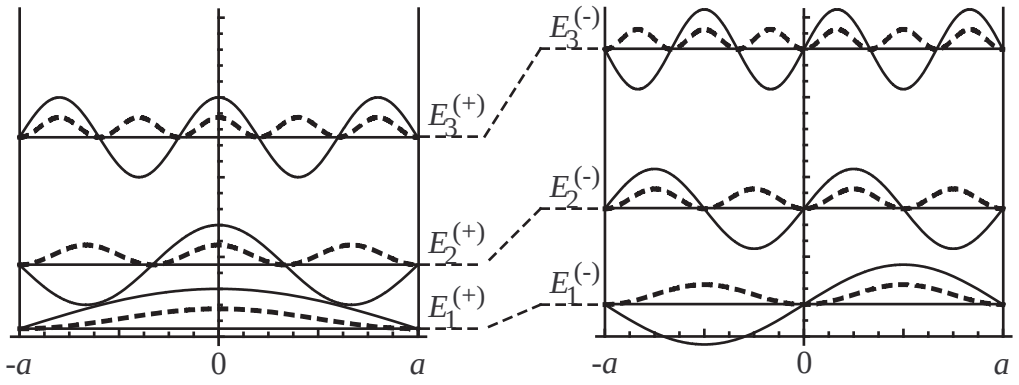
لدى مقارنة طاقة الحل الفردي (4.8) عند حالة كمية ما n مع طاقة الحل الزوجي (4.13) عند نفس الحالة الكمية نجد أن $E_n^{(+)} < E_n^{(-)}$. إن الإزاحات النسبية لمستويات الطاقة للحلول الفردية و الحلول الزوجية موضحة في الشكل (4.2). لاحظ أن مستويات الطاقة الزوجية مزاحة إلى أسفل مقارنة مع ما يقابلها من مستويات الطاقة الفردية. كذلك من اللافت للنظر في الشكل أن فجوة الطاقة energy gap بين مستويين متتابعين تزداد كلما زاد العدد الكمي. لو عرفنا فجوة الطاقة energy gap ΔE_n كالتالي

$$\Delta E_n = E_n - E_{n-1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}(n-\beta),$$

حيث $\beta = 1/2$ للحلول الفردية و $\beta = 1$ للحلول الزوجية. ΔE_n تزداد خطياً مع n. هذا مقبول فيزيائياً لأن الجهد لانهائي، لذلك فإن الجسيم يصل إلى رتب عليا من حالات الإثارة لدى حصوله على طاقات كبيرة جداً تؤول بإضطراد إلى ملانهاية كلما زادت رتبة العدد الكمي. حتى نفهم سبب الإختلاف في الإزاحات النسبية لمستويات الطاقة للحلول الفردية و الزوجية يجب إختبار الدوال الموجية للحلين الفردي و الزوجي (4.9) و (4.14) على الترتيب. شكل (4.2) يقارن بين شكل الدوال الزوجية و الفردية عند نفس أبعاد الجهد. لاحظ أن الجهد للحلول الزوجية يحصر أعداد موجية أقل مقارنة مع الحلول الفردية. هذا يؤدي إلى أن الدوال الزوجية أقل ذبذبة من الدوال الفردية و بالتالي هي أقل طاقة.

سؤال (4.2): سؤال: لماذا يظهر في الشكل (4.2) أن القيم العظمى لكثافة الإحتمالية $|\psi_n|^2$ (الخط المتقطع) أقل منها للدوال المميزة ψ_n؟ $\diamondsuit$

يجب أن نتذكر أن النظام يختار إما الحل الفردي أو الحل الزوجي، و إنه لايمكن الجمع بينهما بأي حال من الأحوال. لنعتبر أن سعة الحل الفردي للعدد الكمي n تعطى بـ $A_n^{(-)}$ و سعة الحل الزوجي للعدد الكمي n تعطى بـ $A_n^{(+)}$. لو أخذنا $A_n^{(-)} \neq 0$ لأي قيمة ممكنة لـ n فإن جميع السعات $A_m^{(+)} = 0$ لجميع القيم الممكنة لـ m. و العكس صحيح في حالة الحل الزوجي أيضاً. السبب في وجود حلين مختلفين للنظام يعود إلى الجهد أصلاً. فالجهد لهذا النظام متناظر symmetric. لذلك فإن النظام ذو الجهد المتناظر له خيارات أكثر. فإما أن يأخذ الحل المتناظر أو عكس المتناظر. لو كان الجهد غير متناظر not symmetric (مثلاً إذا إعتبرنا أن الجسيم محصور بين $0 < x < 2a$ بدلاً عن $-a < x < a$) سنجد أن النظام يأخذ فقط الحل الفردي عكس المتناظر.



(*a*) (*b*)

شكل (4.2): الإزاحات النسبية لمستويات الطاقة و القيم المميزة لـ (*a*) الحلول الزوجية و (*b*) الحلول الفردية للحالات الكمية: $n = 1, 2, 3$ لجسيم في جهد لانهائي لهما نفس الأبعاد. لاحظ أن مستويات الطاقة الزوجية أقل منها للفردية. كذلك لاحظ أن فجوة الطاقة بين مستويين متتابعين تزداد كلما زاد العدد الكمي. الدوال الموجية الفردية تحوي أعداد موجية أكثر مقارنة مع الدوال الزوجية و بالتالي تغير الدالة الموجية الفردية أكبر منه للدالة الزوجية. المنحنى المتقطع يمثل كثافة الإحتمالية.

السؤال الآن أي الحلين سيأخذه النظام ذو الجهد المتناظر لدينا؟ هل هو الحل الزوجي أم الحل الفردي؟ مفتاح الجواب هو في الشروط الإبتدائية للنظام. لو أبتدأ النظام في الحل الفردي فإنه سيبقى فردياً دائماً عند أي زمن و عند أي قيمة طاقة و لأي رتبة ممكنة للعدد الكمي. بالمقابل لو أبتدأ النظام في الحل الزوجي فإنه سيبقى زوجياً دائماً عند أي زمن و عند أي قيمة طاقة و لأي رتبة ممكنة للعدد الكمي. إذاً الشروط الإبتدائية هي التي تحدد ماهية الحل الذي يأخذه النظام، لكن نوعية الحل تبقى محفوظة.

إن علاقات التعامد للحلين الفردي (4.10) و الزوجي (4.15) يمكن أن تعمم لو أثبتنا صحة التكامل التالي

$$\int_{-a}^{a} \psi_m^{(\pm)*}(x)\psi_n^{(\mp)}(x)dx = 0.$$

لإثبات صحة النتيجة أعلاه يجب ملاحظة أن التكامل محسوب على فترة التناظر symmetry interval $(-a, a)$. لاحظ أيضاً إن حاصل الدالة المكامل عليها $\psi_m^{(\pm)*}\psi_n^{(\mp)}$ هي دالة فردية دائماً. إن التكامل على أي فترة تناظر لأي دالة فردية يعطي دائماً صفر. نتذكر دائماً أن التكامل المحدود بين نقطيتين لأي دالة هي المساحة المحصورة بين الدالة و محور المتغيرات المستقلة (محور السينات). للدوال الفردية، هذه المساحة تتراوح بين القيم السالبة و الموجبة ليكون مجموعها صفر. إذاً يمكننا أن نعمم و نقول أن

$$\int_{-a}^{a} \psi_m^{(\pi)*}(x)\psi_n^{(\pi')}(x)dx = \delta_{mn}\delta_{\pi\pi'}, \tag{4.17}$$

حيث أن $\pi = +, -$، إعتبرنا هنا أن لزوجية الحل أو فرديته عدد كمي هو π يطلق عليه العدد الكمي للتماثل أو الباريتي parity quantum number.العلاقة (4.17) إذاً تعميم لتشمل الحلول الزوجية و الفردية على عددين كميين لرتبة الطاقة و التماثل parity.

نملك الآن معلومات وافية عن فيزياء النظام. يبقى لنا حساب القيم المتوقعة لبعض المتغيرات الديناميكية الأساسية و إختبارها لإستنباط المزيد من المعاني الفيزيائية. أول ما يتبادر بالذهن طبعاً هو حساب $\langle x \rangle$ كما هو معطى من (3.1)، لنحصل على

$$\langle x \rangle = \int_{-a}^{a} x \left|\psi_n^{(\pm)}(x)\right|^2 dx.$$

مرة أخرى نتسخدم التناظر لحل هذا التكامل. لاحظ أن $|\psi_n^{(\pm)}|^2$ دالة زوجية دائماً، و بالتالي فإن الدالة المكامل عليها $x|\psi_n^{(\pm)}|^2$ في فترة التناظر هي دالة فردية. لهذا فإن نتيجة التكامل صفر. إذاً

$$\langle x\rangle = 0,$$

هذا لايعني فقط أن الجسيم يمضي معظم و قته عند نقطة الأصل. بل يعني أيضاً أن الجسيم داخل الجهد ليس له أفضلية في إختيار الموقع حول نقطة الأصل في بعد واحد. الجسيم يمكن أن يتواجد إلى يمين نقطة الأصل (نقطة $+x$) بنفس الإحتمالية التي يتواجد فيها إلى يسار نقطة الأصل (نقطة $-x$). لذلك فإن المحصلة هي صفر. السبب في تناظر الإحتمالية للموقع يعود، كما ذكرنا سابقاً، إلى زوجية كثافة الإحتمالية. حيث أن $|\psi_n^{(\pm)}(-x)|^2 = |\psi_n^{(\pm)}(x)|^2$.

أما لو أردنا معلومات عن الموقع المفضل للجسيم، فيجب حساب $\langle x^2\rangle$، والذي يُعَّطى من

$$\left\langle x^2\right\rangle = \int_{-a}^{a} x^2 \left|\psi_n^{(\pm)}(x)\right|^2 dx.$$

نلاحظ أن الدالة المكامل عليها في فترة التناظر هي دالة زوجية، لذلك التكامل لايحل بإستخدام التناظر symmetry argument. كذلك يجب أن نعتبر الحل الفردي أو الزوجي كلاً على حدة. سنقوم بحل التكامل للحل الفردي الآن، ويترك التكامل للحل الزوجي كتمرين للقارئ. من العلاقة (4.9) نحصل على

$$\left\langle x^2\right\rangle^{(-)} = \int_{-a}^{a} x^2 \left|\psi_n^{(-)}(x)\right|^2 dx = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} x^2 \sin^2\frac{n\pi x}{a} dx.$$

بإستخدام العلاقات المثلثية نحصل على

$$\left\langle x^2\right\rangle^{(-)} = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} x^2(1-\cos\frac{2n\pi x}{a})dx = \frac{1}{2a}\left(\int_{-a}^{a} x^2 dx - \int_{-a}^{a} x^2\cos\frac{2n\pi x}{a}dx\right),$$

التكامل الأول في الطرف الأيمن سهل و يساوي $\frac{2}{3}a^3$. لكن التكامل الثاني هو الأصعب. لنفترض أن

$$\alpha = \frac{2n\pi}{a},$$

وبالتالي التكامل الثاني يصبح

$$\begin{aligned}\int_{-a}^{a} x^2\cos\frac{2n\pi x}{a}dx &= \int_{-a}^{a} x^2\cos\alpha x dx = -\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\int_{-a}^{a}\cos\alpha x dx,\\ &= -\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\left(\frac{1}{\alpha}\sin\alpha x\right)\Big|_{x=-a}^{x=+a} = -2\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\left(\frac{1}{\alpha}\sin\alpha a\right).\end{aligned}$$

سيكون من السابق لأوانه التعويض عن قيمة α في النتيجة أعلاه. يجب اولاً أخذ الإشتقاق ثم التعويض عن قيمة α في نهاية المطاف. بإجراء التفاضلات على α نحصل على

$$\begin{aligned}\int_{-a}^{a} x^2\cos\frac{2n\pi x}{a}dx &= -2\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{-1}{\alpha^2}\sin\alpha a + \frac{a}{\alpha}\cos\alpha a\right),\\ &= -2\left(\frac{2}{\alpha^3}\sin\alpha a - \frac{a}{\alpha^2}\cos\alpha a - \frac{a}{\alpha^2}\cos\alpha a - \frac{a^2}{\alpha}\sin\alpha a\right),\\ &= 2\left((\frac{a^2}{\alpha} - \frac{2}{\alpha^3})\sin\alpha a + \frac{2a}{\alpha^2}\cos\alpha a\right),\\ &= 2\left((\frac{a^2}{\alpha} - \frac{2}{\alpha^3})\sin 2n\pi + \frac{2a}{\alpha^2}\cos 2n\pi\right),\end{aligned}$$

حيث تم التعويض عن $\alpha = 2n\pi/a$ في الخطوة الأخيرة. بما أن n صحيحة فإن $\sin 2n\pi = 0$ و $\cos 2n\pi = 1$. لهذا نحصل على

$$\int_{-a}^{a} x^2 \cos\frac{2n\pi x}{a} dx = \frac{4a}{\alpha^2} = \frac{a^3}{n^2\pi^2}.$$

بالتعويض إذا نحصل على

$$\left\langle x^2 \right\rangle^{(-)} = \frac{1}{2a}\left(\int_{-a}^{a} x^2 dx - \int_{-a}^{a} x^2 \cos\frac{2n\pi x}{a} dx\right) = \frac{1}{2a}\left(\frac{2}{3}a^3 - \frac{a^3}{n^2\pi^2}\right).$$

لنكتب في نهاية المطاف

$$\left\langle x^2 \right\rangle^{(-)} = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right).$$

بنفس الطريقة السابقة تقريباً يمكن حساب $\langle x^2\rangle^{(+)}$، و التي تساوي

$$\left\langle x^2 \right\rangle^{(+)} = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n-\frac{1}{2})^2\pi^2}\right).$$

عند الطاقات المرتفعة (الرتب العليا للعدد الكمي n) يقضي الجسيم معظم الوقت حول النقطتين $\pm 0.57735a = \pm a/\sqrt{3}$.

يمكننا حساب القيمة المتوقعة لكمية الحركة بإستخدام علاقة (3.3) لنحصل على

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_{-a}^{a} \psi_n^{(\pm)*}(x)\frac{d}{dx}\psi_n^{(\pm)}(x)dx.$$

لكننا نعلم أن التفاضل يعكس التماثل parity للدالة الموجية في هذا النظام، أي أن

$$\frac{d}{dx}\psi_n^{(\pm)}(x) \propto \psi_n^{(\mp)}(x),$$

و بالتالي فإن

$$\langle p\rangle \propto \int_{-a}^{a} \psi_n^{(\pm)*}(x)\psi_n^{(\mp)}(x)dx = 0.$$

كما ذكرنا سابقاً لأن الدالة المكامل عليها أصبحت فردية على فترة تناظر. لاحظ أن موثر كمية الحركة نفسه في العلاقة (3.4) فردي، بسبب وجود x في المقام. لهذا نقول أن

$$\langle p\rangle = 0,$$

هذا لايعني أن الجسيم في حالة سكون، ولايمكن أصلاً أن يكون هذا الجسيم في حالة سكون لأنه تحت تأثير جهد و بالتالي هناك محصلة قوى تؤثر على هذا الجسيم. حقيقة أن $\langle p\rangle = 0$ تعني أن الجسيم داخل الجهد ليس له أفضلية في الإتجاه في بعد واحد. الجسيم ينتقل إلى اليمين (إتجاه $+x$) بنفس الإحتمالية التي ينتقل فيها إلى اليسار (إتجاه $-x$). بما أن p كمية متجهة، لذلك فإن محصلة الإتجاه هي صفر. لمعرفة مقدار كمية حركة الجسيم داخل الجهد تحتاج أن نحسب أولاً $\langle p^2\rangle$ ، والتي تساوي

$$\langle p^2\rangle = -\hbar^2\int_{-a}^{a} \psi_n^{(\pm)*}(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi_n^{(\pm)}(x)dx,$$

لكن المؤثر التفاضلي داخل التكامل يرتبط بالمؤثر الهاميلتوني للنظام، أي أن

$$-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} = 2m\hat{H}.$$

إذاً بإستخدام هذه المساواة و بتوظيف علاقات (4.11) و (4.16)، نحصل على

$$\langle p^2\rangle = 2m\int_{-a}^{a}\psi_n^{(\pm)*}(x)\hat{H}\psi_n^{(\pm)}(x)dx = 2m\int_{-a}^{a}\psi_n^{(\pm)*}(x)E_n^{(\pm)}\psi_n^{(\pm)}(x)dx,$$

لننتهي إلى أن

$$\langle p^2\rangle = 2mE_n^{(\pm)}.$$

للتأكد من مطابقة نتائجنا مع مبدأ هايزنبرج نحسب الإنحراف في قياس الموقع و كمية الحركة بإستخدام العلاقات

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2},$$

و

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}.$$

سنجد أن

$$\Delta x\Delta p = \hbar\begin{cases}\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{3}-\frac{1}{2}}, & \text{odd solution.}\\ \sqrt{\frac{(n-\frac{1}{2})^2\pi^2}{3}-\frac{1}{2}}, & \text{even solution.}\end{cases}$$

من الواضح أن أقل قيمة للـ $\Delta x\Delta p$ تحدث عندما $n=1$، حيث نجد أن القيمة هي $1.67\hbar$ و $0.57\hbar$ للحل الفردي و الزوجي على الترتيب. كلا القيمتين أكبر من $\hbar/2$ في إتفاق مع مبدأ هايزنبرج. لاحظ أن عدم التأكد في الحل الفردي أكبر منه للزوجي، لماذا؟

4.2 تطبيقات على نظرية المفكوك الطيفي
Applications of spectral expansion theory

أي حزمة موجية إبتدائية (عند $t=0$) $\Psi(x)$ تتبع الشرط الحدي $\Psi(-a)=\Psi(a)$ يمكن أن يعبر عنها بإستخدام الحل الفردي و الزوجي للجسيم في بئر لانهائي بإستخدام الجمع الخطي لجميع الحلول الممكنة للفئتين من الحلول، أي أن

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty}\left[A_n^{(+)}\psi_n^{(+)}(x) + A_n^{(-)}\psi_n^{(-)}(x)\right],$$

حيث هنا السعات $\{A_n^{(\pm)}\}_{n=1}^{\infty}$ تمثل مساقط الحل الزوجي أو الفردي. إذا بدأت الحزمة $\Psi(x)$ كدالة زوجية في x فإن جميع السعات $\{A_n^{(-)}\}_{n=1}^{\infty}$ يجب أن تختفي. و العكس أيضاً صحيح إذا بدأت الحزمة $\Psi(x)$ كدالة فردية في x. حيث أن الحلان الزوجي و الفردي لايجتمعان. بكلام آخر الحزمة $\Psi(x)$ إما زوجية أو فردية. يمكن حساب التطور الزمني للحزمة $\Psi(x)$ بإستخدام العلاقة (3.25)، لنحصل على

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left[A_n^{(+)}\psi_n^{(+)}(x)e^{-iE_n^{(+)}t/\hbar} + A_n^{(-)}\psi_n^{(-)}(x)e^{-iE_n^{(-)}t/\hbar}\right]. \tag{4.18}$$

يمكننا كتابة الحزمة (4.18) بشكل موسع و صريح كالتالي

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sum_{n=1}^{\infty}\left[A_n^{(+)}e^{-i\frac{(n-\frac{1}{2})^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\cos\frac{(n-\frac{1}{2})\pi}{a}x + A_n^{(-)}e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\sin\frac{n\pi}{a}x\right],$$

أو بإختصار شديد، و بإستخدام التعميم على التماثل parity نكتب

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\pi=-}^{+}A_n^{(\pi)}\psi_n^{(\pi)}(x)e^{-iE_n^{(\pi)}t/\hbar}. \tag{4.19}$$

لنفحص شرط المعايرة للدالة أعلاه

$$\int_{-a}^{a}\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)dx=\sum_{n,\pi}\sum_{m,\pi'}A_m^{(\pi')*}A_n^{(\pi)}e^{-i(E_n^{(\pi)}-E_m^{(\pi')})t/\hbar}\int_{-a}^{a}\psi_m^{(\pi')*}(x)\psi_n^{(\pi)}(x)dx,$$

بإستخدام علاقة التعامد (4.17) نحصل على

$$\int_{-a}^{a}\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)dx=\sum_{n,\pi}\sum_{m,\pi'}A_m^{(\pi')*}A_n^{(\pi)}e^{-i(E_n^{(\pi)}-E_m^{(\pi')})t/\hbar}\delta_{mn}\delta_{\pi\pi'}=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\pi=-}^{+}\left|A_n^{(\pi)}\right|^2.$$

بإعتبار أن الدالة $\Psi(x,t)$ معايرة نحصل على

$$\int_{-a}^{a}\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)dx=\sum_{n=1}^{\infty}\left(\left|A_n^{(-)}\right|^2+\left|A_n^{(+)}\right|^2\right)=1. \tag{4.20}$$

لو حسبنا القيمة المتوقعة للطاقة نجد أن

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \int_{-a}^{a}\Psi(x,t)^*\hat{H}\Psi(x,t)dx,\\ &= \sum_{n,\pi}\sum_{m,\pi'}A_m^{(\pi')*}A_n^{(\pi)}e^{-i(E_n^{(\pi)}-E_m^{(\pi')})t/\hbar}\int_{-a}^{a}\psi_m^{(\pi')*}(x)\hat{H}\psi_n^{(\pi)}(x)dx.\end{aligned}$$

بإستخدام العلاقة (4.11) للحل الفردي و العلاقة (4.16) للحل الزوجي مع تطبيق علاقة التعامد (4.17) نحصل على

$$\langle H\rangle=\sum_{n,\pi}\sum_{m,\pi'}A_m^{(\pi')*}A_n^{(\pi)}e^{-i(E_n^{(\pi)}-E_m^{(\pi')})t/\hbar}E_n^{(\pi)}\delta_{mn}\delta_{\pi\pi'}=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\pi=-}^{+}E_n^{(\pi)}\left|A_n^{(\pi)}\right|^2.$$

لنصل إلى أن

$$\langle H\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\left(E_n^{(-)}\left|A_n^{(-)}\right|^2+E_n^{(+)}\left|A_n^{(+)}\right|^2\right). \tag{4.21}$$

إن العلاقة (4.20) و (4.21) تذكرنا بالعلاقات (3.29) و (3.30) و الذي يجعلنا نفسر المقدار $\left|A_n^{(\pm)}\right|^2$ على إنه يمثل إحتمالية إجراء قياس الطاقة لحالة النظام الموصوف بالدالة Ψ يعطي القيمة $E_n^{(\pm)}$. يمكننا أن نبين أن $A_n^{(\pm)}$ هي مسقط الدالة المميزة eigenfunction $\psi_n^{(\pm)}$ على الحالة Ψ، بعبارة أخرى و بإستخدام علاقات التعامد يمكننا إثبات أن

$$A_n^{(\pm)}=\int_{-a}^{a}\psi_n^{(\pm)*}(x)\Psi(x,t)dx, \tag{4.22}$$

و بالتالي فإن إحتمالية قياس الطاقة $E_n^{(\pm)}$ يصبح

$$P(E_n^{(\pm)})=\left|A_n^{(\pm)}\right|^2=\left|\int_{-a}^{a}\psi_n^{(\pm)*}(x)\Psi(x,t)dx\right|^2. \tag{4.23}$$

سؤال (4.3): عند أي قيمة لـ $A_n^{(\pi)}$ قياسات الطاقة تعطي دائماً القيمة $E_k^{(+)}$، حيث أن k عدد ما صحيح؟ ماهي الحالة التي تصف النظام؟ و ما هي قيمة $\left|A_k^{(+)}\right|^2$ في هذه الحالة؟ أعطي 6 أمثلة عددية مركبة يمكن أن تمثل قيم $A_k^{(+)}$. ♢

4.3 التماثل The parity

ناقشنا سابقاً إن للجهد المتناظر و بالتالي للهاميلتونيان المتناظر حل فردي (-) أو حل زوجي (+) لـ x. فإذا بدأنا بحزمة موجية $\Psi(x,t)$ فردية في x فإن جميع السعات $A_n^{(+)}$ تختفي و بالتالي تبقى الحزمة $\Psi(x,t)$ فردية طوال الوقت. و العكس صحيح فيما إذا بدأنا بحزمة $\Psi(x,t)$ زوجية. إن زوجية أو فردية الدالة يطلق عليه تماثل الدالة the parity. نجد أنه لأي جهد متناظر فإن تماثل الحل لا يعتمد على الزمن و بالتالي يعتبر من ثوابت الحركة constant of motion و التي تهم أي فيزيائي يبحث في تناظر النظام و إستنباط المعلومات اللازمة عنه.

لنعرف مؤثر التماثل parity operator $\hat{\Pi}$ و التي تكون قاعدة تأثيره على أي دالة هو عكس x إلى $-x$. لأي حزمة $\psi(x)$ تحت تأثير $\hat{\Pi}$ نحصل على

$$\hat{\Pi}\psi(x) = \psi(-x). \tag{4.24}$$

للحزم الزوجية فإن

$$\hat{\Pi}\psi^{(+)}(x) = \psi^{(+)}(x), \tag{4.25}$$

بينما للحزم الفردية فإن

$$\hat{\Pi}\psi^{(-)}(x) = -\psi^{(-)}(x). \tag{4.26}$$

المعادلات (4.25) و (4.26) تعتبر معادلات مميزة و الحزم الزوجية و الفردية هي دوال مميزة لموثر التماثل parity operator $\hat{\Pi}$ لقيم مميزة $+1$ للدوال الزوجية و -1 للدوال الفردية. إن مجموعة الدوال المميزة eigenfunction group $\psi_n^{(\pm)}$ لجسيم في بئر لانهائي ليست فقط دوال مميزة للمؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ كما في (4.11) و (4.16) بل في نفس الوقت هي دوال مميزة لمؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ أيضاً.

إن مؤثر التماثل the parity operator $\hat{\Pi}$ ينتمي إلى مايسمى بزمرة المؤثرات الإسقاطية projection operators- و التي تتميز بأن التأثير الثاني لهذه المؤثرات يلغي التأثير الأول. في حالة مؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ فإن

$$\hat{\Pi}^2\psi(x) = \psi(x), \tag{4.27}$$

لأن حدوث إنعكاسين يُرجع قيمة x إلى x و لايُحْدِث أي تغير.

إن مؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ هو مؤثر خطي و هيرميشي و لأي مؤثر هيرميشي فإن دواله المميزة كاملة. لهذا فإن أي دالة $\psi(x)$ يمكن التعبير عنها بإستخدام الدوال المميزة لمؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ و بالتالي يمكن أن نكتب $\psi(x)$ على الشكل

$$\psi(x) = \underbrace{\frac{1}{2}\left[\psi(x) + \psi(-x)\right]}_{\psi^{(+)}} + \underbrace{\frac{1}{2}\left[\psi(x) - \psi(-x)\right]}_{\psi^{(-)}}. \tag{4.28}$$

سؤال (4.4): أثبت أن مؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ هيرميشي بإثبات أن $\langle\Pi\rangle$ حقيقية لأي حالة $\psi(x)$ كذلك أثبت أن المؤثر $\hat{\Pi}$ خطي. $\diamondsuit$

ذكرنا سابقاً إن حصولنا على حل فردي أو حل زوجي لجسيم في جهد لانهائي كان بسبب إختيارنا لإحداثيات الجهد بحيث يكون متناظر حول النقطة $x = 0$. بالمقابل لو أخذنا الجهد بين $0 < x < 2a$ فإننا لم نغير شيئاً في الجهد لأن أبعاده الهندسية لم تتغير. لكن الجهد الآن متناظر بالإنعكاسية حول النقطة $x = a$. هذا التناظر أقل وضوحاً. كذلك نجد أن الشروط الحدية في هذه الحالة تفرض علينا فقط حلاً واحداً ألا و هو الحل الفردي. السؤال أين أختفى الحل الزوجي في هذه الحالة؟ نقول إن التناظر غير صريح كفاية و بسبب أختفاء جزء من هذا التناظر فإن جزء من الحل لايظهر من الشروط الحدية. وعليه عند دراسة مسائل ميكانيكا الكم يجب علينا أن نختار الإحداثيات بطريقة تظهر التناظرات بشكل صريح في الهاميلتون الذي يصف النظام.

بسبب عدم إعتماد فردية أو زوجية الحزمة على الزمن فإن مؤثر التماثل نفسه لايعتمد على الزمن. من هنا فإن الدالة الزوجية في الطرف الأيمن من معادلة (4.28) يمكن أن يكتب عند أي زمن كالتالي

$$\psi^{(+)}(x,t) = \frac{1}{2}\left[\psi(x,t) + \psi(-x,t)\right] = \frac{1}{2}\left[\psi(x,t) + \hat{\Pi}\psi(x,t)\right],$$

أو نكتب

$$\psi^{(+)}(x,t) = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\Pi}\right)\psi(x,t), \tag{4.29}$$

كذلك الحال للحل الفردي عند أي زمن يمكن أن نكتب

$$\psi^{(-)}(x,t) = \frac{1}{2}\left(1 - \hat{\Pi}\right)\psi(x,t). \tag{4.30}$$

بما أن الطرف الأيسر في المعادلتين (4.29) و (4.30) هما دالتين مميزتين للمؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$، فإن الطرف الأيمن في المعادلتين (4.29) و (4.30) أيضاً دوال مميزة للمؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$. لكن الطرف الأيمن عبارة عن حدين أولهما $\psi(x,t)$ و هي دالة مميزة لـ $\hat{H}$ و ثانيهما $\hat{\Pi}\psi(x,t)$ و التي يجب أن تكون دالة مميزة لـ $\hat{H}$ حتى يصبح الطرف الأيمن دوال مميزة لـ $\hat{H}$. و بالتالي فإن

$$\begin{aligned}\hat{H}\left[\hat{\Pi}\psi(x,t)\right] &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\hat{\Pi}\psi(x,t)\right] = \hat{\Pi}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\right], \\ &= \hat{\Pi}\left[\hat{H}\psi(x,t)\right].\end{aligned}$$

لاحظ هنا $\hat{\Pi}$ و مؤثر تفاضل الزمن $\partial/\partial t$ إبداليان لأن $\hat{\Pi}$ لاتعتمد على الزمن، كما ذكرنا لاحقاً. نكتب إذاً

$$\left(\hat{H}\hat{\Pi} - \hat{\Pi}\hat{H}\right)\psi(x,t) = 0, \tag{4.31}$$

و ذلك لأي حالة ممكنة $\psi(x,t)$. هذا يعني أن المؤثرين $\hat{\Pi}$ و $\hat{H}$ إبداليين، أي أن

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0.$$

هناك زواية أخرى لفهم علاقة التبادل أعلاه كما يلي: يوجد لدينا دالتين مميزتين $\psi_n^{(\pm)}$ لـ $\hat{H}$ لأنه متناظر. تناظر $\hat{H}$ بسبب تناظر الجهد، لأحظ أن الحد الأول من $\hat{H}$ - وهو $\partial^2/\partial x^2$ - دائماً متناظر تحت تأثير الإنعكاسية. لهذا فإن $\hat{\Pi}$ لاتغير في $\hat{H}$ بسبب تناظره و بالتالي نقول إنهما إبداليين. قد يقول قائل أنه لو أن $\hat{\Pi}$ تعتمد على الزمن لما حصلنا على علاقة التبديل أعلاه! وهذه وجهة نظر صحيحة. لذلك نقول أنه بسبب إنحفاظ موثر التماثل $\hat{\Pi}$ فإنه إبدالي مع المؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$.

يمكن أن نعمم شرط الإنحفاظ أعلاه و نقول أن أي مؤثر لايعتمد على الزمن صراحة has no explicit time dependence و يكون إبدالي مع المؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ يكون محفوظ و يعتبر ثابت من ثوابت الحركة.

إذا كان الجهد يعتمد على الزمن، أي لدينا $V(x,t)$، فإن الطاقة نفسها تتغير مع الزمن و لاتكون محفوظة أو من ثوابت الحركة، كما هو الحال في الميكانيكا الكلاسيكية. لكن في هذه الحالة فإن عملية فصل المتغيرات و الحصول على معادلتي شرودنجر المميزتين، الجزء الزمني temporal part و الجزء المستقل عن الزمن time- beginL part independent ، يصبح غير ممكن في هذه الحالة.

سؤال (4.5): لجسيم حر كتلته m، أثبت أن مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ محفوظ و يعتبر ثابت من ثوابت الحركة. $\diamondsuit$

4.4 ثوابت الحركة وقوانين الحفظ
Constant of motion and conservation laws

كما وضحنا في مؤثر التماثل أنه لايعتمد على الزمن و بالتالي يكون إبدالياً مع المؤثر الهاميلتوني للنظام. وعممنا ذلك لجميع المؤثرات و التي تمثل المتغيرات الفيزيائية. لنأخذ مؤثر هاميلتوني هيرميشي و خطي $\hat{H}$ لنظام يوصف بالحزمة الموجية ψ بحيث أن

$$\hat{H}\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}.$$

لو إعتبرنا مؤثر $\hat{Q}$ يمثل الكمية الفيزيائية Q للنظام و التي لاتعتمد بشكل صريح على الزمن فإن القيمة المتوقعة $\langle Q\rangle$ تصبح

$$\langle Q\rangle = \int \psi^*(x,t)\hat{Q}\psi(x,t)dx.$$

لكن القيمة المتوقعة أعلاه قد تعتمد صراحة على الزمن. هل هذا يعني أن الكمية الفيزيائية Q غير محفوظة؟ حتى ولو كان مؤثرها إبدالي مع المؤثر الهاميلتوني؟ للوهلة الأولى يبدو أن هناك تناقض مع تعميمنا أعلاه بإعتبار أن الكميات المحفوظة يجب أن لاتعتمد على الزمن صراحة و يجب أن تكون إبدالية مع المؤثر الهاميلتوني. لكن يمكن أن نثبت العكس لو حسبنا تغير القيمة المتوقعة $\langle Q\rangle$ مع الزمن. لو فعلنا نحصل على

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \int dx\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{Q}\psi + \psi^*\hat{Q}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right),$$

لاحظ إننا إعتبرنا $dQ/dt = 0$ لأن الكمية الفيزيائية Q لاتعتمد بشكل صريح على الزمن. لكن نعلم أن

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\psi\right)^* = \frac{i}{\hbar}\psi^*\hat{H}$$

بسبب الهيرميشية فإن المرافق المركب للمؤثر $\hat{H}$ (أو ما يعرف بالمجاور adjoint) هو نفسه $\hat{H}$[1]. معدل تغير $\langle Q\rangle$ مع الزمن يصبح إذاً

$$\begin{aligned}\frac{d\langle Q\rangle}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\int dx\left(\psi^*\hat{H}\hat{Q}\psi - \psi^*\hat{Q}\hat{H}\psi\right) = \frac{i}{\hbar}\int\psi^*\left(\hat{H}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{H}\right)\psi dx,\\ &= \frac{i}{\hbar}\int\psi^*[\hat{H},\hat{Q}]\psi dx,\end{aligned}$$

أو لننتهي إلى أن

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle. \tag{4.32}$$

نلاحظ الآن أنه إذا كان $\hat{Q}$ إبدالي مع $\hat{H}$ فإن $d\langle Q\rangle/dt = 0$ نقول في هذه الحالة دون أي تردد أن $\langle Q\rangle$ محفوظة conserved و أن الكمية الفيزيائية Q من ثوابت الحركة constant of motion. لاحظ لو كانت الكمية الفيزيائية Q تعتمد على الزمن صراحة، فإن علاقة (4.32) يمكن أن تُعَمَّمْ بالتعديل التالي

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}(t)]\rangle + \left\langle\frac{\partial Q(t)}{\partial t}\right\rangle. \tag{4.33}$$

---

[1] في ميكانيكا الكم مصطلح المرافق المركب complex conjugate و الذي نرمز له بالرمز $*$ يستخدم لغير المؤثرات كالدوال الموجية و الثوابت و الأرقام كالقيم المتوقعة مثلاً. للمؤثرات فإن ما يقابل المرافق المركب يصطلح بتسميته المجاور adjoint و يرمز له بالرمز $\dagger$. لذلك نكتب $(\hat{H}\psi)^* = \psi^*\hat{H}^\dagger$. و إذا حقق المؤثر $\hat{H}$ الشرط $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ فإننا نقول بأن المؤثر ذاتي التجاور self adjoint أو هيرميشي.

سيترك للقاريء إثباتها عند إجابته للتمارين في آخر الباب.

يمكن إستخدام العلاقة (4.32) لإثبات نظرية إيرنفست Ehrenfest و ذلك بحساب $d\langle p\rangle/dt$ و الذي يصبح

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{p}]\rangle,$$

لكن

$$[\hat{H},\hat{p}] = [\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x),\hat{p}] = \frac{1}{2m}[\hat{p}^2,\hat{p}] + [V(x),\hat{p}],$$

كذلك من العلاقة الأولى لخصائص علاقات التبديل (3.42) فإن $[\hat{p}^2,\hat{p}] = 0$ أو نقول أن أي مؤثر سيكون إبدالي مع أي دالة خاصة لذلك المؤثر. نستطيع إذاً حساب $[V(x),\hat{p}]$ كالتالي

$$\begin{aligned}
[V(x),\hat{p}]\psi(x,t) &= V(x)\hat{p}\psi(x,t) - \hat{p}V(x)\psi(x,t),\\
&= -i\hbar V(x)\frac{d\psi(x,t)}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}\left(V(x)\psi(x,t)\right),\\
&= -i\hbar V(x)\frac{d\psi(x,t)}{dx} + i\hbar\frac{dV(x)}{dx}\psi(x,t) + i\hbar V(x)\frac{d\psi(x,t)}{dx},\\
&= i\hbar\frac{dV(x)}{dx}\psi(x,t).
\end{aligned}$$

أو نقول أن

$$[V(x),\hat{p}] = i\hbar\frac{dV(x)}{dx},$$

لننتهي إلى أن

$$[\hat{H},\hat{p}] = i\hbar\frac{dV(x)}{dx},$$

و لتصبح $d\langle p\rangle/dt$ تُعْطى كالتالي

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{p}]\rangle = -\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle.$$

تماماً كما هو الحال في معادلة الحركة في الميكانيكا الكلاسيكية للأنظمة المحافظة أو قانون نيوتن في شكله الكمي. للجسيم الحر (محصلة القوى تساوي صفر) فإن $dV(x)/dx = 0$ و بالتالي $[\hat{H},\hat{p}] = 0$ و $d\langle p\rangle/dt = 0$ لهذا فإن كمية الحركة تعتبر من ثوابت الحركة.

4.5 الدوال المميزة لكمية الحركة و الجسيم الحر
Momentum eigenfunctions and free particle

سبق أن ذكرنا أن ميكانيكا الكم ليست فقط حل معادلة شرودنجر و لكن بشكل عام هو حل المعادلة المميزة (3.53). وجدنا أيضاً لدى دراستنا للتماثل parity أنه يوجد مؤثرات خطية و هيرميشية من نوع آخر تسمى المؤثرات الإسقاطية و لها أيضاً معادلة مميزة، دوال مميزة وقيم مميزة. بنفس الفكرة يمكن حل المعادلة المميزة لمؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ و هو بالطبع كما أثبتنا في السابق هيرميشي و خطي. لو فرضنا أن مجموعة الدوال المميزة لمؤثر كمية الحركة لجسيم يتحرك في بعد واحد هي $\{\psi_p(x)\}_{p=-\infty}^{+\infty}$ حيث أن قيم p مستمرة (أي إننا نتحدث عن طيف مستمر لكمية الحركة). المعادلة المميزة لكمية الحركة تصبح إذاً

$$\hat{p}\psi_p(x) = p\psi_p(x), \tag{4.34}$$

بإستخدام علاقة (3.4) تصبح المعادلة المميزة بشكلها التفاضلي

$$\frac{d\psi_p(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar}\psi_p(x), \tag{4.35}$$

حلها هو الموجة المستوية

$$\psi_p(x) = Ce^{ipx/\hbar}, \tag{4.36}$$

حيث C ثابت يحسب من شرط المعايرة. القيمة المميزة eigenvlaue p يجب أن تكون حقيقية حتى تكون الدالة المميزة $\psi_p(x)$ متناهية عند $+\infty$ و $-\infty$. في كل الأحوال هذا الشرط مضمون لأن مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ هيرميشي.

بما أن طيف كمية الحركة مستمر، أي أن القيمة المميزة p تأخذ أي قيمة تقع بين $-\infty$ إلى $+\infty$، فإن شرط التعامد للدوال المميزة $\psi_p(x)$ يصبح

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{p'}(x)\psi_p(x)dx = \delta(p-p'), \tag{4.37}$$

و الذي يختلف عن ذلك الشرط في العلاقة (3.54) و المستنتج أصلاً للأطياف المتقطعة. حيث نستخدم دالة دلتا لديراك للأطياف المستمرة و دالة دلتا كرونكر للأطياف المتقطعة. من علاقة التعامد (4.37) يمكن حساب قيمة الثابت C في علاقة (4.36) كالتالي

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{p'}(x)\psi_p(x)dx = \delta(p-p') = |C|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x/\hbar}dx}_{2\pi\hbar\delta(p-p')}.$$

الإختيار المناسب لـ C يصبح

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

لتصبح الدالة المميزة (4.36) بشكلها الكامل

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}. \tag{4.38}$$

بما أن مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ هيرميشي و خطي فإن مجموعة دواله المميزة $\{\psi_p(x)\}_{p=-\infty}^{+\infty}$ تكون كاملة. يمكن إستخدام العلاقة (3.60) للتحقق من كمال هذه المجموعة، لكن عوضاً عن المجموع على p سنستخدم التكامل لأن قيم p مستمرة. إذاً

$$\begin{aligned}\int \psi^*_p(x')\psi_p(x)dp &= \int \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx'/\hbar}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}dp, \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{ip(x-x')/\hbar}dp = \delta(x-x'),\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا تمثيل دالة دلتا لديراك في (3.37). إذاً تحقيق شرط الكمالية أو التمام يعني أنه نستطيع أن نحصل على مفكوك أي دالة $\Psi(x)$ بمعلومية مجموعة الدوال المميزة لمؤثر كمية الحركة $\{\psi_p(x)\}_{p=-\infty}^{+\infty}$، أي أننا نكتب

$$\Psi(x) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} a_p\psi_p(x).$$

كما في نقاشنا سابقاً في المعادلات (3.25) و (3.30) أو المعادلات (3.57) إلى (3.62) فإن a_p تمثل مسقط $\psi_p(x)$ على $\Psi(x)$ و $|a_p|^2$ تعني إحتمالية أجراء أي قياس سيعطي كمية الحركة p. هذه النتيجة صحيحة لكنها غير دقيقة.

يجب أن نلاحظ إن طيف كمية الحركة مستمر، و بالتالي إستخدام المجموع $\sum_{p=-\infty}^{+\infty}$ سيكون غير مناسب في هذه الحالة. لذلك نستبدل المجموع بالتكامل $\int_{-\infty}^{+\infty} dp$ و ستكون السعات a_p دوال لكمية الحركة $a(p)$ لنحصل على

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(p)\psi_p(x)dp,$$

بإستخدام العلاقة (4.38) نحصل على

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(p)e^{ipx/\hbar}dp,$$

و التي يجب أن تبدو مألوفة جداً لدينا إذا تذكرنا علاقة الحزمة الموجية (2.26) عند $t = 0$، حينها نجد أن $a(p)$ تكافيء سعة الحزمة الموجية في فضاء كمية الحركة $\phi(p)$ عندها نتأكد أن $|a(p)|^2 = |\phi(p)|^2$ و التي تُعْطي كثافة الإحتمالية أن يكون للجسيم الذي يوصف بالدالة $\Psi(x)$ كمية حركة p. إذاً نكتب

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p)e^{ipx/\hbar}dp,$$

حيث أن

$$\phi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x)\Psi(x)dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx,$$

وهي تقابل تحويل فوريير المعطى في العلاقة (2.27).

لنعود الآن للجسيم الحر حيث تُعطى معادلة شرودنجر له المستقلة عن الزمن

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

أو يمكن أن تكتب على الشكل التالي

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \tag{4.39}$$

حيث أن

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{4.40}$$

وهي نفس المعادلات (4.1) إلى (4.2) لجسيم في بئر الجهد اللانهائي لكن الفرق هو أن الجسيم في الجهد اللانهائي محصور ضمن فضاء محدد $x \in (-a, a)$ لكن للجسيم الحر الفضاء هو $(-\infty, \infty)$. للجسيم الحر إذاً لايوجد شروط حدية تُفرض على النظام و بالتالي سيكون من المناسب أخذ حل الموجة المستوية e^{ikx} أو e^{-ikx} أو الجمع الخطي لهما أي

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{4.41}$$

هناك مشكلة رياضية في الدالة أعلاه و هي أن مربع قيمتها المطلقة غير قابل للتكامل أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right|^2 dx \to \infty, \tag{4.42}$$

أي أنها متباعدة diverges لجميع قيم A و B. بالرغم من ذلك للدالة مغزى فيزيائي لايمكن إهماله. فالحد الأول Ae^{ikx} يمثل موجة مستوية تنطلق بإتجاه $+x$ بكثافة إحتمالية $|A|^2$ و الحد الثاني يمثل موجة مستوية تنطلق بإتجاه $-x$ بكثافة إحتمالية مقدارها $|B|^2$. من نظرية الحزم الموجية في القسم (2.1) أعتبرنا الحزمة الموجية للجسيم الحر

في فضاء كمية الحركة جاوسية و متمركزة حول نقطة ثابتة. لو كان العرض صغيراً جداً و يؤول للصفر لأصبح توزيع جاوس دالة ديراك و الذي يعني دقة مطلقة في قياس كمية الحركة. و عليه لو أعتبرنا أن الجسيم الحر له كمية حركة محددة و يتحرك بإتجاه $+x$ بإحتمالية $|A|^2$ فإنه من المناسب أخذ

$$\phi(p) = A\sqrt{2\pi\hbar}\delta(p - \hbar k),$$

و عليه تصبح الحزمة الموجية التي تصف الجسيم الحر كالتالي

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)e^{ipx/\hbar}dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}A\sqrt{2\pi\hbar}\delta(p - \hbar k)e^{ipx/\hbar}dp = Ae^{ikx}.$$

بالمقابل لو أعتبرنا أن الجسيم الحر له كمية حركة محددة و يتحرك بإتجاه $-x$ بإحتمالية $|B|^2$ فإنه من المناسب أخذ

$$\phi(p) = B\sqrt{2\pi\hbar}\delta(p + \hbar k),$$

لنحصل على

$$\psi(x) = Be^{-ikx}.$$

من الشكل (4.2) نلاحظ أنه لدى إنتشار الحزمة الموجية و كلما تقدم الزمن فإنها تتحول تدريجياً إلى موجة مستوية.

إن المعادلة المميزة للطاقة للجسيم الحر (4.39) لها حلين مستقلين و متعامدين هو الموجة المستوية e^{ikx} أو e^{-ikx}. يمكن إثبات التعامد كالتالي

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(Be^{-ikx})^*(Ae^{ikx})dx = AB^*\int_{-\infty}^{+\infty}e^{2ikx}dx = 0,$$

و هذا مشابه إلى حد ما لإستقلالية و تعامد الحلين الذي حصلنا عليهما للجسيم المحصور في بئر الجهد اللانهائي و هما الحلين الفردي $\sin kx$ و الزوجي $\cos kx$. الفرق الهام هنا إن حلي الجسيم الحر e^{ikx} أو e^{-ikx} لهما نفس القيمة المميزة للطاقة على خلاف مالاحظنا للحلين الفردي والزوجي للجسيم المحصور في بئر الجهد حيث قيم طاقاتهما مختلفتان كما هو معطى في العلاقة (4.8) و (4.13) على الترتيب. بعبارة أخرى فإن

$$\hat{H}e^{-ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{-ikx}; \qquad \hat{H}e^{ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{ikx},$$

أي أنه لدينا دالتين مميزتين مستقلتين لهما نفس الطاقة. كما ذكرنا سابقاً، فإن الحالة التي يجود فيها دالتين مميزتين مستقلتين لهما نفس القيمة المميزة تسمى الإنحلال degeneracy أو حالات منحلة degenerate states.

السؤال الآن كيف نفرق بين الدالتين المميزتين المتحاطتين degenerate eigenfunctions e^{ikx} و e^{-ikx}؟ الجواب يأتي من كمية الحركة التي تحملها هاتين الدالتين المميزتين. أو بالأصح إتجاه كمية الحركة. الدالتين المميزتين e^{ikx} و e^{-ikx} لمؤثر الطاقة $\hat{H}$ أيضاً دالتين مميزتين (لكن بقيمتين مميزتين مختلفتين) لمؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ ، أي أن

$$\hat{p}e^{\pm ikx} = -i\hbar\frac{d}{dx}e^{\pm ikx} = \pm\hbar ke^{\pm ikx}.$$

القيمة المميزة $p = \hbar k$ تني أن كمية الحركة بإتجاه $+x$ و القيمة المميزة $p = -\hbar k$ تعني أن كمية الحركة بإتجاه $-x$.

هناك إختلاف آخر بين حل الجسيم الحر و حل الجسيم في البئر. إن حل الدالة المستوية للجسيم الحر e^{ikx} و e^{-ikx} ليس له تماثل parity أي إن e^{ikx} و e^{-ikx} ليست دوال مميزة لمؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ على عكس الحلين الفردي $\sin kx$ و الزوجي $\cos kx$ للجسيم في بئر حيث أنهما دوال مميزة لمؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ و لمؤثر الطاقة $\hat{H}$ أيضاً. لاحظ أن مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ و مؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ غير إبداليين لأن

$$\hat{\Pi}\hat{p} = -i\hbar\hat{\Pi}\frac{d}{dx} = -i\hbar\frac{d}{-dx} = -\hat{p}.$$

نلخص إذاً هذه الملاحظات الهامة في النقاط التالية

1. المؤثر الهاميلتوني للجسيم الحر $\hat{H}$ و مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ إبداليين $[\hat{H},\hat{p}]=0$ و لهما نفس الدوال المميزة e^{ikx} و e^{-ikx} أو نقول أن الدوال المميزة $e^{\pm ikx}$ متزامنة simultaneous eigenfunctions للمؤثرين $\hat{H}$ و $\hat{p}$.

2. المؤثر الهاميلتوني للجسيم في بئر $\hat{H}$ و مؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ إبداليين $[\hat{H},\hat{\Pi}]=0$ و لهما نفس الدوال المميزة $\sin kx$ و $\cos kx$ أو نقول أن الدوال المميزة $\sin kx$ و $\cos kx$ متزامنة للمؤثرين $\hat{H}$ و $\hat{\Pi}$.

3. مؤثر كمية الحركة $\hat{p}$ و مؤثر التماثل $\hat{\Pi}$ غير إبداليين $[\hat{p},\hat{\Pi}]\neq 0$ ولايوجد لهذين المؤثرين أي دوال مميزة متزامنة.

نستنتج هنا أنه من الضروري لأي مؤثريين يتزامنان بالدوال المميزة (أو دوال مميزة مشتركة لهما) أن يكونا إبداليين. هذا يتفق مع نقاشنا السابق في القسم (3.6)، حيث و جدنا أن أي مؤثرين إبداليين، كما في العلاقة (3.44)، يمكن قياس كمياتهما الفيزيائية بدقة و في آن واحد. هذا يعني أن المؤثرين الإبداليين لها نفس الدوال المميزة.

4.6 ملخص Summary

عند حصر confine جسيم في بئر لانهائي، فإن الجسيم يتصرف داخل البئر كالجسيم الحر، لكن الجهد يُحَدِّد الفضاء الذي يُعَرَّف عليه الجسيم ضمن حدود الجهد. بسبب لانهائية الجهد عند حدوده، فإن الجسيم قد يمتلك طاقة تمتد إلى مالانهاية، لكنها غير مستمرة بل مكماه (طيفها متقطع) بسبب الإرتباط كنتيجة للتفاعل مع الجهد. أيضاً لو كان الجهد متناظر فإن المؤثر الهاميلتوني نفسه يكون متناظر و بالتالي يظهر لدينا نوعين من الحلول، إحداها حلول متناظرة symmetric و الأخرى عكس متناظرة antisymmetric بحيث ان كل نوع له دواله المميزة و أطيافه المميزة. إن هذين الحلان لايجتمعان معاً للنظام، و بالتالي فإن إختيار النظام لأحدهما يعتمد على الشروط الإبتدائية و بالتالي يُحَدَّدْ تماثل parity النظام عبر هذه الشروط. إذا تم تحديد إحدى الحلول فإن النظام يحدد إحدى قيم التماثل الخاصة به و لن يتغير هذا التماثل مع الزمن.

لهذا أمكن إعتبار التماثل خاصية لتحديد طاقة النظام و أعطي له عدد كمي تمثل القيم المميزة للتماثل و بالتالي أُعتُبر أن هناك مؤثراً خطياً و هيرميشياً للتماثل يتميز عن باقي المؤثرات كونه مؤثر إسقاطي projection operator له خاصية الرسوخ idempotent property. وجد أن مؤثر التماثل إبدالي مع المؤثر الهاميلتوني مما يعني تشاركه معه بالدوال المميزة، و يؤكد على تناظر المؤثر الهاميلتوني. بالإضافة إلى ذلك فإن إنحفاظ مؤثر الباريتي مع الزمن إقترح أن المؤثرات التي تكون إبدالية مع المؤثر الهاميلتوني تكون من ثوابت الحركة، الأمر الذي تم تعميمه بإثباته رياضياً.

إن مجموعة الدوال المميزة لمؤثر كمية الحركة الهرميشي و الخطي هي مجموعة الموجات المستوية plane wave. لكن علاقات التعامد العيارية لها تختلف عن العلاقات التعامد العيارية السابقة كون طيف كمية الحركة مستمراً. للجسيم الحر، كمية الحركة تكون ثابتة، وبالتالي فإن مؤثر كمية الحركة يصبح إبدالي مع المؤثر الهاميلتوني، مما يعني أن مجموعة الموجات المستوية هي أيضاً دوال مميزة للمؤثر الهاميلتوني، لكن لحالات متحاطة أو متفسخة degenerate بسبب تساوي الطاقة للحركة بالإتجاه الموجب أو السالب.

لكن مؤثر كمية الحركة، و بسبب إعتماده على الإتجاه، يعكس إشارة قيمته المميزة بالإنعكاسية و بالتالي فإنه يعتبر مؤثر عكس متناظر. و عليه فهو غير إبدالي مع مؤثر التماثل. لهذا السبب المؤثران غير متزامنان و ليس لهم دوال مميزة مشتركة.

نلخص إذاً أهم النتائج المستنبطة من التبادل في علاقات التبديل لمؤثرين من المؤثرات الهيرميشية الخطية المعتمدة، $\hat{A}$ و $\hat{B}$، بحيث أنه إذا كان

$$[\hat{A},\hat{B}]=0,$$

فإننا نقول أن للمؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ الخصائص التالية

1. متزامنين، أي يمكن أن يقاسا في آن واحد. و بالتالي تكون الدوال المميزة لهما مشتركة.

2. إذا كان $\hat{A} = \hat{H}$ فإننا تقول أن المؤثر $\hat{B}$ من ثوابت الحركة constant of motion و القيمة المتوقعة $\langle B \rangle$ محفوظة conserved.

3. إذا كان $\hat{A} = \hat{\Pi}$ فإننا تقول أن المؤثر $\hat{B}$ متناظر بالنسبة لـ x في الفضاء الأقليدي ذو البعد الواحد، أو متناظر بالنسبة لـ $\mathbf{r}$ في الفضاء الإقليدي ثلاثي الأبعاد.

4.7 أسئلة و تمارين

سؤال (4.6): جسيم كتلته m و تحت تأثي الجهد التالي

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 2a, \\ \infty & elswhere. \end{cases}$$

أوجد القيم المميزة، الدوال المميزة، الدالة الموجية الكلية المعتمدة على الزمن، و القيم المتوقعة $\langle x \rangle$، $\langle x^2 \rangle$، $\langle p \rangle$، و $\langle p^2 \rangle$، و أختبر مبدأ هايزنبرج. قارن نتائجك لكل حل مع الحل المقابل في حالة الجهد المتناظر في القسم (4.1) و بين أسباب الإختلافات إن وجدت بالرغم من أن الجهدين لهما نفس الشكل و الأبعاد الهندسية. ♢

سؤال (4.7): في السؤال (4.1) أوجد محور للتناظر للنظام أعلاه و منه أوجد قاعدة مناسبة لمؤثر الباريتي للإنعكاسية حول محور التناظر الجديد. ♢

سؤال (4.8): إعتبر حزمة موجية لجسيم شحنته q تعرف كالتالي $\psi^{(q)}(x,t)$. لو عرفنا مؤثر مرافق الشحنة charge conjugate operator $\hat{C}$ قاعدة تأثيره هي

$$\hat{C}\psi^{(q)}(x,t) = \psi^{(-q)}(x,t).$$

أثبت أن مؤثر مرافق الشحنة $\hat{C}$ هو مؤثر إسقاطي projection operator. ♢

سؤال (4.9): أثبت علاقة (4.33) لأي كمية فيزيائية Q تعتمد على الزمن بشكل صريح. ♢

سؤال (4.10): إستخدم علاقة (2.41) لحساب كثافة التيار للدالة الموجية (4.41). ♢

سؤال (4.11): جسيم في بئر حدوده عند $x = \pm a$ و عند الحالة الأرضية. فجأة تحركت حدود الجهد إلى $x = \pm b$ حيث $b > a$. ماهي الإحتمالية أن يتواجد الجسيم في الحالة الأرضية للجهد الجديد؟ ماهي الإحتمالية أن يتواجد الجسيم في حالة الإثارة الأولى مع إعطاء تفسير منطقي للإجابة؟ ♢

سؤال (4.12): جسيم في بئر حدوده عند $x = 0$ و $x = 2a$ و عند الحالة الأرضية. فجأة تحركت حدود الجهد إلى $x = \pm\infty$ بحيث أصبح الجسيم حر. ماهي الإحتمالية أن يكون للجسيم كمية حركة في النطاق بين p و $p + dp$؟ بعد إزالة حدود الجهد أصبح للجسيم الحر طاقة $p^2/2m$ هل تساوي هذه الطاقة طاقة الحالة الأرضية للجسيم؟ وإذا كانت الإجابة بلا هل هي أكبر، أصغر، أكبر بكثير، أو أصغر بكثير؟ و لماذا (لاحظ أن الطاقة يجب أن تكون محفوظة في حالة عدم التساوي يجب أن تبين أين أتت أو إختفت الطاقة). ♢

سؤال (4.13): جسيم في الفضاء الحر حزمته الموجية الإبتدائية تعطى كالتالي

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}.$$

- ماهي الإحتمالية أن يكون للجسيم كمية حركة في النطاق $(p, p+dp)$؟
- ما هي القيمة المتوقعة للطاقة؟

هل تستطيع أن تفسر إجاباتك بناء على حجم الحزمة و مبدأ عدم اليقين؟ ♢

سؤال (4.14): جسيم في بئر حدوده عند $x = \pm a$ و بدون حساب أي تكامل، أثبت أن القيمة المتوقعة للكمية $x^2p^3 + 3xp^3x + p^3x^2$ تساوي صفر لجميع الدوال المميزة. ♢

سؤال (4.15): إفترض إلكترون كتلته $m = 0.9\times10^{-30}\,\mathrm{kg}$ محصور في جهد لانهائي بُعده $a = 10^{-9}\,\mathrm{m}$

أ- إحسب مقدار الفرق في الطاقة بين الحالة الأرضية و حالة الإثارة الأولى.

ب- لو فرضنا أن الإلكترون إنتقل من الحالة $n = 2$ إلى الحالة $n = 1$ و صاحب الإنتقال إنبعاث فوتون، كما هو الحال في فرضيات بور. إحسب الطول الموجي للفوتون المنبعث. ♢

سؤال (4.16): إفترض جسيم محصور في جهد لانهائي غير معروف الأبعاد. أثناء الإنتقالات بين قيم n المتجاورة، إنبعثت فوتونات عند طاقات مختلفة. وجد أن أكبر طول موجي لهذه الفوتونات هو $450 \times 10^{-9}\,\mathrm{m}$ إوجد بعد الجهد a و عرض الجهد. ♢

سؤال (4.17): جسيم يتواجد في النصف الأيسر لجهد لانهائي حدوده عند $x = \pm a/2$، و دالته الموجية تُعطى كالتالي

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{a}{2}} & \frac{-a}{2} < x < 0 \\ 0 & 0 < x < \frac{+a}{2} \end{cases}$$

أجب على مايلي:

أ- هل سيبقى الجسيم متواجداً في نفس المكان مع مرور الوقت؟

ب- إحسب إحتمال الحصول على طاقة الحالة الأرضية و طاقة الإثارة الأولى لدى إجراء قياس للطاقة.

ج- ماهو إحتمال الحصول على طاقة الحالة n لدى إجراء قياس للطاقة.

هـ- بإستخدام العلاقة $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{8}$ أثبت أن مجموع الإحتمالية على كل الحالات سيعطي الوحدة. ♢

5

الجهود في بعد واحد
One-dimensional potentials

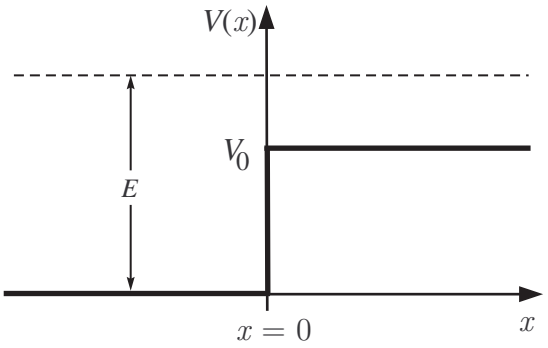
سنهتم في هذا الباب بدراسة حركة جسيم وحيد تحت تأثير جهود في بعد واحد و التي تحاكي بشكل مؤثر بعض الأوضاع الفيزيائية الهامة في ثلاث أبعاد. التركيز في هذا الباب على الظواهر غير الكلاسيكية و التي تظهر خلال هذه الدراسة.

5.1 جهد العتبة The potential step

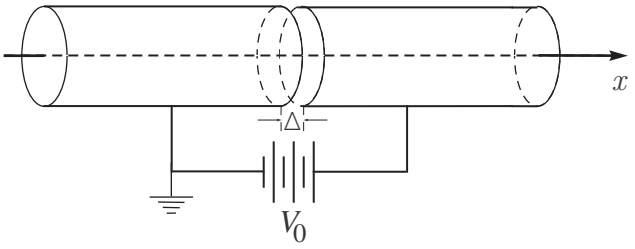
لنعتبر الجهد التالي

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & x > 0, \end{cases} \tag{5.1}$$

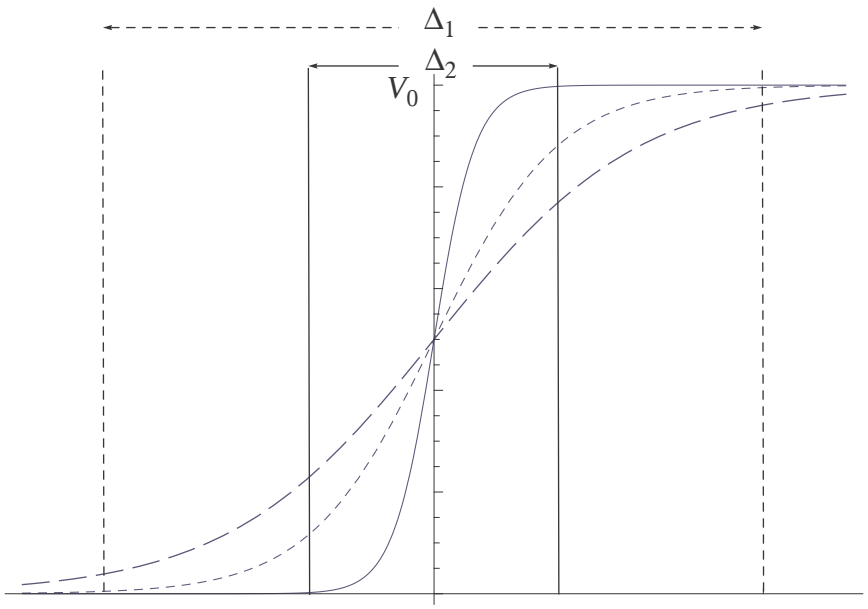
و الذي يُعطى في الشكل (5.1). يمكن تصميم هذا الجهد عملياً بوضع إلكترودين إسطوانيين كلاً منهما موصول عند جهدين مختلفين. الجهد خلال أي من الإلكترودين ثابت ولكنه يتغير فجأة إلى قيمة ثابتة أخرى لدى الإنتقال إلى الإلكترود الثاني، كما سيشعر فيه جسيم موجب الشحنة خلال إنتقاله من الإلكترود الأيسر إلى الأيمن، كما هو واضح في الشكل (5.2).



شكل (5.1): جهد العتبة في بعد واحد عند طاقة جسيم تساوي E.



شكل (5.2): جهد العتبة يصمم بوضع إلكترودين إسطوانيين كلاً منهما موصول على جهد ثابت خلال كل إلكترود و مختلف على كل إسطوانة.



شكل (5.3): تغير دالة شكل الجهد مع تغير مسافة الفجوة بين الإلكترودين. الوصول للحالة المثالية يحدث عندما $\Delta \to 0$.

عملياً، جهد العتبة المعطي في علاقة الجهد (5.1) و الموضح في الشكل (5.1) مثالي لأنه جهد منقطع، و ينتج عنه قوة لانهائية. حتى نقترب من هذا الجهد المثالي يجب أن تكون مسافة الفجوة Δ بين الإلكترودين في الشكل (5.2) $\Delta \ll \lambda$، حيث أن λ هي طول موجة ديرولي للجسيم الساقط $\lambda = h/p$. هذا يعني أن دالة الجهد (5.1) مجهرية بإمتياز. إن إقتراب دالة الجهد إلى الحالة المثالية المنقطعة بتصغير مسافة الفجوة موضحة بالشكل (5.3).

لنفترض أن هناك جسيم أُرسل من جهة اليسار أو الإتجاه من $-\infty$ إلى $+\infty$. إن معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (3.19) يمكن أن تكتب بشكلها المتجانس كالتالي

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0. \tag{5.2}$$

لنأخذ المنطقة الأولى حيث $x < 0$ و الجهد $V(x) = 0$. لو عرفنا

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

فإن معادلة شرودنجر (5.2) تصبح

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0.$$

إن الحل الرياضي لهذه المعادلة هو الجمع الخطي لـ e^{ikx} (و التي تمثل موجة تنتشر بإتجاه $+x$) و e^{-ikx} (و التي تمثل موجة تنتشر بإتجاه $-x$). الحل الأول e^{ikx} يمثل الجسيم الساقط على الجهد و الذي أرسلناه، لذلك نعتبر سعته 100%. بينما الحل الثاني يمثل الحزمة المنعكسة من على حد الجهد عند $x = 0$. إن تغير الجهد الفجائي عند $x = 0$ يولد قوة دفع بالإتجاه المعاكس للتغير.

سؤال (5.1): حدد إتجاه و مقدار قوة الدفع الناتجة عن تغير الجهد (5.1) عند $x = 0$؟ لاحظ أن الجهد أعلاه يمكن أن يكتب $V(x) = V_0\theta(x)$ حيث $\theta(x)$ تمثل الدالة الدرجية كذلك لاحظ أن $\delta(x) = d\theta(x)/dx$، حيث $\delta(x)$ هي دالة ديراك. $\diamondsuit$

كلاسيكياً هذه القوة لاتمنع الجسيم و الذي له طاقة $E > V_0$ من أختراق الجهد. لكننا هنا نتكلم عن تمثيل موجي للجسيم، و هذه الموجة –عند تغيرات الجهد- قد تنعكس أو قد تنفذ، تماماً كما هو الحال في موجات الضوء –على سبيل المثال- عندما تسقط على حد فاصل بين وسطين لكل منهما معامل إنكسار خاص به، حيث ينعكس جزء من الموجة و يخترق الجزء الآخر.

إذاً نقول أن الحل e^{-ikx} يمثل الجزء من الموجة و الذي ينعكس من على حد الجهد عند $x = 0$. لو إعتبرنا أن I تمثل سعة الموجة الساقطة incident wave amplitude و R تمثل سعة الإنعكاس، فإن الحل العام للمنطقة $x < 0$ يصبح

$$\psi(x) = Ie^{ikx} + Re^{-ikx}. \tag{5.3}$$

نريد أن نوجه عناية القاريء أن الموجة التي تصف الجسيم هنا هي موجة مستوية plane wave و هي ناتجة عن حل لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن. إن إستقلالية الحل عن الزمن في الأنظمة الفيزيائية تحدث عند حالة الإتزان. إن الوصول إلى حالة الإتزان هذه تحدث عندما يكون الزمن كبيراً جداً ($t \to \infty$) مقارنة مع زمن الإسترخاء للنظام relaxation time. لقد رأينا في الشكل (4.2) كيف تتحول الحزمة الموجية للجسيم الحر إلى موجة مستوية خلال إنتشارها و تقادم الزمن.

لنأخذ المنطقة الثانية حيث $x > 0$ و الجهد $V(x) = V_0$. لو عرفنا

$$q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2},$$

فإن معادلة شرودنجر (5.2) تصبح

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + q^2\psi(x) = 0.$$

إن الحل الرياضي لهذه المعادلة هو الجمع الخطي لـ e^{iqx} (و التي تمثل موجة مخترقة transmitted wave بإتجاه $+x$) و e^{-iqx} (و التي تمثل موجة منعكسة refelected wave بإتجاه $-x$). لكن الجهد في المنطقة $x > 0$ ثابت و لا يعاني من أي تغير، و بالتالي لاتوجد قوى و من ثم حدود فاصلة يحدث عندها أي إنعكاسية للموجة المخترقة. لهذا فإن الحل العام للمنطقة $x > 0$ يصبح

$$\psi(x) = Te^{iqx}, \tag{5.4}$$

حيث T تمثل سعة الإختراقية. إن الحل العام $\psi(x)$ يمكن أن يكتب كالتالي

$$\psi(x) = \begin{cases} Ie^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0, \\ Te^{iqx} & x > 0. \end{cases} \tag{5.5}$$

لاحظ أن السعات I، R، و T لهم أبعاد تساوي $L^{-1/2}$.

إن كثافة التيار التي تقابل الدالة الموجية (5.5) يمكن أن تحسب بإستخدام العلاقة (2.41). إن كثافة التيار في المنطقة $x < 0$ تساوي

$$\begin{aligned} J(x) &= \frac{\hbar}{2im}\left[\begin{array}{l}(I^*e^{-ikx} + R^*e^{ikx})(ikIe^{ikx} - ikRe^{-ikx}) - \\ (-ikI^*e^{-ikx} + ikR^*e^{ikx})(Ie^{ikx} + Re^{-ikx})\end{array}\right], \\ &= \frac{\hbar k}{m}(|I|^2 - |R|^2). \end{aligned}$$

كما نلاحظ فإن كثافة التيار في المنطقة $x < 0$ تتكون من حدين، الحد الأول $|I|^2\hbar k/m$ و الذي يمثل كثافة التيار الساقط incedent current density و الحد الثاني $|R|^2\hbar k/m$ و الذي يمثل كثافة التيار المنعكس reflected current density و إشارتها سالبة لأنها تنعكس بإتجاه $-x$. كذلك نلاحظ أن الكمية $\hbar k/m$ تمثل السرعة الكلاسيكية للجسيم كما هو موضح في العلاقة (2.9). إذاً كثافة التيار التي نحصل عليه من العلاقات الكمية = السرعة $\times$ كثافة تواجد الجسيم. للتيار الساقط يمكن إعتبار سعة السقوط الوحدة. نكتب إذاً التيار الساقط J_I على الصيغة

$$J_I = \frac{\hbar k}{m}|I|^2. \tag{5.6}$$

بينما للتيار المنعكس فإن كثافة الإنعكاس هي $|R|^2$ لكل وحدة طول (لأن النظام في بعد واحد) و بسرعة $-v = -\hbar k/m$ (الإشارة السالبة تعني أن الإنعكاس بالإتجاه $-x$). و عليه فإن كثافة التيار المنعكس J_R هي

$$J_R = \frac{-\hbar k}{m}|R|^2. \tag{5.7}$$

هذا يقابل تماماً كثافة التيار في النظرية الكهرومغناطيسية و التي تعطى بالعلاقة nv حيث n تمثل كثافة الناقل لكل وحدة حجم (في ثلاث أبعاد بالطبع) و v هي سرعة الإنجراف للشحن الناقلة drift velocity.

في المنطقة $x > 0$ فإن كثافة التيار تساوي

$$\begin{aligned} J(x) &= \frac{\hbar}{2im}\left[T^*e^{-iqx}iqTe^{iqx} - (-iq)T^*e^{-iqx}Te^{iqx}\right], \\ &= \frac{\hbar q}{m}|T|^2. \end{aligned}$$

أيضاً هذا يمثل كثافة التيارالمخترق J_T و الذي يساوي كثافة الإختراق $|T|^2$ لكل و حدة طول (لأننا في بعد واحد) $\times$ سرعة الإختراق $\hbar q/m$. طبعاً الإشارة الموجبة تعني أن الإختراق يحدث في الإتجاه الموجب. إذاً نكتب صيغة التيار المخترق

$$J_T = \frac{\hbar q}{m}|T|^2. \tag{5.8}$$

بشكل عام نعبر عن كثافات التيار للنظام كالتالي

$$J(x) = \left\{\begin{array}{ll}\frac{\hbar k}{m}(|I|^2 - |R|^2) & x < 0, \\ \\ \frac{\hbar q}{m}|T|^2 & x > 0.\end{array}\right. \tag{5.9}$$

من الهام أن نلاحظ أن علاقات كثافات التيار لاتعتمد على x. السبب هو أن علاقات التيار أُشتقت من الدالة الموجية المستقلة عن الزمن (5.5). بما أن الدالة الموجية مستقلة عن الزمن فإن كثافة الإحتمالية لها P، و التي تُعْطى بالعلاقة (2.33)، مستقلة عن الزمن أيضاً. لهذا فإن $\partial P/\partial t = 0$. من علاقة الإستمرارية (2.42) لابد إذا من أنً $\partial J/\partial x = 0$ و بالتالي كثافة التيار J لاتعتمد على x. التيار لابد أن يكون منحفظ، لذلك فإن التيار في المنطقة $x < 0$ يساوي التيار في المنطقة $x > 0$. أو

$$J_I + J_R = J_T,$$

$$\frac{\hbar k}{m}(|I|^2 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2,$$

أو نكتب

$$|R|^2 + \frac{q}{k}|T|^2 = |I|^2. \tag{5.10}$$

على القاريء أن ينتبه إن نظامنا هو لجسيم واحد في بعد واحد. إن علاقة الدالة الموجية (5.5) و كثافة التيار (5.9) لاتعني أن الجسيم الساقط نفسه ينفلق إلى جزء منعكس و آخر مخترق للجهد. ميكانيكا الكم لاتفرض هذا مطلقاً. المعالجة تتحدث عن إنعكاس و إختراق الدالة الموجية للجسيم و ليس الجسيم نفسه. بعبارة أخرى نتحدث عن إحتمالية أن يخترق الجسيم أو ينعكس من على حد الجهد لأن الدالة الموجية تمثل سعة إحتمالية تواجد الجسيم في كل منطقة من المناطق المعرفة عليها.

في كل الأحوال فإن الدالة الموجية (5.5) يجب أن تكون متصلة. كما ذكرنا سابقاً شرط الإتصال هام جداً لتحقيق شرط المعايرة. إن ما يجب التأكيد عليه هو إتصال $\psi(x)$ عند النقطة $x = 0$ و التي يكون الجهد عندها غير متصل. إذاً لابد أن

$$\lim_{x\to 0^-} \psi(x) = \lim_{x\to 0^+} \psi(x).$$

لهذا فإن

$$(Ie^{ikx} + Re^{-ikx})|_{x=0} = Te^{iqx}|_{x=0},$$

أو

$$1 + R = T. \tag{5.11}$$

إن شرط إستمرارية الدالة الموجية يؤدي كذلك إلى شرط آخر و هو إستمرارية مشتقة الدالة الموجية. نقول أن ميل الدالة الموجية متصل أيضاً لأي جهد متناهي حتى لو كان الجهد غير متصل كما هو الحال في الجهد (5.1). لإثبات ذلك نكامل معادلة الدالة الموجية (5.2) في الفترة $\epsilon-$ إلى $\epsilon+$ حيث ϵ أي عدد موجب و صغير بما فيه الكفاية. لنقوم بإجراء التكامل

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}[V(x) - E]\psi(x)dx,$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)dx = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x)dx - E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx\right).$$

بما أن الجهد يساوي صفر عندما $x < 0$، نعدل حدود التكامل في الطرف الأيمن لننتهي إلى

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} d\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0\int_{0}^{+\epsilon}\psi(x)dx - E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx\right).$$

بسبب إستمرارية الدالة الموجية $\psi(x)$ فإن التكامل $\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx = 0$ و بالتالي فإنه من المنطقي أن التكامل $\int_{0}^{+\epsilon}\psi(x)dx = 0$. لهذا السبب فإن الطرف الأيمن في التكامل أعلاه يساوي صفر. لذلك يصبح الطرف الأيسر

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} d\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{+\epsilon} - \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{-\epsilon} = 0.$$

بأخذ النهاية $\epsilon \to 0$ نحصل على شرط الإستمرارية لمشتقة الدالة الموجية عند حد الجهد

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^+} = \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^-},$$

هذا يؤدي إلى أن

$$ik(Ie^{ikx} + Re^{-ikx})|_{x=0} = iqTe^{iqx}|_{x=0}.$$

و بالتالي نحصل على

$$ik(I - R) = iqT. \tag{5.12}$$

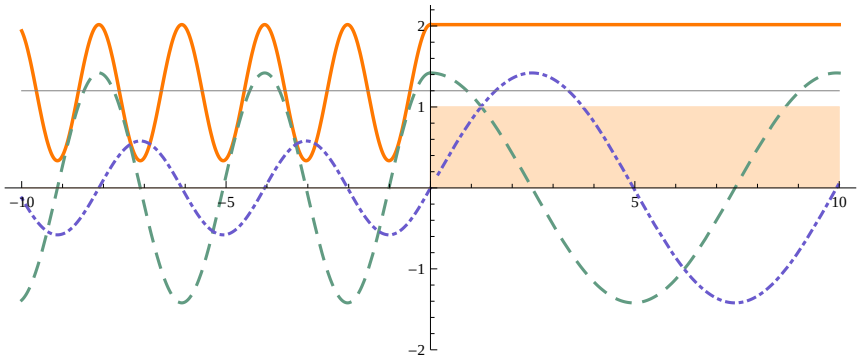
يمكننا الآن من إيجاد قيمة R و T بمعلومية I من المعادلتين (5.11) و (5.12) نحصل على سعة الإنعكاسية reflection amplitude

$$R = \left(\frac{k-q}{k+q}\right) I, \tag{5.13}$$

و سعة الإختراق transmission amplitude تعطى كالتالي

$$T = \left(\frac{2k}{k+q}\right) I. \tag{5.14}$$

لاحظ أن قيم k و q حقيقية طالما أن $E > V_0$. الشكل (5.4) يصف الدالة الموجية الموقوفة (5.5) و دالة كثافة الإحتمالية $|\psi(x)|^2$ لجسيم طاقته ضعف إرتفاع عتبة الجهد.



شكل (5.4): الدالة الموجية المستقلة عن الزمن لجسيم يسقط على عتبة الجهد نسبة طاقة الجسيم إلى إرتفاع الجهدهي $E : V_0 = 1.2 : 1$. المنحنى المتقطع (الأخضر) يمثل الجزء الحقيقي من $\psi(x)$ بينما المنحنى المتقطع المنقط (الأزرق) يمثل الجزء التخيلي من $\psi(x)$. المنحنى المستمر (البرتقالي) يمثل دالة التوزيع كثافة الإحتمالية $|\psi(x)|^2$.

يمكننا حساب كثافة التيار المنعكس من العلاقة (5.7) ليصبح

$$J_R = \frac{-\hbar k}{m}\left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 |I|^2.$$

كذلك نحسب التيار المخترق من العلاقة (5.8) ليصبح

$$J_T = \frac{\hbar q}{m}\left(\frac{2k}{k+q}\right)^2 |I|^2 = \frac{\hbar k}{m}\frac{4kq}{(k+q)^2}|I|^2.$$

لاحظ أن $J_T - J_R$ سيُعْطي

$$J_T - J_R = \frac{\hbar k}{m}\frac{4kq}{(k+q)^2}|I|^2 + \frac{\hbar k}{m}\left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 |I|^2 = \frac{\hbar k}{m}|I|^2 = J_I,$$

مما يحقق قانون إنحفاظ كثافة التيار و التي تحقق بدورها العلاقة (5.10).

بالإضافة إلى ذلك، كثافة الإنعكاس $|R|^2$ و كثافة الإختراق $|T|^2$ لاتمثلان هنا إحتمالية الإنعكاسية و إحتمالية الإختراقية، على الترتيب، لأن $|R|^2$ و $|T|^2$ غير معايرات إلى الوحدة كما يتضح من المعادلة (5.10). كذلك لهما أبعاد تساوي L^{-1}. إن الإحتمالية بشكل عام تحسب من التيارات. نعرف إحتمالية الإنعكاسية P_R بأنها نسبة القيمة المطلقة للتيار المنعكس إلى القيمة المطلقة للتيار الساقط. أي أن

$$P_R \equiv \frac{|J_R|}{|J_I|}. \tag{5.15}$$

كذلك نعرف إحتمالية النفاذية P_T بأنها نسبة القيمة المطلقة للتيار النافذ إلى القيمة المطلقة للتيار الساقط. أي أن

$$P_T \equiv \frac{|J_T|}{|J_I|}. \tag{5.16}$$

بالتعويض عن التيارات الساقطة، المنعكسة، و المخترقة، بإستخدام العلاقات (5.6)، (5.7)، و (5.8)، على الترتيب، لحساب إحتمالية الإنعكاسية و النفاذية الحاصلة على جهد العتبة و التعويض عن قيم R و T من العلاقات (5.13) و (5.14) نحصل على

$$P_R = \frac{|R|^2}{|I|^2} = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2, \tag{5.17}$$

و

$$P_T = \frac{q}{k}\frac{|T|^2}{|I|^2} = \frac{4kq}{(k+q)^2}. \tag{5.18}$$

كذلك نجد أن

$$P_T + P_R = \frac{|R|^2}{|I|^2} + \frac{q}{k}\frac{|T|^2}{|I|^2} = 1,$$

مما يعني أن الإحتمالية معايرة و في إنسجام تام مع العلاقة (5.10). لو عوضنا عن قيم الأعداد الموجية k و q بمعلومية الطاقة و الجهد في العلاقات (5.17) و (5.18) ، نحصل على

$$P_R = \left(\frac{1-\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}}{1+\sqrt{1-\frac{V_o}{E}}}\right)^2; \qquad E \geq V_0, \tag{5.19}$$

و على

$$P_T = \frac{4\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}}{\left(1+\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}\right)^2}; \qquad E \geq V_0. \tag{5.20}$$

من الغريب أن نجد من العلاقات (5.19) و (5.20) أن إحتمالية الإنعكاسية و النفاذية و بالتالي السعات R و T لا يعتمدا على $\hbar$. نحن نعلم من مبدأ التقابل أن النتائج الكمية تُعْطي النتائج الكلاسيكية عندما تؤول $\hbar \to 0$. مما يعني أن العلاقات (5.19) و (5.20) صالحة في الحدود الكلاسيكية و بالتالي يوجد إنعكاسية جزئية في الحلات الكلاسيكية!؟ للوهلة الأولى يبدو أن هناك تناقض! في الواقع لايوجد أي تناقض هنا حيث نعتبر الحالة كلاسيكية إذا كانت طول موجة دبرولي للجسيم ($\lambda = h/p$) أقل من أبعاد النظام الذي يتفاعل معه. في حالة جهد العتبة فإن أبعاد النظام ليست سوى طول المنطقة التي يتغير فيها الجهد من صفر إلى V_0 و التي تُمثل في الفجوة Δ كما في الشكلين (5.1) و (5.1). لقد إشترطنا مسبقاً أن $\Delta \gg \lambda$ دائماً، مما يعني نه لايوجد حد كلاسيكي لهذا الجهد الكمي المثالي المنقطع.

في نهاية نقاشنا نجد أنه من الهام إستنباط النقاط التالية:

- على النقيض من الميكانيكا الكلاسيكية، و التي تفرض أن الجسيم إثناء مروره بجهد العتبة يتباطأ (لحفظ الطاقة الميكانيكية) لكن لاينعكس أبداً طالما طاقته أعلى من قيمة الجهد، هنا يوجد إحتمالية لهذا الجسيم أن ينعكس. هذا بالطبع نتيجة للخصائص الموجية للجسيم حيث يحدث للموجة الساقطة إنعكاس جزئي لدى مرورها خلال الحد الفاصل بين وسطين بمعاملي إنكسار مختلفين.

- إن شرط إستمرارية مشتقة الدالة الموجية صحيح للجهود المتناهية، بغض النظر عن طبيعة هذه الجهود. ومن الواضح أنه، مع شرط إستمرارية الدالة الموجية، يحققان قانون إنحفاظ كثافة التيار. هذا الشرط لاينطبق للجهود غير النهائية، كما هو الحال في جهد البئر اللانهائي.

- عند $E \gg V_0$، مما يعني أن $q \to k$ و بالتالي فإن كثافة إحتمال الإنعكاسية $|R|^2 \to 0$. هذا يعني أن جهد العتبة يصبح جهد صغير إضطرابي لأيؤثر بشكل صريح على طاقة الجسيم و بالتالي لايعاكس إنتشار الموجة التي تمثله.

- في الحالة غير الكلاسيكية $E < V_0$ فإن q تصبح تخيلية. لذلك في المنطقة المحظورة كلاسيكياً (لماذا هذا الإسم؟) $x > 0$ نستبدل q بـ $i|q|$ و يصبح حل الدالة الموجية هو

$$\psi(x) = Te^{-|q|x}, \tag{5.21}$$

وهو حل مقبول فيزيائياً لأن الدالة $\psi(x)$ تبقى متناهية عندما $x \to +\infty$. لذلك لايمكن القبول بأي حل من الشكل $e^{|q|x}$، و إن كان مقبول رياضياً، لأنه يخالف شرط تناهي الدالة عندما $x \to +\infty$. كذلك لدى حسابنا لكثافة التيار المخترق J_T بإستخدام الدالة الموجية (5.21) في صيغة كثافة التيار (2.41)، نجد أن $J_T = 0$، مما يعني أن الجسيم لن ينفذ إلى عمق المنطقة $x > 0$. لو حسبنا كثافة إحتمال الإنعكاسية $|R|^2$ سنجد أنها

$$|R|^2 = RR^* = \left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|}\right)\left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|}\right)^* |I|^2 = |I|^2.$$

إذاً كما هو الحال في الميكانيكا الكلاسيكية، يحدث في هذه الحالة إنعكاس كلي. إحتمالية الإنعكاس في هذه الحالة P_R تصبح

$$P_R = \frac{|R|^2}{|I|^2} = 1; \qquad E < V_0, \tag{5.22}$$

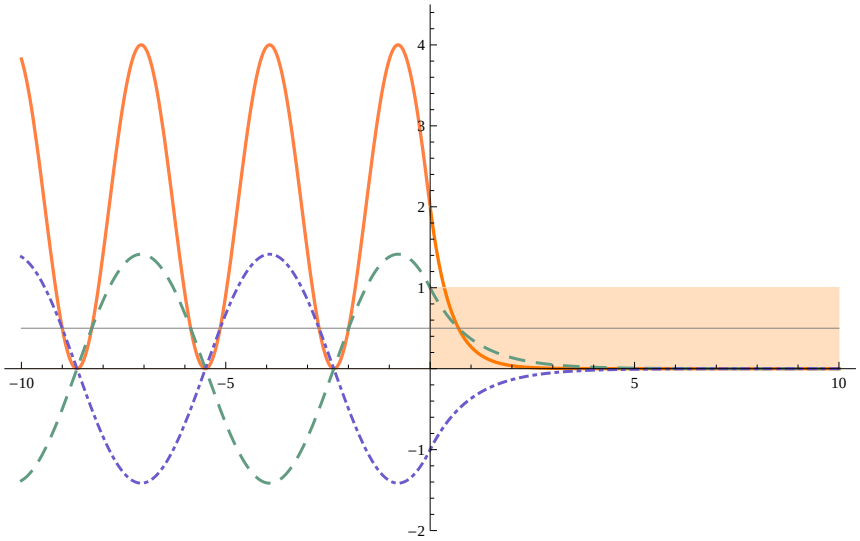
في المقابل نلاحظ أن سعة الإختراق (أو كثافة الإختراق) تصبح

$$T = \left(\frac{2k}{k + i|q|}\right) I \neq 0,$$

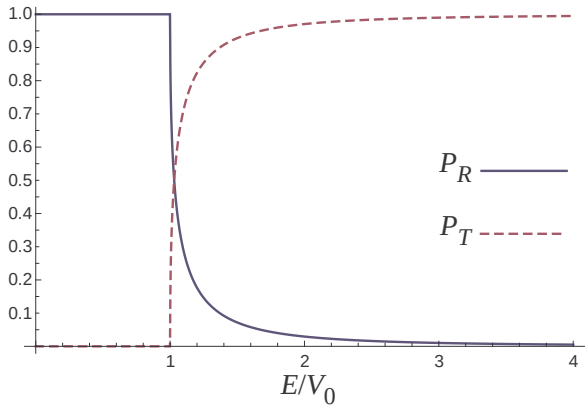
أي أن جزء من الموجة يدخل في المنطقة المحظورة كلاسيكياً $x > 0$. هذه الحالة موصوفة بالشكل (5.5) و التي توضح الدالة الموجية المستقلة عن الزمن و التي تسقط على عتبة جهد إرتفاعه ضعف طاقة الجسيم. لاحظ الإضمحلال الأسي للدالة الموجية و كثافة الإحتمالية داخل منطقة الجهد. كذلك لاحظ أن الجزء التخيلي من الدالة الموجية و الجزء الحقيقي أصبحا خارجين تماماً من الطور. رياضياً السبب يعود إلى أن كلاً من السعات R و T قيم مركبة أدى إلى قلب الطور للجزء التخيلي من الدالة الموجية أنظر إلى السؤال (6). إن ظاهرة الدخول الجزئي هو مرة أخرى من خصائص الموجات و سوف نرى لاحقاً إن هذا يؤدي لحدوث ظاهرة هامة تسمى ظاهرة التنفق tunneling phenomena و هي ظاهرة محظورة كلاسيكياً. لكن الجسيم هنا في حالة جهد العتبة بالذات لن يخترق الحاجز بشكل كلي، حيث نجد أن إحتمالية الإختراق تساوي صفر، لأن تيار الإختراق $J_T = 0$. و عليه، و بإستخدام العلاقة (5.16) يمكن أن نكتب

$$P_T = 0; \qquad E < V_0. \tag{5.23}$$

و هذا بالتالي يحافظ على أن $P_R + P_T = 1$. الشكل (5.6) يوضح منحنى إحتماليات الإنعكاسية و الإختراقية على جهد العتبة كدالة لـ E/V_0. المنحنى مرسوم عند $E < V_0$ بإستخدام العلاقات (5.22) و (5.23)، و عند $E \geq V_0$ بإستخدام العلاقات (5.19) و (5.20).



شكل (5.5): الدالة الموجية المستقلة عن الزمن لجسيم يسقط على عتبة الجهد نسبة طاقة الجسيم إلى إرتفاع الجهدهي $E : V_0 = 0.5 : 1$. المنحنى المتقطع (الأخضر) يمثل الجزء الحقيقي من $\psi(x)$ بينما المنحنى المتقطع المنقط (الأزرق) يمثل الجزء التخيلي من $\psi(x)$. المنحنى المستمر (البرتقالي) يمثل دالة التوزيع كثافة الإحتمالية $|\psi(x)|^2$.

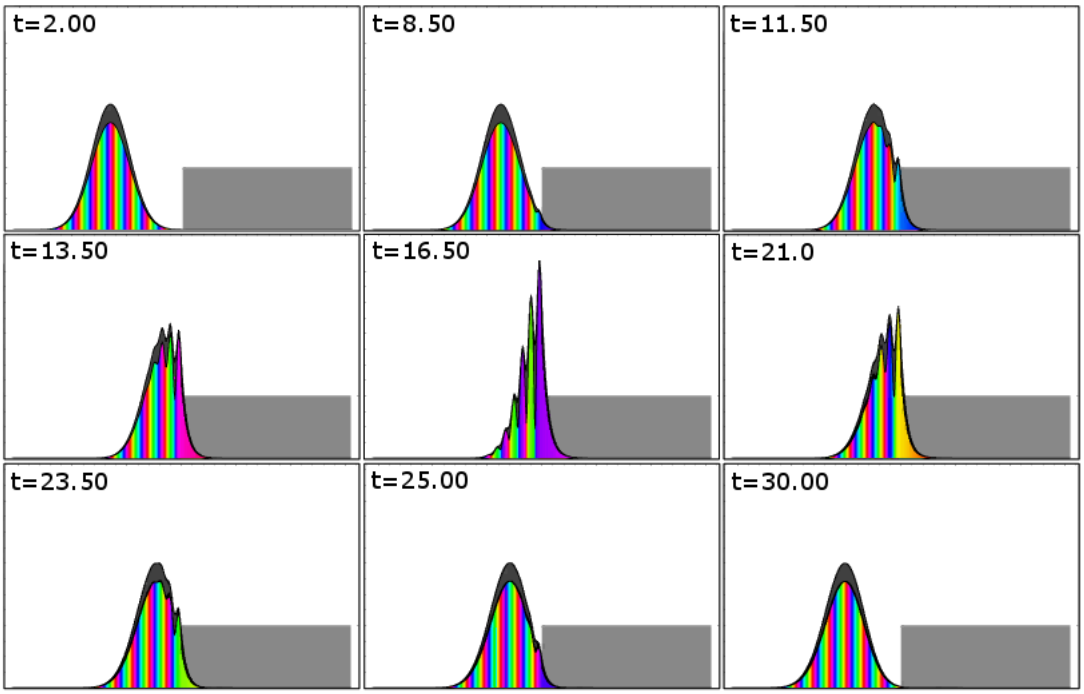


شكل (5.6): إحتمالية الإنعكاسية P_R و إحتمالية الإختراقية P_T لجسيم يسقط على جهد العتبة كدالة لـ E/V_0.

هناك ملاحظة هامة جداً هنا يجب التوقف عندها، و هي عندما تكون الطاقة الكلية أقل من الجهد، أي $E < V_0$. الميكانيكا الكلاسيكية تقول أن الجسيم لايمكن أن يدخل المنطقة $x > 0$. السبب يعود إلى أنه في هذه المنطقة

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x),$$

أي ان $p^2/2m < 0$، بمعنى أن الطاقة الحركية سالبة في المنطقة $x > 0$ و الذي يعني أن كمية الحركة الخطية p تخيلية في المنطقة $x > 0$. كلا الأمرين غير مسموح بهما، أو حتى لايوجد لهما معنى فيزيائي، في الفيزياء الكلاسيكية. حسب الميكانيكا الكلاسيكية، فإن قوة الدفع impulse force ستغير كمية حركة الجسيم بالإتجاه فقط بحيث تعكس إتجاه حركة الجسيم تماماً إلى إتجاه $-x$ لكن مقدار كمية الحركة يبقى ثابتاً بعد الإنعكاس من على حد الجهد و بالتالي فإن الطاقة الحركية للجسيم تبقى ثابتة. لكن في ميكانيكا الكم يمكننا إيجاد حل لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (لأن الجهد مستقل عن الزمن) في المنطقة $x > 0$ و عند طاقة كلية $E < V_0$، و نحصل على المعادلة (5.21)، ونلاحظ أن هناك كثافة إحتمالية لاتساوي الصفر كي يتواجد الجسيم في المنطقة $x > 0$، و التي



شكل (5.7): إنعكاس حزمة جاوسية من على جهد العتبة. إرتفاع الجهد أعلى من طاقة الحزمة.

تُعْطى بالعلاقة

$$|\psi(x)|^2 = |T|^2 e^{-2|q|x} = \frac{4k^2|I|^2}{k^2+|q|^2} e^{-2|q|x}.$$

لاحظ أن كثافة الإحتمالية تضمحل أسياً كلما زاد عمق الإختراق، الأمر الذي يشبه إختراق الضوء في وسط عالي الإمتصاصية. الشكل (5.7) يوضح كثافة الإحتمالية لحزمة موجية لجسيم تسقط على عتبة جهد إرتفاعها أكبر من طاقة الجسيم خلال أزمنة مختلفة. لاحظ كيف تتشوه الحزمة نتيجة الإنعكاس و تداخل الجزء المنعكس مع الجزء الساقط و كيف يدخل جزء منها داخل منطقة الجهد.

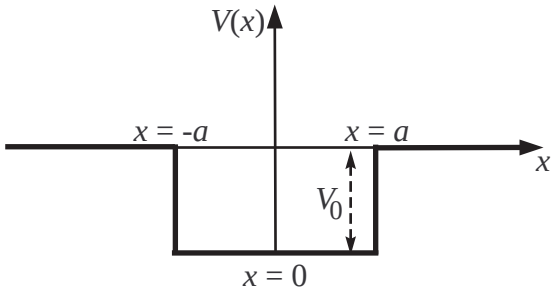
5.2 جهد البئر المتناهي: حالة التشتت
The finite potential well: scattering state

لنعتبر الجهد التالي

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a, \\ -V_0 & a > x > -a, \\ 0 & x > a, \end{cases} \tag{5.24}$$

و الموضح في الشكل (5.8). يُقصد بحالة التشتت أن الطاقة الكلية للنظام تستوفي الشرط $E > 0$ ، في هذه الحالة الطاقة الحركية للجسيم أكبر من طاقة الجهد التجاذبية attractive potential. لاحظ إن هذا الجهد متناظر حول $x = 0$. لنفترض أن هناك جسيم أُرسل من جهة اليسار أو الإتجاه من $-\infty$ إلى $+\infty$. حيث أعتبرنا أن طاقة الجسيم $E > 0$ بإفتراض حالة التشتت. لو عرفنا

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2},$$



شكل (5.8): جهد البئر المتناهي في بعد واحد عند طاقة جسيم تساوي E.

و

$$q^2 \equiv \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2},$$

وقمنا بحل معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (5.2) نحصل على الحل التالي

$$\psi(x) = \begin{cases} Ie^{ikx} + Re^{-ikx} & x < -a, \\ Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & -a < x < a, \\ Te^{ikx} & x > a. \end{cases} \tag{5.25}$$

الجدول (5.1) يلخص حلول النظام و كثافات التيارات له في جميع المناطق عند $E > 0$.

جدول (5.1): معادلات شرودنجر و حلولها و كثافات التيارات لجميع مناطق جهد البئر المتناهي عند حالة التشتت.

المنطقة	$x > a$	$-a < x < a$	$x < -a$
العدد الموجي Wave number	$k = \sqrt{2mE}/\hbar$	$q = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$	$k = \sqrt{2mE}/\hbar$
معادلة شرودنجر Schrödinger equation	$d^2\psi/dx^2 + k^2\psi = 0$	$d^2\psi/dx^2 + q^2\psi = 0$	$d^2\psi/dx^2 + k^2\psi = 0$
الدالة الموجية Wave function	Te^{ikx}	$Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$	$Ie^{ikx} + Re^{-ikx}$
كثافة التيار Current density	$\frac{\hbar k}{m}\|T\|^2$	$\frac{\hbar q}{m}(\|A\|^2 - \|B\|^2)$	$\frac{\hbar k}{m}(\|I\|^2 - \|R\|^2)$

في الجدول (5.1) نلاحظ مرة أخرى أن كثافة التيار في المنطقة $x < -a$ عبارة عن مجموع جبري لتيارين، أحدهما ساقط $|I|^2\hbar k/m$ و الآخر منعكس من على حد الجهد $x = -a$ و قيمته $|R|^2\hbar k/m$. أما التيار في المنطقة $x > a$ فهو تيار مخترق فقط و مقداره $|T|^2\hbar k/m$. أما في المنطقة $|x| < a$ نجد أن التيار عبارة عن مجموع جبري لتيارين أحدهما بإتجاه $+x$ و مقداره $|A|^2\hbar q/m$ و هو ناتج عن الإختراق أو الإنعكاس من الداخل من على حد الجهد $x = -a$، و الآخر بإتجاه $-x$ و مقداره $|B|^2\hbar q/m$ و هو ناتج عن الإنعكاس داخل الجهد من الحد $x = a$. مرة أخرى، إن نقاط تغير الجهد هي التي تحدث عندها الإنعكاسية أو الإختراقية، لذلك فإن الدالة

الموجية في المنطقة $|x| < a$ تعاني من سلسلة من الإنعكاسات داخل البئر عند نقاط الإنقطاع $x = \pm a$. نلاحظ أيضاً أن جميع كثافات التيار لاتعتمد على x، لماذا؟ من إنحفاظ التيار نحصل على

$$\frac{\hbar k}{m}(|I|^2 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2. \tag{5.26}$$

كذلك نستنبط من علاقة إنحفاظ التيار (5.26) أن

$$|R|^2 + |T|^2 = |I|^2. \tag{5.27}$$

بإستخدام التعاريف (5.15) و (5.16) نجد أن $P_R = |R|^2/|I|^2$ تمثل إحتمالية الإنعكاسية و $P_T = |T|^2/|I|^2$ تمثل إحتمالية النفاذية مما ينسجم مع المعادلة (5.27). بتحقيق شرط إستمرارية الدالة الموجية و مشتقتها عند نقاط إنقطاع الجهد يمكننا حساب كل من السعات R و T، لنحصل على عند $x = -a$:

$$Ie^{-ika} + Re^{ika} = Ae^{-iqa} + Be^{iqa},$$

$$ik(Ie^{-ika} - Re^{ika}) = iq(Ae^{-iqa} - Be^{iqa}).$$

عند $x = a$:

$$Ae^{iqa} + Be^{-iqa} = Te^{ika},$$

$$iq(Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) = ikTe^{ika}.$$

لدينا أربع معادلات و أربع مجاهيل، بعد حلها نحصل على قيم R و T بمعلومية I كالتالي

$$R = iIe^{-2ika}\frac{(q^2 - k^2)\sin 2qa}{2kq\cos 2qa - i(q^2 + k^2)\sin 2qa}, \tag{5.28}$$

و

$$T = Ie^{-2ika}\frac{2kq}{2kq\cos 2qa - i(q^2 + k^2)\sin 2qa}. \tag{5.29}$$

في حالة أن $E \gg V_0$، عملياً لا يحدث أي إنعكاس لأنه في هذه الحالة $(q^2 - k^2) \to 0$ و بالتالي فإن $R \to 0$. في حالة أن $E \to 0$ فإن $k \to 0$ و بالتالي تؤول الإختراقية إلى الصفر. عند حسابنا لإحتمالية الإنعكاسية $|T|^2$، نحصل على العلاقة

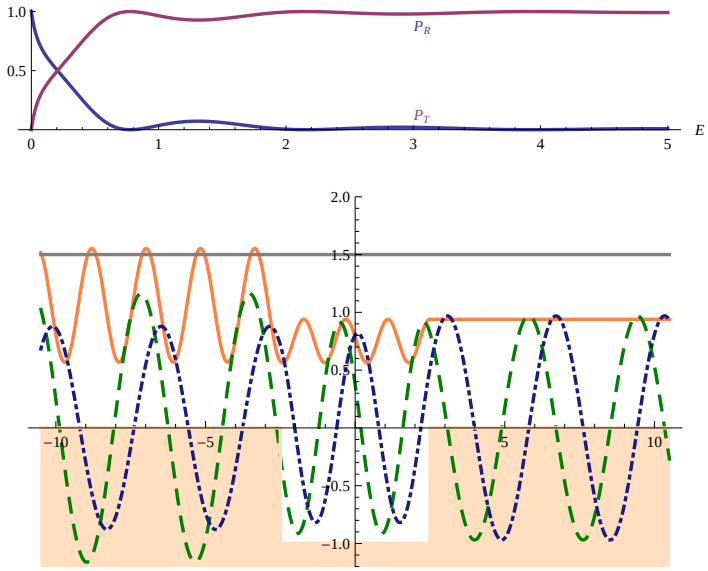
$$|T|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (q^2 - k^2)^2\sin^2 2qa}|I|^2. \tag{5.30}$$

الشكل (5.9) يوضح قيم الدالة الموجية و كثافة الإحتمالية المستقلة عن الزمن لإلكترون طاقته $E = 1.5\,\mathrm{eV}$ يسقط على جهد البئر المتناهي التجاذبي عرضه $2a = 5\,\mathrm{nm}$ و عمقه $V_0 = 1\,\mathrm{eV}$. في الأعلى قيم إحتمالية النفاذية و الإنعكاسية.

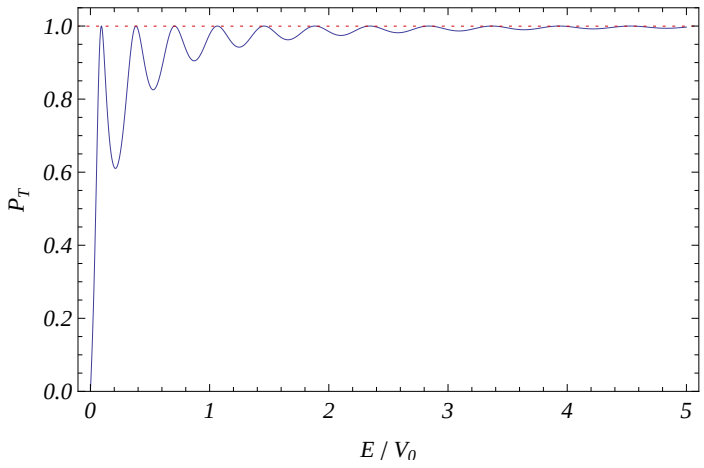
نلاحظ أن هنا حالة جديرة بالإهتمام، و هي أن قيمة الإنعكاسية صفر (أو النفاذية 1) عند $\sin 2qa = 0$، أي أن $2qa = n\pi$ حيث أن $n = 1, 2, ...$. هذا يقابل قيم طاقة للجسيم تعطى كالتالي

$$E = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}, \qquad n = 1, 2, 3, ... \tag{5.31}$$

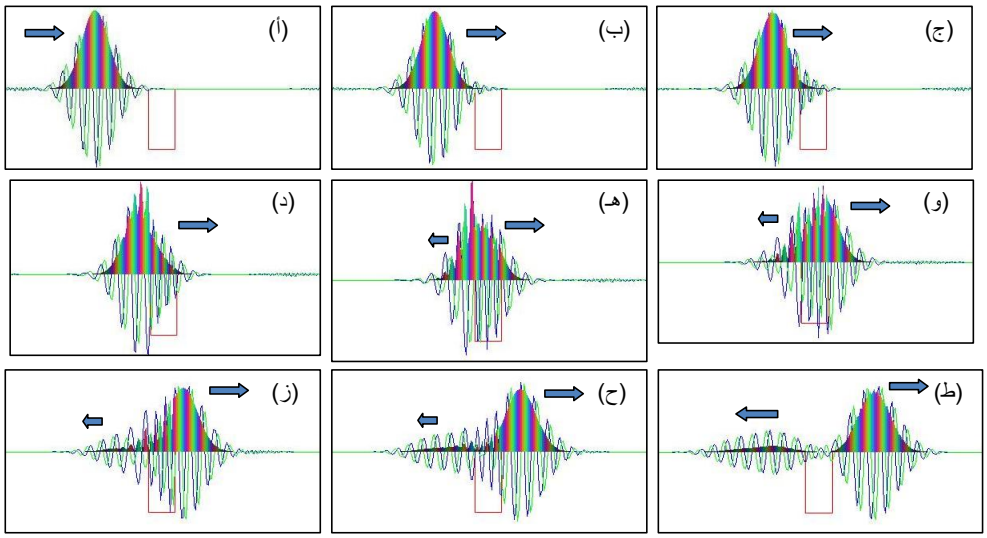
الشكل (5.10) يوضح تغير إحتمالية النفاذية $P_T = |T|^2/|I|^2$ كدالة لنسبة الطاقة الكلية إلى عمق الجهد E/V_0. نجد من الشكل أن هناك قيم لـ E تصل عندها الإنعكاسية إلى الوحدة، أي قيم عظمى. هذه القيم تقابل قيم الطاقة المعطاة



شكل (5.9): تشتت إلكترون طاقته $E = 1.5\,\mathrm{eV}$ على جهد البئر المتناهي التجاذبي عرضه $2a = 5\,\mathrm{nm}$ و عمقه $V_0 = 1\,\mathrm{eV}$. المنحنى المتقطع (الأخضر) يمثل الجزء الحقيقي من الدالة الموجية بينما المنحنى المتقطع المنقط (الإزرق) يمثل الجزء التخيلي. المنحنى المتصل يمثل كثافة الإحتمالية $|\psi(x)|^2$. في الإعلى منحنيي إحتمالياتي الإنعكاسية و النفاذية.



شكل (5.10): إحتمالية النفاذية كدالة لـ E/V_0 لنيوكلون يتشتت على جهد عرضه 10 fm و عمقه 30 MeV. لاحظ وجود قيم عظمى للنفاذية تصل للوحدة عند الطاقات المنخفضة نتيجة للرنين. عند الطاقات العالية فإن $P_T \to 1$ لأن $q^2 \to k^2$.



شكل (5.11): تشتت حزمة موجية على جهد بئر متناهي عمقه يساوي ضعف طاقة الجسيم $V_0 = 2E$ الحزمة تسقط من اليسار إلى اليمين.

في العلاقة (5.31). إن ما يحدث هو نوع من الإختراق الرنيني. باللغة الموجية عندما يملك الجسيم قيم الطاقة المميزة في العلاقة (5.31) فإن الحزمة التي تصف الجسيم يحدث لها تداخل هدام بين الموجة المنعكسة عند $x = -a$ و الموجة المنعكسة مرة ($n = 1$)، مرتين ($n = 2$)، أو ثلاث مرات ($n = 3$)، ... ، عند الحد $x = a$. إن شرط هذا الرنين يحدث عندما $2qa = n\pi$ و الذي يمكن أن يكتب

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} = \frac{4a}{n} \quad \Rightarrow \quad 2a = \frac{n}{2}\lambda,$$

و الذي يحدد شرط التداخل الهدام بأن يكون فرق المسار $2a$ يساوي مضاعفات لأنصاف الطول الموجي. لاحظ أن هذا الشرط يصف أيضاً تداخل فابري-بيرو Fabry-Perot interferometer. لقد أُثبتت هذه الملاحظة عملياً لدى دراسة تشتت الإلكترونات منخفضة الطاقة (0.1 eV) من على ذرات الغازات الخاملة، كغاز النيون Ne و الآرجون Ar. حيث تم مشاهدة إختراقية غير متوقعة لشعاع الإلكترونا ت الساقط عند هذه الطاقة. لقد تم ملاحظة هذا الأثر أولاً عن طريق العالمين رامسوير و تونسند Ramsauer-Townsend. و وصفت بأن هناك إختراقية رنينية. لمعالجة الظاهرة بشكل أدق نحتاج إلى إعتبار الجهد و حل معادلة شرودنجر في ثلاث أبعاد.

الشكل (5.11) يُوضح التسلسل الزمني لتشتت حزمة موجية من على جهد بئر متناهي عمقه يساوي ضعف طاقة الجسيم $V_0 = 2E$. التموجات هي للدالة الموجية (الجزء الحقيقي و التخيلي). بينما الموجة الجاوسية تمثل كثافة الإحتمالية. الحزمة تسقط من اليسار إلى اليمين. القيم الحادة التي تظهر في الشكل (د) إلى (ز) ناتجة عن التداخلات البناءة و الهدامة بين الموجة المتقدمة و المنعكسة.

5.3 جهد البئر المتناهي: حالة الإرتباط
The finite potential well: bound state

لنعتبر الآن حالة الإرتباط حيث أن الطاقة الكلية للنظام تحقق $E < 0$ ، هذا يعني أن طاقة الحركة أقل من مقدار أو عمق طاقة الجهد، أي أن $K < V_0$. لاحظ أنه لايمكن أن تكون $E < -V_0$ لأن هذا يعني أن طاقة الحركة سالبة. يمكن أن نُعَبِّر عن الطاقة الكلية بدلالة قيمتها المطلقة من العلاقة $E = -|E|$. لو عرفنا المعاملات التالية

$$\kappa^2 \equiv \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \tag{5.32}$$

و

$$q^2 \equiv \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}. \tag{5.33}$$

من الواضح أن كلاً من $\kappa^2, q^2 > 0$ و بالتالي قيم κ و q حقيقية . جدول (5.2) يلخص حلول النظام و كثافات التيارات له في جميع المناطق عند $E < 0$.

جدول (5.2): معادلات شرودنجر و حلولها و كثافات التيارات لجميع مناطق جهد البئر المتناهي عند حالة الإرتباط.

المنطقة	$x > a$	$-a < x < a$	$x < -a$
العدد الموجي Wave number	$\kappa = \frac{\sqrt{2m\|E\|}}{\hbar}$	$q = \frac{\sqrt{2m(V_0-\|E\|)}}{\hbar}$	$\kappa = \frac{\sqrt{2m\|E\|}}{\hbar}$
معادلة شرودنجر Schrödinger equation	$d^2\psi/dx^2 - \kappa^2\psi = 0$	$d^2\psi/dx^2 + q^2\psi = 0$	$d^2\psi/dx^2 - \kappa^2\psi = 0$
الدالة الموجية Wave function	الحل العام هو $De^{-\kappa x} + D'e^{\kappa x}$ من شرط التناهي عندما $x \to \infty \Rightarrow D' = 0$ يصبح الحل الخاص $De^{-\kappa x}$	حالة إرتباط نختار الحل الجيبي $A\cos qx + B\sin qx$ عوضاً عن الموجة المستوية لدينا حل زوجي و حل فردي نختار أحد الحلين فقط، إما $A = 0$ or $B = 0$	الحل العام هو $Ce^{\kappa x} + C'e^{-\kappa x}$ من شرط التناهي عندما $x \to -\infty \Rightarrow C' = 0$ يصبح الحل الخاص $Ce^{\kappa x}$
كثافة التيار Current density	0	لابد أن تكون 0 لإنحفاظ التيار	0

نكتب الحل الدالة الموجية كالتالي

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & x < -a, \\ A\cos qx \text{ or } B\sin qx & -a < x < a, \\ De^{-\kappa x} & x > a. \end{cases} \tag{5.34}$$

بسبب حالة الإرتباط فإن كثافات التيار في جميع المناطق صفر. لاحظ أن كثافة التيار في المنطقة $-a < x < a$ لم تحسب بل تُنبأ بها من قانون حفظ التيار، من السهل إثبات عدم و جود تيار في المنطقة $-a < x < a$ إذا إعتبرنا $A = 0$ أو $B = 0$.

سؤال (5.2): أثبت أنه لايوجد تيار في حالة الإرتباط للجهد المتناهي و ذلك بحساب كثافة التيارات في المناطق $x < -a$، $-a < x < a$، و $x > a$ و إعتبر الحل الزوجي فقط $B = 0$. ♢

بتحقيق شرط إستمرارية الدالة الموجية و مشتقتها، على الترتيب، عند نقاط إنقطاع الجهد نحصل على التالي

1. عند $x = -a$:

$$Ce^{-\kappa a} = A\cos qa - B\sin qa,$$

و

$$\kappa Ce^{-\kappa a} = q(A\sin qa + B\cos qa),$$

حيث نحصل منهما على

$$\kappa = q\frac{A\sin qa + B\cos qa}{A\cos qa - B\sin qa}. \tag{5.35}$$

2. عند $x = a$:

$$De^{-\kappa a} = A\cos qa + B\sin qa,$$

و

$$-\kappa De^{-\kappa a} = -q(A\sin qa - B\cos qa),$$

حيث نحصل منهما على

$$\kappa = q\frac{A\sin qa - B\cos qa}{A\cos qa + B\sin qa}. \tag{5.36}$$

بمساواة المعادلتين (5.35) و (5.36) و ضرب الوسطين في الطرفين نحصل على

$$\begin{aligned}(A^2+B^2)\sin qa\cos qa + AB(\sin^2 qa + \cos^2 qa)\\ = \quad (A^2+B^2)\sin qa\cos qa - AB(\sin^2 qa + \cos^2 qa),\end{aligned}$$

أي أن $AB = 0$. مما يعني أن الحل إما أن يكون زوجياً لـ x ($B = 0$) أو فردياً لـ x ($A = 0$)، كما هو الحال تماماً في جهد البئر اللانهائي. إن الشكل التقريبي للدالة الموجية للحل الزوجي و الفردي يعطى في الشكل (5.12) و الشكل (5.13)، على الترتيب. لاحظ إن الحالة الكمية بدون عقد هي للحل الزوجي و تمثل حالة أقل طاقة ممكنة للنظام. لو أخذنا أي من الحلين الزوجي ($B = 0$) أو الفردي ($A = 0$) في أي من المعادلتين (5.35) و (5.36) نحصل على المعادلات المتسامية transcendental equations التالية و التي تحدد شروط طاقات الحالات الممكنة، للحل الزوجي نحصل على

$$\kappa = q\tan qa, \tag{5.37}$$

و للحل الفردي

$$\kappa = -q\cot qa. \tag{5.38}$$

سنقوم الآن بدراسة كل حل بشكل منفصل و التعرف على كيفية الحصول على حالات الترابط المميزة eigenstates و طاقاتها الممكنة. سنبدأ أولاً بالحل الزوجي ثم الحل الفردي كحالتين منفصلتين.

5.3.1 الحل الزوجي The even solution

من علاقة مربع العدد الموجي q^2 (5.33) نحصل على

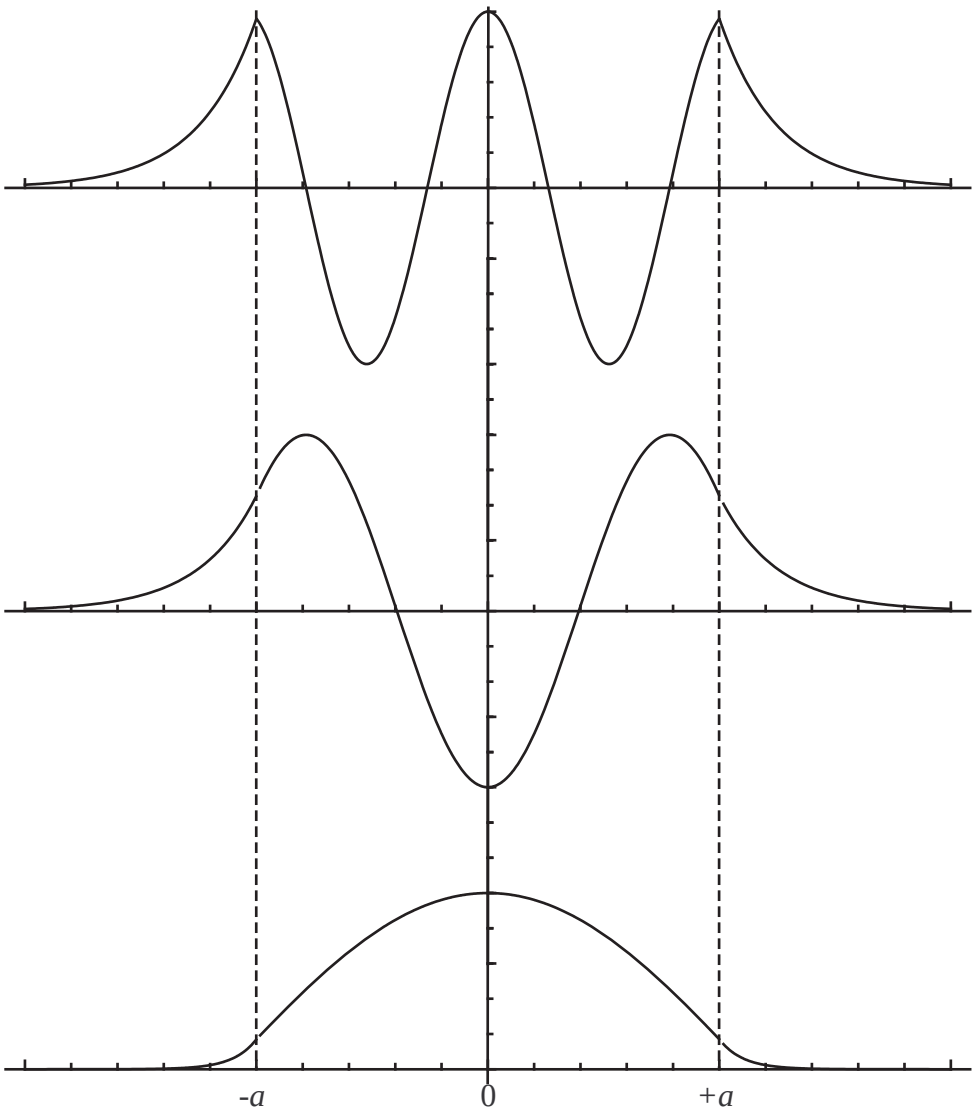
$$q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2m|E|}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - \kappa^2,$$

بالضرب بـ a^2 نحصل على

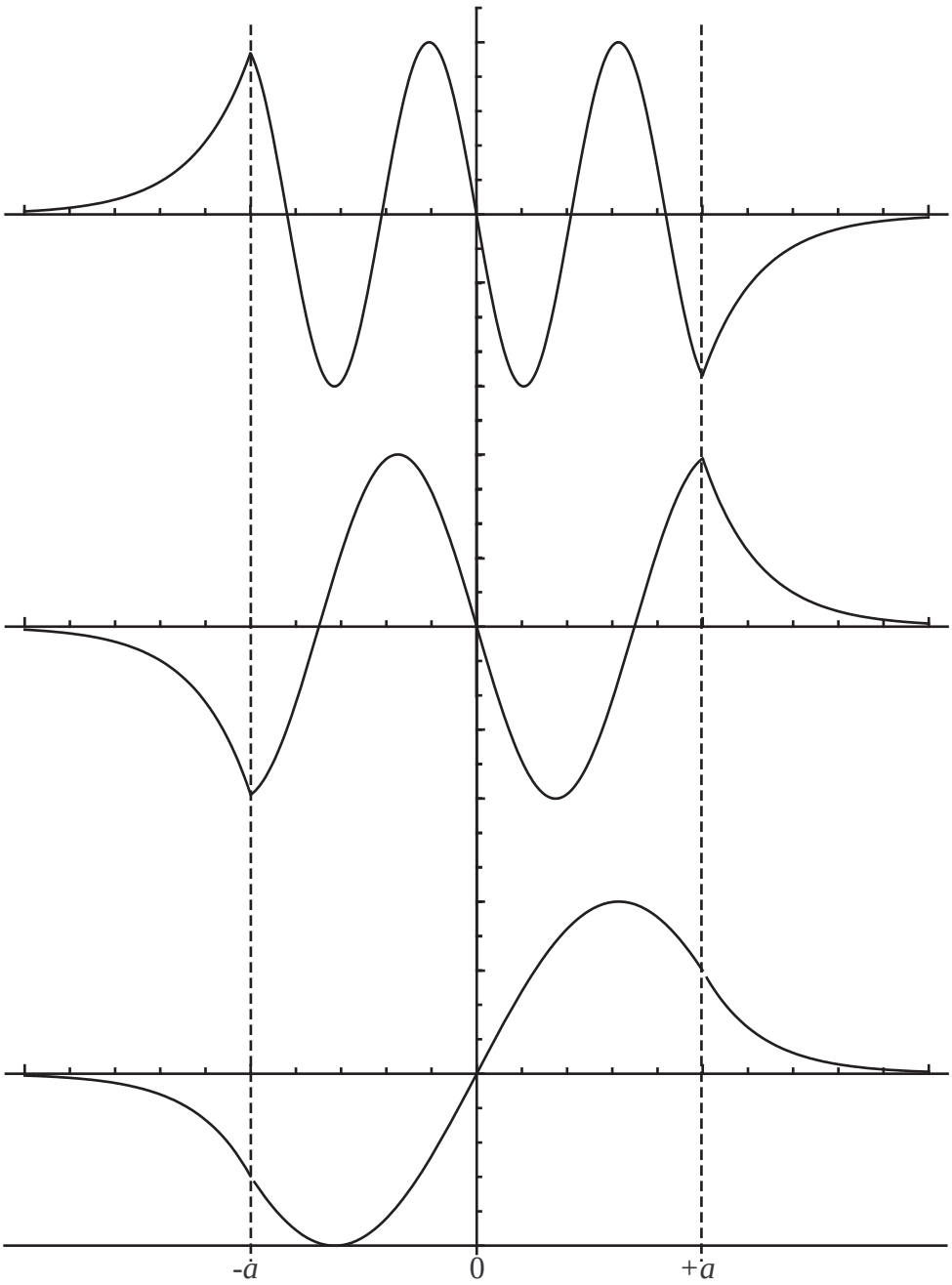
$$q^2a^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} - \kappa^2a^2.$$

نعرف البارامترات عديمة الأبعاد dimensionless parameters (أي متغيرات ليس لها وحدات فيزيائية) التالية

$$y = qa, \tag{5.39}$$



شكل (5.12): الحلول الزوجية لأقل ثلاث حالات طيفية متقطعة لجسيم في جهد البئر التجاذبي. طاقة الجسيم في الشكل تزداد من أسفل إلى أعلى. لاحظ الحلول الجيبية داخل حدود الجهد و الإنحلالات الأسية خارج نطاق الجهد و الذي يتفق مع شرط تناهي الحلول.



شكل (5.13): الحلول الفردية لأقل ثلاث حالات طيفية متقطعة لجسيم في جهد البئر التجاذبي. طاقة الجسيم في الشكل تزداد من أسفل إلى أعلى. لاحظ الحلول الجيبية داخل حدود الجهد و الإنحلالات الأسية خارج نطاق الجهد و الذي يتفق مع شرط تناهي الحلول.

و

$$z = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}, \tag{5.40}$$

وبالتالي نحصل على $y^2 = z - \kappa^2 a^2$ أو

$$\kappa = \sqrt{z - y^2}/a. \tag{5.41}$$

بتعويض (5.39) و (5.41) في المعادلة (5.37) نحصل على

$$\frac{\sqrt{z - y^2}}{y} = \tan y, \tag{5.42}$$

و الذي يعطي شكلاً آخراً للمعادلة المتسامية للحلول الزوجية بمتغيرات عديمة الأبعاد. إن حل المعادلة (5.42) يمكن الحصول علية برسم الدالة $\tan y$ و الدالة $\sqrt{z - y^2}/y$ كدوال لجميع قيم y الممكنة (لاحظ أنه يجب أن تكون $y > 0$، لماذا؟) و إيجاد نقاط التقاطع و التي تحدد الحلول الممكنة و بالتالي القيم المميزة لحالات الإرتباط الممكنة. هذا الرسم يعطى في الشكل (5.14).

من الشكل نجد أنه كلما زادت قيمة z فإن المنحنى $\sqrt{z - y^2}/y$ يرتفع أكثر و يتقاطع مع الدالة $\tan y$ بنقاط أكثر، أي أن عدد حالات الإرتباط المميزة bound eigenstates تزداد. لاحظ أن قيمة z تزداد كلما زاد عمق الجهد V_0 و/أو زاد عرضه a. هذا منطقي لأن زيادة عمق أو عرض الجهد لابد أن يسمح بحالات إرتباط مميزة أكثر. كذلك يبين الشكل أنه مهما كانت قيمة z صغيرة، فإنه على الأقل يوجد حالة إرتباط bound state واحدة ممكنة. هذه خاصية مميزة فقط لجهود البعد الواحد التجاذبية one-dimesional attractive potentials و لا تنطبق على الجهود التجاذبية في ثلاث أبعاد، لسبب سنراه لاحقاً.

عندما تصبح قيمة z كبيرة كفاية، أي جهد عميق و عريض، فإن المنحنى $\sqrt{z - y^2}/y$ يرتفع أكثر ليقاطع المنحنى $\tan y$ عند حدود الخطوط التقريبية. عندها تصبح القيم المميزة متساوية البعد عن بعضها البعض كلما زادت y، و تحدث نقاط التقاطع تقريباً عند قيم $y = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \ldots$، أو بشكل عام

$$y = qa \simeq (n - \frac{1}{2})\pi; \qquad n = 1, 2, 3, \ldots. \tag{5.43}$$

إذا ما قارنا النتيجة أعلاه مع المعادلات (4.12) إلى (4.13)، سنجد أن معادلة (5.43) تماثل شرط القيم المميزة للحلول الزوجية للجهد اللانهائي. إذاً يكفي أن يكون الجهد عميق و عريض كفاية كي تصبح قيمة z كبيرة كفاية و يتحقق الشرط (5.43) لنحصل على حالة فيزيائية تماثل جهد البئر اللانهائي. مقادير الطاقة المميزة لكل حالة مميزة من حالات الترابط يمكن أن تحسب بتربيع معادلة (5.43) و تعويض قيمة q^2 من التعريف (5.33) و إستخدام $|E| = -E$ لنحصل على

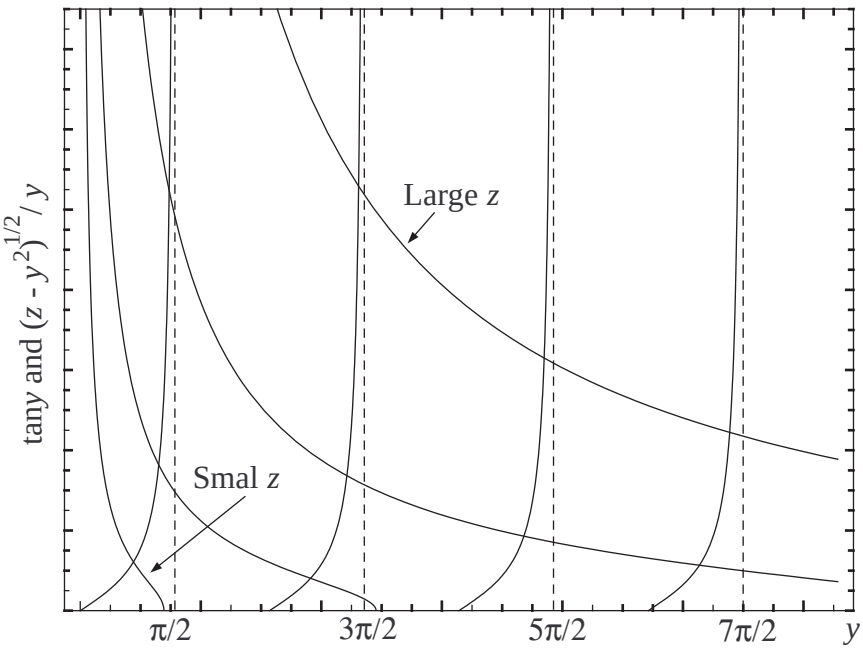
$$E = -V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2(n - \frac{1}{2})^2}{2ma^2}. \tag{5.44}$$

بما أن E تمثل الطاقة الكلية للنظام، فإن الحد الأول يمثل طاقة الجهد و الحد الثاني يمثل إذاً طاقة الحركة. إذا كانت $V_0 = 0$ فإن قيم الطاقة المميزة في (5.44) هي نفسها في (4.13).

5.3.2 الحل الفردي The odd solution

لنختبر الآن الحل الفردي عندما $A = 0$. بتعويض المتغيرات عديمة الأبعاد في (5.39)، (5.40)، و (5.41) في المعادلة المتسامية للحل الفردي (5.38) نحصل على شرط القيم المميزة

$$\frac{\sqrt{z - y^2}}{y} = -\cot y. \tag{5.45}$$



شكل (5.14): مواقع القيم المميزة المتقطعة أو الطيف المتقطع للحلول الزوجية لجهد البئر المتناهي في بعد واحد. المنحنيات المتزايدة تمثل $\tan y$، بينما المنحنيات المتناقصة تمثل $\sqrt{z-y^2}/y$ عند قيم مختلفة لـ z من الأصغر (أسفل) إلى الأكبر (للأعلى).

بما أن $\tan(y+\pi/2) = -\cot y$، فإن رسمة العلاقة $-\cot y$ كدالة لـ y هي نفسها لـ $\tan y$ كما في الشكل (5.14) مع إزاحة الخطوط التقربية بمقدار $\pi/2$ بإتجاه إزدياد y (إلى اليمين). رسم $-\cot y$ و $\sqrt{z-y^2}/y$ كدوال لجميع قيم y الممكنة موضح في الشكل (5.15).

على عكس الحلول الزوجية، فإن الحلول الفردية لاتعطي دائماً حالات إرتباط. فإذا وصل المنحنى المتناقص $\sqrt{z-y^2}/y$ إلى الصفر قبل أن تصل y إلى $\pi/2$، لاتوجد عندئذ أي نقاط تقاطع بين المنحنى المتناقص $\sqrt{z-y^2}/y$ و الدالة $-\cot y$ ومن ثم لاتوجد أي حالات إرتباط ممكنة للنظام. يمكن القول هنا أن شرط حدوث التقاطع بين $\sqrt{z-y^2}/y$ و $-\cot y$ و بالتالي وجود قيمة مميزة لحالة إرتباط eigenvalue for bound state يمكن أن يكتب كالتالي

$$\left.\frac{\sqrt{z-y^2}}{y}\right|_{y=\frac{\pi}{2}} > 0,$$

أو أن القيمة داخل الجذر يجب أن تكون أكبر من الصفر، إذاً

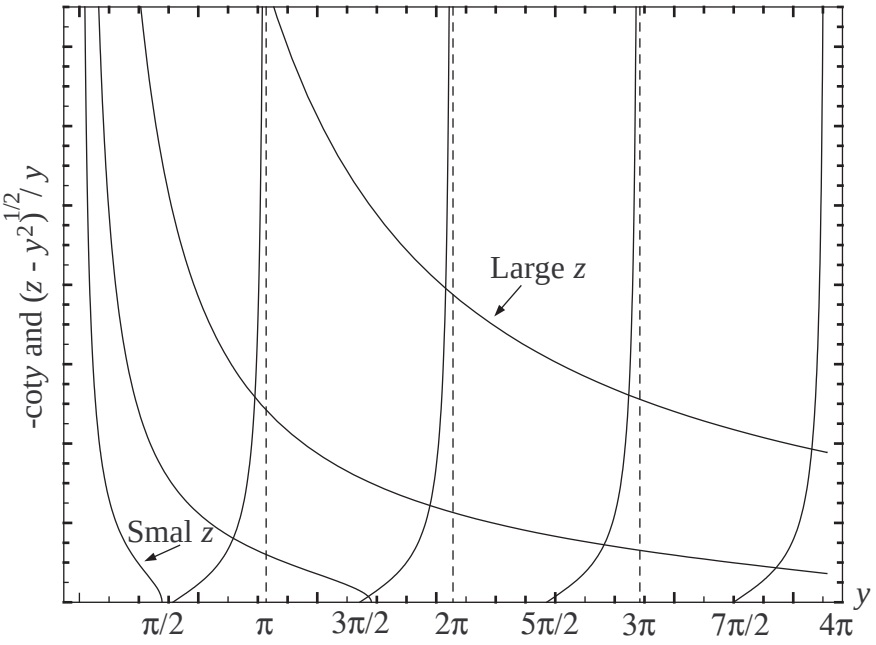
$$\left. z-y^2\right|_{y=\frac{\pi}{2}} > 0 \;\Rightarrow\; z > \frac{\pi^2}{4}.$$

بإستخدام العلاقة (5.40) للتعويض عن z لنحصل على شرط حدوث حالة إرتباط واحد على الأقل هو

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}.$$

بشكل آخر نقول أنه إذا تحقق الشرط التالي بمواصافات جهد البئر المتناهي في بعد واحد للحل الفردي

$$V_0a^2 > \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}, \tag{5.46}$$



شكل (5.15): مواقع القيم المميزة المتقطعة أو الطيف المتقطع للحلول الفردية لجهد البئر المتناهي في بعد واحد. المنحنيات المتزايدة تمثل $-\cot y$، بينما المنحنيات المتناقصة تمثل $\sqrt{z-y^2}/y$ عند قيم مختلفة لـ z من الأصغر (أسفل) إلى الأكبر (للأعلى).

فإنه على الأقل توجد حالة إرتباط واحدة ممكنة لهذا الجهد. عندما تصبح قيمة z كبيرة كفاية، وذلك للجهود العميقة و العريضة، فإن المنحنى $\sqrt{z-y^2}/y$ يرتفع أكثر ليقاطع المنحنى $-\cot y$ عند حدود الخطوط التقريبية. عندها تصبح القيم المميزة متساوية البعد عن بعضها البعض كلما زادت y، و تحدث نقاط التقاطع تقريباً عند قيم $y = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots$، أو بشكل عام

$$y = qa \simeq n\pi; \qquad n = 1, 2, 3, \ldots. \tag{5.47}$$

إذا ما قارنا النتيجة أعلاه مع المعادلات من (4.7) إلى (4.8)، سنجد أن المعادلة (5.47) تماثل شرط القيم المميزة للحلول الفردية للجهد اللانهائي. إذاً يكفي أن يكون الجهد عميق وعريض كفاية كي تصبح قيمة z كبيرة كفاية و يتحقق الشرط (5.47) لنحصل على حالة فيزيائية تماثل جهد البئر اللانهائي. مقادير الطاقة المميزة لكل حالة مميزة من حالات الترابط يمكن أن تحسب بتربيع معادلة (5.47) و التعويض عن قيمة q^2 من التعريف (5.33) و إستخدام $|E| = -E$ لنحصل على

$$E = -V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}. \tag{5.48}$$

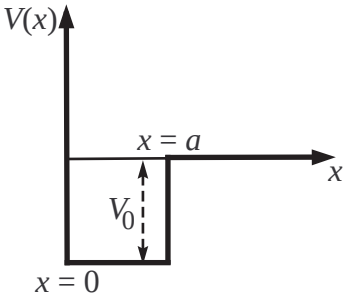
بما أن E تمثل الطاقة الكلية للنظام، فإن الحد الأول يمثل طاقة الجهد و الحد الثاني يمثل إذاً طاقة الحركة. إذا كانت $V_0 = 0$ فإن قيم الطاقة المميزة في (5.48) هي نفسها في (4.8).

إن الدوال المميزة للحلول الفردية، كما هو موضح في الشكل (5.13)، تختفي عند $x = 0$، و بالتالي فإن مسألة حالة الترابط للحل الفردي ستكون مكافئة تماماً لحالة الترابط للجهد التالي

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ -V_0 & a > x > 0, \\ 0 & x > a, \end{cases} \tag{5.49}$$

و الذي يُعْطى في الشكل (5.16). السبب يعود إلى أننا نتطلب من الدالة الموجية في حالة الجهد (5.49) أن تتفق مع الشرط $\psi(x = 0) = 0$. إن الجهد في (5.49) يمثل في حقيقة الأمر الجهد القطري radial potential لجهد

متناظر كروياً في ثلاث أبعاد. بما أن الحل لهذا النوع من الجهود فردياً، فإنه ليس بالضرورة وجود حالة إرتباط لهذا الجهد. نعمم و نقول أن جهود البئر التجاذبية و المتناظرة كروياً في ثلاث أبعاد قد لاتتضمن أي حالة إرتباط ممكنة.



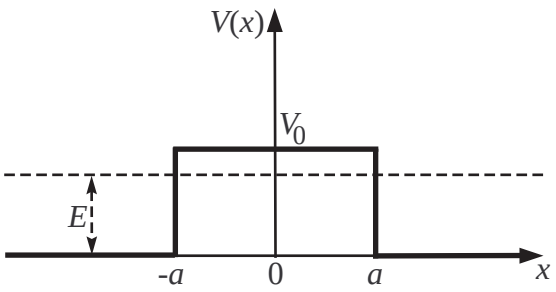
شكل (5.16): الجهد المعطى في (5.49) و المكافئ لمسألة حالات الترابط للحل الفردي لجهد البئر المتناهي في بعد واحد.

5.4 حاجز الجهد The potential barrier

لنعتبر جهد الحاجز كالتالي

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a, \\ V_0 & a > x > -a, \\ 0 & x > a, \end{cases} \tag{5.50}$$

و الموضح في الشكل (5.17). لنفترض أن هناك جسيم أُرسل من جهة اليسار أو الإتجاه من $-\infty$ إلى $+\infty$ بطاقة مقدارها E حيث أن $E < V_0$. عند هذه الطاقة، و حسب النظرية الكلاسيكية، لن يختراق الجسيم حاجز الجهد و سينعكس بإتجاه $-x$. لنُعَرِّف الأعداد الموجية خارج و داخل الجهد على التوالي



شكل (5.17): حاجز الجهد لجسيم يسقط بالإتجاه الموجب لـ x بطاقة أقل من إرتفاع الجهد. كلاسيكياً يجب أن ينعكس الجسيم تماماً.

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2},$$

و

$$q^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

حسب التعريف أعلاه نجد أن k و q حقيقيات. نعوض في معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (5.2) لإيجاد حلول النظام و كثافات التيارات له في جميع المناطق لنحصل على النتائج الموضحة في الجدول (5.3).

جدول (5.3): معادلات شرودنجر و حلولها و كثافات التيارات لجميع مناطق حاجز الجهد.

المنطقة	$x > a$	$-a < x < a$	$x < -a$
العدد الموجي Wave number	$k = \sqrt{2mE}/\hbar$	$q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$	$k = \sqrt{2mE}/\hbar$
معادلة شرودنجر Schrödinger equation	$d^2\psi/dx^2 + k^2\psi = 0$	$d^2\psi/dx^2 - q^2\psi = 0$	$d^2\psi/dx^2 + k^2\psi = 0$
الدالة الموجية Wave function	Te^{ikx}	$Ae^{qx} + Be^{-qx}$	$Ie^{ikx} + Re^{-ikx}$
كثافة التيار Current density	$\frac{\hbar k}{m}\|T\|^2$	$i\frac{\hbar q}{m}(A^*B - AB^*)$	$\frac{\hbar k}{m}(\|I\|^2 - \|R\|^2)$

الحل الكلي للدالة الموجية إذاً

$$\psi(x) = \begin{cases} Ie^{ikx} + Re^{-ikx} & x < -a, \\ Ae^{qx} + Be^{-qx} & -a < x < a, \\ Te^{ikx} & x > a. \end{cases} \tag{5.51}$$

نلاحظ أيضاً أن جميع كثافات التيار لاتعتمد على x، لماذا؟ قانون إنحفاظ التيار يفرض علينا التالي

$$\frac{\hbar k}{m}(|I|^2 - |R|^2) = i\frac{\hbar q}{m}(A^*B - AB^*) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2 = 0. \tag{5.52}$$

إذا كانت ثوابت الحل (السعات) A و B قيم حقيقية فهذا يعني أن التيار في المنطقة $-a < x < a$ يساوي الصفر، و الذي يعني أنه لاتوجد إختراقية لأن $|T|^2 = 0$ و الإنعكاسية تصبح $|R|^2 = 1$، أي أنها تتفق مع التنبآت الكلاسيكية. لكن كما سنرى لاحقاً، التنبآت الكلاسيكية غير دقيقة، و سنجد أنه توجد نفاذية للجسيم خلال المنطقة المحظورة كلاسيكياً $-a < x < a$، مما يعني أن $|T|^2 \neq 0$ و $|R|^2 \neq 1$. لهذا فإننا نتطلب أن تكون الدالة الموجية في المنطقة $-a < x < a$ غير حقيقية لكي يصبح التيار لايساوي الصفر. لكن الدالة الأسية $e^{\pm qx}$ حقيقية. لهذا نعتبر ثوابت الحل A و B مركبة. أي أن $A \neq A^*$ و $B \neq B^*$. لدى فرض هذا الشرط، نجد أن كثافة التيار في المنطقة الثانية $-a < x < a$ تصبح

$$J_2 = i\frac{\hbar q}{m}(A^*B - AB^*). \tag{5.53}$$

من السهل إثبات أن كثافة التيار حقيقية، أي أن $J_2 = J_2^*$ بالرغم من إحتوائه على قيم مركبة و أعداد تخيلية. إن كثافة التيار قيمة مقاسة عملياً، لذلك يجب أن تكون حقيقية.

سؤال (5.3): بإستخدام تعريف كثافة التيار (2.41) للدالة الموجية (5.51) أثبت كثافة التيار في المنطقة $-a < x < a$ تعطى من العلاقة (5.53). أثبت كذلك أن كثافة التيار في (5.53) حقيقية (يكفي أن تثبت أن

$\diamondsuit$.$(J_2^* = J_2$

كذلك نستنبط من علاقة إنحفاظ التيار (5.52) أن

$$|R|^2 + |T|^2 = |I|^2 \tag{5.54}$$

بإستخدام التعاريف (5.15) و (5.16) نجد أن $P_R = |R|^2/|I|^2$ تمثل إحتمالية الإنعكاسية و $P_T = |T|^2/|I|^2$ تمثل إحتمالية النفاذية مما ينسجم مع المعادلة (5.54) لأن مجموعهما معاير إلى الوحدة.

يمكننا بتحقيق شرط إستمرارية الدالة الموجية و مشتقتها عند نقاط إنقطاع الجهد أن نحسب سعات الإنعكاسية R و النفاذية T بمعلومية سعة الموجة الساقطة I، كما فعلنا في المرات السابقة. لكن لو قارنا بين حل الدالة الموجية لحاجز الجهد في المعادلة (5.51) مع الدالة الموجية للتشتت على جهد البئر المتناهي في المعادلة (5.25) فإن الحلين سوف يتطابقان لو أستبدلنا العدد الموجي q بـ iq في المعادلة (5.51)، حيث أن q حقيقية. لهذا السبب يمكننا إستخدام سعات الإنعكاسية R و النفاذية T لجسيم يتشتت على جهد البئر المتناهي في المعادلتين (5.28) و (5.29) على الترتيب، و إستبدال العدد الموجي q بـ iq للحصول على سعات الإنعكاسية R و النفاذية T لجسيم يسقط على حاجز الجهد، لنحصل إذاً على

$$R = iIe^{-2ika}\frac{(-q^2-k^2)\sin 2iqa}{2ikq\cos 2iqa - i(-q^2+k^2)\sin 2iqa},$$

لكن $\sin ix = i\sinh x$ و $\cos ix = \cosh x$ كما هو معروف[1]. إذاً نحصل على صيغة لسعة الإنعكاسية R كالتالي

$$R = -iIe^{-2ika}\frac{(q^2+k^2)\sinh 2qa}{2kq\cosh 2qa - i(k^2-q^2)\sinh 2qa}, \tag{5.55}$$

و بنفس الطريقة يمكن أن نحسب سعة النفاذية T لتصبح

$$T = Ie^{-2ika}\frac{2kq}{2kq\cosh 2qa - i(k^2-q^2)\sinh 2qa}, \tag{5.56}$$

و منه نحسب إحتمالية النفاذية $P_T = |T|^2$ لتكون

$$\begin{aligned} T^*T &= I^*\frac{2kqe^{2ika}}{2kq\cosh 2qa + i(k^2-q^2)\sinh 2qa} \times I\frac{2kqe^{-2ika}}{2kq\cosh 2qa - i(k^2-q^2)\sinh 2qa}, \\ &= |I|^2\frac{(2kq)^2}{(2kq)^2\cosh^2 2qa + (k^2-q^2)^2\sinh^2 2qa}, \\ &= |I|^2\frac{(2kq)^2}{(2kq)^2\cosh^2 2qa + (k^2+q^2)^2\sinh^2 2qa - (2kq)^2\sinh^2 2qa}. \end{aligned}$$

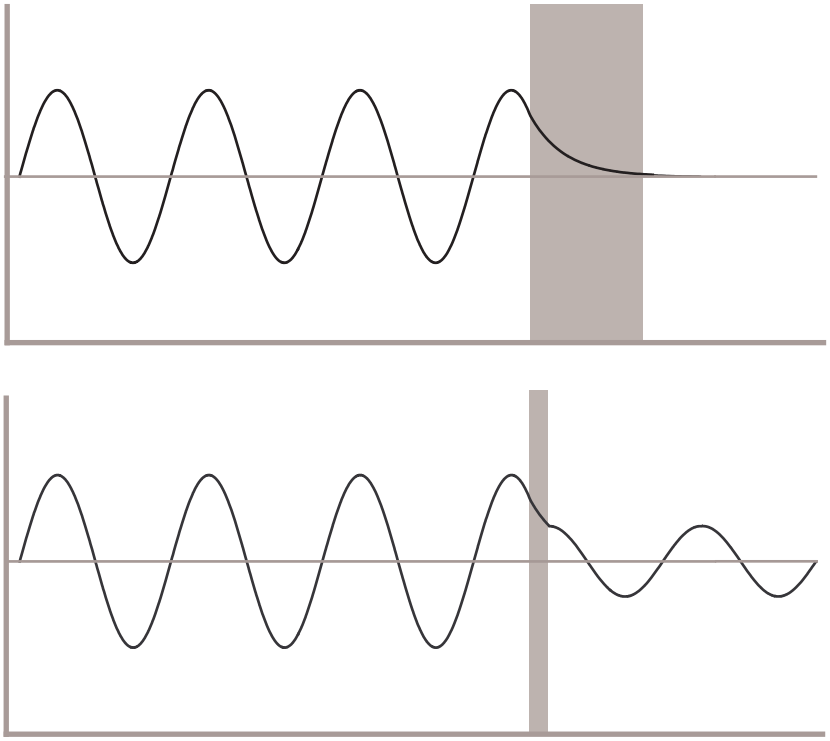
بإستخدام العلاقة $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$، نحصل على النفاذية

$$|T|^2 = \frac{(2kq)^2}{(2kq)^2 + (k^2+q^2)^2\sinh^2 2aq}|I|^2. \tag{5.57}$$

من الواضح أن $|T|^2 \neq 0$. أي أنه يمكن أن يحدث أختراق على الرغم من أن طاقة الجسيم أقل من قمة حاجز الجهد.

---

[1] نعلم أن $\sin x = (e^{ix} - e^{-ix})/2i$ كذلك فإن $\sinh x = (e^x - e^{-x})/2$. بالمقابل فإن $\cos x = (e^{ix} + e^{-ix})/2$ و $\cosh x = (e^x + e^{-x})/2$.



شكل (5.18): أثر عرض حاجز الجهد على إحتمالية النفاذية.

هذه الظاهرة هي ظاهرة موجية و في ميكانيكا الكم و صفت هذه الظاهرة للجسيمات. تسمى هذه الظاهرة بظاهرة التنفق tunneling effect، و هي مثبتة عملياً في العديد من المشاهدات التجريبية. فعلى سبيل المثال لوحظ أن هناك إنتقال لحاملات الشحن في موصلين غير متصلين مع بعضهما البعض (يوجد فجوة صغيرة نسبياً بين الموصلين) إذا وصل أحدهما عند فرق جهد عكسي مناسب. كذلك في إنحلال α للأنوية الثقيلة، فإن ظاهرة التنفق تفسر كيفية إختراق جسيمات α لحاجز الجهد الكولومي للأنوية الأم بالرغم من أن طاقة جسيمات α أقل من قمة حاجز الجهد الكولومي و بالتالي تفسر الزمن الطويل نسبياً اللازم لحدوث تحلل α مقارنة مع باقي التحللات النووية الأخرى كإنبعاث إشعة γ.

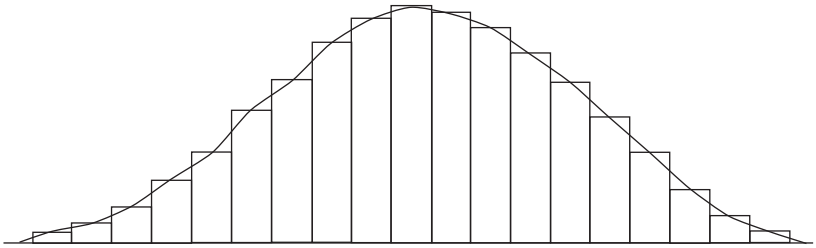
لاحظ الحساسية الكبيرة للنفاذية $|T|^2$ لعرض حاجز الجهد بسبب الدالة $\sinh^2 2aq$ في مقام العلاقة (5.57). إذا كان العرض $2a$ كبيراً فإن $|T|^2 \to 0$ و يحدث إضمحلال أُسّي للدالة الموجية داخل الجهد. إن أثر عرض حاجز الجهد على النفاذية موضح في الشكل (5.18). العلاقة (5.57) صالحة فقط للجهد المنتظم الشكل المعطى في الشكل (5.17). لكن بشكل عام حاجز الجهد الذي تحدث فيه ظاهرة التَنَفُّق غير منتظم الشكل، و عليه لدراسة أي تطبيقات لظاهرة التنفق نحتاج إلى الحصول على صيغة عامة للنفاذية $|T|^2$ صالح للتطبيق لأي حاجز جهد بغض النظر عن شكل الجهد. لكن في واقع الأمر لايوجد أي صيغة عامة لـ $|T|^2$ و لكن يمكن إيجاد صيغة عامة تقريبية لـ$|T|^2$ صالحة بشكل تقريبي لأي حاجز جهد غير منتظم الشكل. هذا التقريب مقبول في حالتين، إحداهما رياضية-فيزيائية و الأخرى هندسية تتعلق بشكل الجهد.

الحالة الأولى نعتبر أن $aq \gg 1$، حيث أن aq تُعْطى من

$$aq = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0 - E)}.$$

و عليه تصبح $|T|^2$ في العلاقة (5.57) كالتالي

$$|T|^2 = \frac{|I|^2(2kq)^2}{\frac{(2kq)^2}{\sinh^2 2aq} + (k^2+q^2)^2} \sinh^{-2} 2aq \simeq |I|^2 \frac{(2kq)^2}{(k^2+q^2)^2} \sinh^{-2} 2aq.$$



شكل (5.19): تقريب حاجز الجهد المنحني الأملس كتراص متعدد من حواجز جهد جزئية مستطيلة و منتظمة.

لاحظ أنه بشكل عام عندما $x \gg 1$ فإن $\sinh x \gg 1$ و لهذا يمكن أن نكتب $\sinh^2 x \sim e^{2x}$. وعليه تصبح النفاذية $|T|^2$ كالتالي

$$|T|^2 \simeq |I|^2 \left(\frac{2kq}{k^2+q^2}\right)^2 e^{-4aq}, \tag{5.58}$$

بسبب العامل e^{-4aq} في العلاقة (5.58)، فإن إحتمالية النفاذية ستكون حساسة لعرض حاجز الجهد و فرق الإرتفاع بين الجهد و طاقة الجسيم الساقط على الجهد. لو أخذنا اللوغاريثم الطبيعي للعلاقة (5.58) نحصل على

$$\begin{aligned} \log P_T = \log(|T|^2/|I|^2) &\simeq -4aq + 2\log\frac{2kq}{k^2+q^2}, \\ &\simeq -(2a)(2q) + 2\log\frac{2(ka)(aq)}{(ka)^2+(aq)^2}. \end{aligned}$$

من الواضح أن الحد الأول يهيمن على الحد الثاني في مجمل الظروف لأي حاجز جهد له قيمة qa معقولة.

حالة التقريب الثانية فيما يتعلق بشكل حاجز الجهد نفسه. حيث نعتبر حاجز الجهد المنحني الأملس smoothed curve potential barrier عبارة عن تراص متعدد من حواجز جهد مستطيلة و منتظمة، كما هو موضح في الشكل (5.19). لو إعتبرنا أن إحتمال النفاذية لكل حاجز جهد جزئي صغيرة، مما يعني أن معظم الفيض منعكس و النفاذية خلال كل شريحة حاجز جهد جزئي مستقلة و قليلة الإحتمالية مقارنة مع الشريحة السابقة، يمكن كتابة علاقة النفاذية على الشكل

$$\begin{aligned} \log P_T &\approx \sum_n \log P_T^{(n)}, \\ &\approx -2\sum_n \Delta x_n \langle q_n \rangle, \end{aligned}$$

حيث $P_T^{(i)}$ و Δx_i تمثلان إحتمال النفاذية و عرض الحاجز للجهد الجزئي رقم i، على الترتيب. و $\langle q_i \rangle$ تمثل متوسط قيمة q للجسيم عند نفس الحاجز الجزئي i. في حالة وجود عدد كبير و ضيق من الجهود الجزئية نستعيض عن المجموع بإجراء تكامل بالنسبة على عنصر العرض لهذه الجهود الجزئية dx لنحصل على

$$\log P_T \approx -2\int_{\text{barrier}} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]}, \tag{5.59}$$

حيث أن التكامل على مسار الحاجز و التي يكون عند نقاطها $V(x) > E$ حتى يكون الجذرفي التكامل أعلاه حقيقي. عند نقاط الإلتفاف، حيث يكون مقدار الجهد قريب من قيمة الطاقة، فإن تقريب الحالة الأولى $qa \gg 1$ يفشل و بالتالي الصيغة (5.58) لا تعتبر تقريباً مقبولاً للعلاقة (5.57) و بالتالي تصبح العلاقة التقريبية (5.59) أقل دقة. كذلك نتطلب أن تكون دالة الجهد $V(x)$ بطيئة التغير بالنسبة لـ x. فلو كانت $V(x)$ تتغير بسرعة مع x، فإن الجهود الجزئية المتراصة لتقريب الجهد المنحني تصبح ضيقة جداً و بالتالي فإن a تصبح صغيرة و مرة أخرى يفشل تقريب الحالة الأولى $qa \gg 1$ و بالتالي فإن الصيغة (5.58) تعتبر تقريباً غير مقبول للعلاقة (5.57).

5.5 جهد دالة دلتا The delta-function potential

إن دالة دلتا لديراك Dirac delta function تصل إلى ملانهاية عند النقطة المعرفة عليها الدالة و صفراً خلاف تلك النقطة. لكن عرضها ضيق جداً بل متناهي في الصغر، ومساحتها تساوي الوحدة. إن دالة دلتا لاتعيش إلا في داخل التكامل فهي في الفيزياء النظرية كما هو الفيروس في الأحياء الدقيقة، حيث يعيش الفيروس داخل الخلية الحية. الفرق أن دالة دلتا لا تتكاثر على حساب التكامل بل و تعطي للتكامل قيمة أسهل، بينما الفيروس يدمر الخلية الحية من أجل مضاعفة جنسه. لو عرفنا الجهد التالي في بعد واحد

$$V(x) = -aV_0\delta(x), \tag{5.60}$$

حيث a و V_0 ثوابت موجبة.

سؤال (5.4): ماهي وحدة $\delta(x)$ في بعد واحد؟ ماهي وحدة a إذا كانت V_0 لها وحدة الطاقة؟ $\diamondsuit$

إن جهد دلتا قد يبدو للوهلة الأولى غير واقعياً و غير مفيد عملياً. في الواقع فقد ثبت أن هذا الجهد يعتبر نموذجاً مناسباً للعديد من النُظم الفيزيائية الحقيقية. أحد الأمثلة على ذلك الحد الفاصل العازل بين مادتين موصلتين، كوجود طبقة رقيقة جداً من أوكسيد المادة الموصلة حيث يمكن محاكاة هذه الطبقة الرقيقة بجهد دلتا. و بالتالي فإن إنتقال الشحن شبه الحرة من موصل لآخر عبر طبقة الأوكسيد يمكن أن تُمَثَّل كعملية التنفق خلال جهد دالة دلتا. كذلك مبدأ عمل مجهر المسح النفقي scanning tunneling microscope (STM) يعتمد بشكل كبير على تمثيل طبقة الهواء الحاجز بين مصدر الإلكترونات في رأس المجهر و الجسم المراد دراسته بجهد دالتا. سنقوم بدراسة نظام الجهد (5.60) عند حالة الإرتباط، عندما تكون الطاقة الكلية للنظام لدى تفاعل الجسيم مع الجهد سالبة $E < 0$، و عند حالة التشتت، عندما تكون طاقة النظام الكلية موجبة $E > 0$.

5.5.1 جهد دلتا: حالة الإرتباط Delta potential: bound state

لدينا معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن تعطى من العلاقة (5.2). عندما $x < 0$ فإن الجهد في (5.60) تُعْطى قيمته بـ $V(x) = 0$. و تصبح معادلة شرودنجر

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\psi(x) = \kappa^2\psi(x), \tag{5.61}$$

حيث أن

$$\kappa^2 \equiv \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2} > 0, \tag{5.62}$$

و الذي يعني أن κ حقيقية. الحل العام للمعادلة (5.61) عندما $x < 0$ يصبح

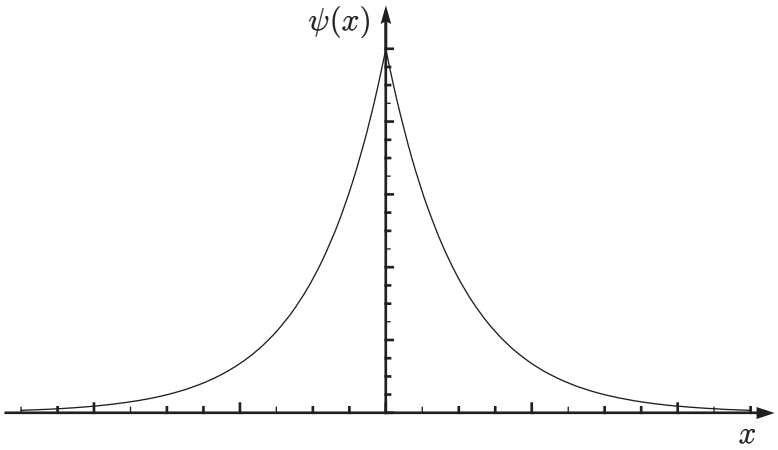
$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}.$$

الحد الثاني لايطيع شرط التناهي للدالة الموجية عندما $x \to -\infty$، لهذا نعتبر أن $B = 0$. و عليه يصبح الحل عندما $x < 0$

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x}, \qquad x < 0. \tag{5.63}$$

عندما $x > 0$ فإن الجهد (5.60) أيضاً قيمته صفر $V(x) = 0$. و تُعْطى معادلة شرودنجر أيضاً من العلاقة (5.61) مع الحل العام

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}.$$



شكل (5.20): الدالة الموجية عند حالة الترابط لجهد دالة دلتا.

مرة أخرى نجد أن الحد الأول لايطيع شرط التناهي للدالة الموجية عندما $x \to +\infty$، وبالتالي نعتبر $C = 0$. و عليه يصبح الحل عندما $x > 0$

$$\psi(x) = De^{-\kappa x}, \qquad x > 0. \tag{5.64}$$

إن شرط إستمرارية الدالة الموجية عند نقطة تغير الجهد يُعَبِّر عنه رياضياً بـ

$$\lim_{x\to 0^-} \psi(x) = \lim_{x\to 0^+} \psi(x),$$

ومنه نحصل على $A = D$. لهذا نكتب الحل

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x \leq 0, \\ Ae^{-\kappa x} & x \geq 0. \end{cases} \tag{5.65}$$

لاينطبق شرط إستمرارية مشتقة الدالة الموجية عند نقطة تغير الجهد في هذه الحالة لأن الجهد لانهائي infinte potential عند نقطة التغير ($x = 0$) لذلك إستمرارية المشتقة تصبح غير مُعَرَّفة، تماماً كما هو الحال في جهد البئر اللانهائي. إن شكل الدالة الموجية (5.65) موضح في الشكل (5.20). من الشكل واضح أن للدالة الموجية نقطة إنكسار عند النقطة $x = 0$. إن وجود نقاط إنكسار أو نقاط حادة sharp points لن يؤثر على قابلية التكامل للدالة الموجية the integrability of the wave function و بذلك لن يؤثر على شرط المعايرة. كذلك بسبب حالة الإرتباط و إنعدام التيار فإن قابلية الدالة الموجية للتفاضل the differentiability of the wave function ليست ذات مغزى في هذه الحالة. لكن من المؤكد أن مشتقة الدالة غير معَرَّفة عند النقاط الحادة، لهذا السبب لايمكن تطبيق شرط إستمرارية المشتقة للدالة الموجية عند $x = 0$. بالمقابل، سنقوم بخطوات دراسة معادلة شرودنجر عند $x = 0$ بنفس الطريقة التي أتبعناها لدى دراستنا لجهد العتبة لتحديد القيم المميزة الممكنة لحالات الإرتباط. نكامل معادلة الدالة الموجية (5.2) في الفترة $-\epsilon$ إلى $+\epsilon$ حيث ϵ أي عدد موجب و صغير بما فيه الكفاية. عند إجراء التكامل نحصل على

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} [V(x) - E]\psi(x) dx.$$

على إعتبار أن الطاقة الكلية E لاتعتمد على x، نكتب إذاً

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) dx = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x)dx - E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x)dx\right).$$

نعوض عن قيمة الجهد من التعريف (5.60) في المعادلة أعلاه، لنحصل على

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} d\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(-aV_0\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)dx - E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx\right).$$

الطرف الأيسر يمكن أن يُحَلْ ليصبح

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} d\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{+\epsilon} - \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{-\epsilon}.$$

بالنسبة للطرف الأيمن، و بسبب إستمرارية الدالة الموجية $\psi(x)$، فإن التكامل $\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx = 0$ ليصبح في التكامل أعلاه يساوي

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left(-aV_0\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)dx - E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx\right) = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}\psi(0).$$

بمساواة الطرفين ننتهي إلى

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{+\epsilon} - \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{-\epsilon} = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}\psi(0).$$

بأخذ $\epsilon \to 0$ نحصل على الشرط الذي يتعلق بتغير مشتقة الدالة الموجية عند نقطة تغير الجهد $x = 0$ كالتالي

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^+} - \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^-} = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}\psi(0). \tag{5.66}$$

من الحل (5.65)، نجد أن $\psi(0) = A$ ليصبح الطرف الأيمن للمعادلة (5.66) كالتالي

$$\frac{-2maV_0}{\hbar^2}\psi(0) = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}A,$$

بالمقابل فإن الحد الأول في الطرف الأيسر يصبح

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^+} = -\kappa A,$$

بينما الحد الثاني في الطرف الأيسر

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^-} = \kappa A.$$

بالتعويض إذاً في (5.66)، نحصل على

$$-\kappa A - \kappa A = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}A,$$

أو ننتهي إلى أن

$$\kappa = \frac{maV_0}{\hbar^2}. \tag{5.67}$$

بالتعويض في المعادلة (5.62) نحصل على قيمة الطاقة الكلية المسموحة لحالة الإرتباط

$$E = \frac{-ma^2V_0^2}{2\hbar^2}. \tag{5.68}$$

من الواضح أن جهد دالة دلتا له حالة إرتباط bound state واحدة مسموح بها، بغض النظر عن قوة هذا الجهد و الذي يُحدد من مقدار V_0 و a. بقي لنا معايرة الدالة الموجية (5.65). من شرط المعايرة نحصل على

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{0} e^{2\kappa x} dx + |A|^2 \int_{0}^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = 2|A|^2 \int_{0}^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|A|^2}{\kappa},$$

و بالتالي نحصل على

$$|A| = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{maV_0}{\hbar^2}},$$

عندئذ يمكن كتابة الدالة الموجية (5.65) بالشكل العام مع إهمال معامل الطور الناتج من إعتبار $|A|$ هو A لنحصل على

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{maV_0}{\hbar^2}} e^{-maV_0|x|/\hbar^2}. \tag{5.69}$$

5.5.2 جهد دلتا: حالة التشتت Delta potential: scattering state

لنفترض أن هناك جسيم أُرْسِل من جهة اليسار إلى اليمين، أو بالإتجاه من $-\infty$ إلى $+\infty$. قيمة الجهد (5.60) في المنطقتين $x < 0$ و $x > 0$ تصبح $V(x) = 0$. عندئذٍ معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن في العلاقة (5.2) تُكْتب كالتالي

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\psi(x) = k^2\psi(x), \tag{5.70}$$

حيث أن

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{5.71}$$

و الذي يعني أن k حقيقية لأن $E > 0$ أي حالة تشتت. الحل العام لمعادلة (5.70) عند $x < 0$ و $x > 0$ على الترتيب تصبح

$$\psi(x) = \begin{cases} Ie^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0, \\ Te^{ikx} & x > 0. \end{cases} \tag{5.72}$$

كما هو متوقع من دراساتنا السابقة للتشتت على جهد العتبة، جهد البئر، أو حاجز الجهد، يوجد لدينا تيار ساقط $\frac{\hbar k}{m}|I|^2$ على الجهد، جزء منه مقداره $\frac{\hbar k}{m}|R|^2$ ينعكس و الباقي مقداره $\frac{\hbar k}{m}|T|^2$ ينْفُذ. إحتمالية الإنعكاسية و النفاذية تحسبان من سعات الإنعكاسية R و النفاذية T. إن قانون إنحفاظ التيار يُعْطي

$$\frac{\hbar k}{m}(|I|^2 - |R|^2) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2,$$

و الذي يعني أن مجموع الإنعكاسية و النفاذية يساويان السقوطية، أي أن

$$|R|^2 + |T|^2 = |I|^2, \tag{5.73}$$

بإستخدام التعاريف (5.15) و (5.16) نجد أن $P_R = |R|^2/|I|^2$ تمثل إحتمالية الإنعكاسية و $P_T = |T|^2/|I|^2$ تمثل إحتمالية النفاذية مما ينسجم مع المعادلة (5.73). إن شرط إستمرارية الدالة الموجية (5.72) عند $x = 0$ يتطلب أن تكون

$$I + R = T. \tag{5.74}$$

بسبب لانهائية الجهد فإن مشتقة الدالة الموجية غير متصلة. بإتباع الخطوات السابقة من تكامل معادلة الدالة الموجية (5.72) في الفترة $-\epsilon$ إلى $+\epsilon$ حيث ϵ أي عدد موجب و صغير بما فيه الكفاية لنحصل في النهاية على العلاقة (5.66)، وبالتعويض بكل حد من حدود هذه العلاقة للطرف الأيسر و الأيمن نحصل على

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^+} = ikT,$$

بينما

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right)_{x=0^-} = ik(I-R).$$

و أخيراً في الطرف الأيمن نحصل على

$$\frac{-2maV_0}{\hbar^2}\psi(0) = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}(I+R) = \frac{-2maV_0}{\hbar^2}T.$$

بالتعويض نحصل على

$$i(T+R-I) = -2\beta T,$$

حيث أن β معامل عديم الأبعاد (تحقق من ذلك؟!) يُعَرَّف كالتالي

$$\beta \equiv \frac{maV_0}{k\hbar^2}. \tag{5.75}$$

نحصل إذاً على $T+R-I = 2i\beta T$ و منه نجد

$$I-R = T(1-2i\beta). \tag{5.76}$$

بمعلومية I، لدينا معادلتين (5.74) و (5.76) لمجهولين R و T. بحل المعادلتين نحصل على سعات الإنعكاسية و النفاذية على التوالي

$$R = \frac{i\beta}{1-i\beta}I, \tag{5.77}$$

و

$$T = \frac{I}{1-i\beta}. \tag{5.78}$$

يمكن حساب إحتمال الإنعكاسية و النفاذية على التوالي

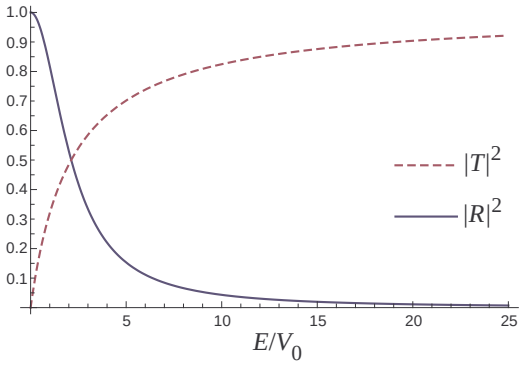
$$P_R = \frac{|R|^2}{|I|^2} = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+\frac{1}{\beta^2}} = \frac{1}{1+\frac{2\hbar^2E}{ma^2V_0^2}}, \tag{5.79}$$

و

$$P_T = \frac{|T|^2}{|I|^2} = \frac{1}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+\frac{ma^2V_0^2}{2\hbar^2E}}, \tag{5.80}$$

حيث عوضنا عن β^2 من علاقة (5.75) و k^2 من التعريف (5.71) لنحصل على

$$\beta^2 = \frac{ma^2V_0^2}{2\hbar^2E}.$$



شكل (5.21): النفاذية $|T|^2$ و الإنعكاسية $|R|^2$ بوحدة $|I|^2$ كدالة لنسبة الطاقة الكلية إلى الجهد لنيكلون يتشتت من على جهد دالة دلتا ($a = 2.1\,\text{fm}$ و $V_0 = 40\,\text{MeV}$). لاحظ سيطرة إحتمال الإنعكاسية على النفاذية عند الطاقات المنخفضة، عند الطاقات العالية تؤول الإنعكاسية إلى الصفر بينما تؤول النفاذية إلى الوحدة.

من السهل أن نتحقق من أن مقدار $|R|^2$ من علاقة (5.79) و مقدار $|T|^2$ من علاقة (5.80) تحققان العلاقة (5.73) كما يتطلب قانون حفظ التيار و الذي يؤدي إلى أن مجموع إحتماليات النفاذية و الإنعكاسية تساوي الوحدة. لاحظ كذلك، كلما زادت الطاقة E تزداد إحتمالية النفاذية بينما تقل إحتمالية الإنعكاسية، الأمر الذي يبدو منطقياً. هذا التصرف للنفاذية و الإنعكاسية للتشتت من على جهد دلتا موضح في الشكل (5.21). لاحظ أيضاً أن الجهد (5.60) تجاذبي attractive potential بسبب الإشارة السالبة. يمكننا الحصول على نتائج التشتت على الجهد التنافري فقط بتحويل a إلى $-a$. سنلحظ عندئذٍ أن نتائج الإنعكاسية (5.79) و النفاذية (5.80) لاتتغير بسبب إعتمادها على a^2. هذا بطبيعة الحال مخالف تماماً للتنبؤات الكلاسيكية التي تفرق بين التشتت على جهد تجاذبي أو تنافري.

5.6 ملخص Summary

درسنا في هذا الباب الجهود المنقطعة في بعد واحد. لهذا النوع من الجهود أهمية كبرى للانظمة الفيزيائية. الجدول (5.4) يُلخِّص الجهود المنقطعة في بعد واحد و يظهر شكل الجهد و كثافة الإحتمالية و أهم المزايا الفيزيائية للنظام.

5.7 أسئلة و تمارين

سؤال (5.5): أثبت أن كثافة التيار المخترق J_T بإستخدام الدالة الموجية (5.21) في صيغة كثافة التيار (2.41)، يساوي صفر $J_T = 0$. ماذا يعني هذا؟ ♢

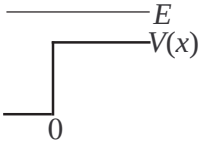
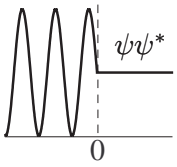
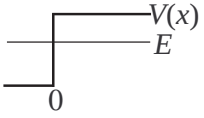
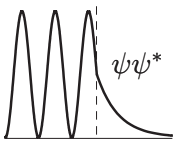
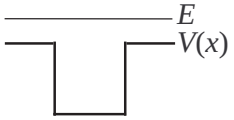
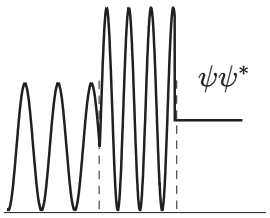
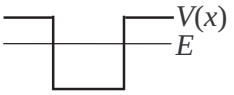
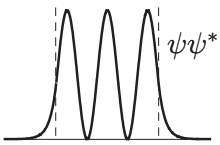
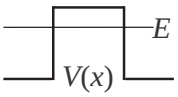
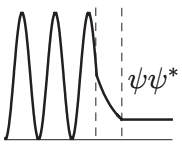
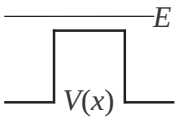
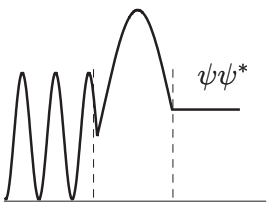
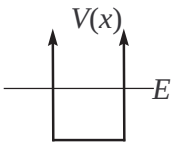
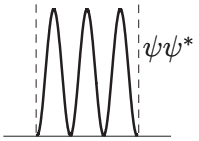
سؤال (5.6): في عتبة الجهد عند الحالة الخاصة للطاقة أصغر من إرتفاع عتبة الجهد $E < V_0$ فإن الجزء الحقيقي و الجزء التخيلي من الدالة الموجية، بإعتبار سعة السقوط $I = 1$، يُعْطيان من الصيغ

$$\Re\psi(x) = \begin{cases} \frac{2k}{k^2+|q|^2}\left(k\cos kx + |q|\sin kx\right) & x < 0, \\ \frac{2k^2}{k^2+|q|^2}e^{-|q|x} & x > 0, \end{cases}$$

و

$$\Im\psi(x) = \begin{cases} \frac{2|q|^2}{k^2+|q|^2}\left(|q|\sin kx - k\cos kx\right) & x < 0, \\ \frac{-2k|q|}{k^2+|q|^2}e^{-|q|x} & x > 0, \end{cases}$$

جدول (5.4): ملخص لأهم أنظمة الجهود المنقطعة في بعد واحد و بيان حلولها و مزاياها.

إسم النظام	مثال فيزيائي	قيم E إلى $V(x)$	كثافة الإحتمالية $\psi^*\psi$	أهم المميزات
العتبة: الطاقة الكلية أعلى من إرتفاع الجهد	نيوترون يحاول الهروب من النواة			إنعكاس جزئي من على نقطة إنقطاع الجهد
العتبة: الطاقة الكلية أقل من إرتفاع الجهد	إلكترونات التوصيل على سطح معدن مؤكسد			إختراق منطقة محظورة كلاسيكياً
البئر المتناهي: التشتت، الطاقة الكلية أكبر من الصفر	تشتت النيوترونات على الأنوية			الإختراقات الرنينية و إنعدام الإنعكاسية عند طاقات معينة
البئر المتناهي: إرتباط، الطاقة الكلية أقل من الصفر	إرتباط النيوترون في النواة			تكمية الطاقة: الطاقة لها مستويات متقطعة
الحاجز: الطاقة الكلية أقل من إرتفاع الجهد	جسيمات α تحاول إختراق الجهد الكولومي			ظاهرة التنفق
الحاجز: الطاقة الكلية أعلى من إرتفاع الجهد	تشتت الإلكترونات على أيونات الهالوجينات السالبة			إنعدام الإنعكاسية عند طاقات معينة (أثر رامسوير-تونسند)
البئر اللانهائي	إنحصار الكوارك في الهادرونات			يمكن الحصول عليه تقريباً من الجهد المتناهي

على الترتيب. ماهو فرق الطور بين $\Re\psi(x)$ و $\Im\psi(x)$. $\diamondsuit$

سؤال (5.7): لنعتبر جهد العتبة التجاذبي، يعطى كالتالي

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ -V_0 & x > 0. \end{cases}$$

إفترض جسيم كتلته m و طاقته $E > 0$ يسقط على الجهد أعلاه من $-\infty$ إلى $+\infty$ (بإتجاه $+x$). أوجد التالي:

1. الدالة الموجية التي تصف الجسيم في كل الفضاء.
2. كثافة التيار الساقط، المنعكس، و المخترق. و ما هو شرط إنحفاظ التيار.
3. أوجد إحتمالية الإنعكاسية و النفاذية. و تحقق من موافقتهم لشرط إنحفاظ التيار. قارن نتائجك مع نتائج جهد العتبة.
4. ماهي إحتمال الإنعكاسية إذا كانت $E = V_0/3$؟
5. إفترض نيوترون حر ناتج عن إنشطار نووي لنواة ثقيلة و طاقته الحركية 4 MeV. إذا دخل هذا النيوترون نواة أخرى، سيشعر بإنخفاض فجائي في الجهد من $V = 0$ خارج النواة إلى -12 MeV داخل النواة. ماهي إحتمالية أن يمتص هذا النيوترون ليسبب إنشطاراً نوويا آخر؟ مساعدة: يلزم حساب إحتمال النفاذية.

حاول أن تختبر صحة نتائجك بالتأكد من أن قيم الإنعكاسية و النفاذية تحقق قوانين حفظ كثافة التيار. $\diamondsuit$

سؤال (5.8): جسيم كتلته m متواجد في جهد يعطى كالتالي

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ -32\hbar^2/ma^2 & 0 \le x \le a, \\ 0 & x > a, \end{cases}$$

بحيث ان $0 > E > -V_0$. أوجد مايلي:

1. كم عدد حالات الإرتباط في النظام؟
2. عند حالة الإرتباط الأعلى طاقة للجهد المعرف في الأعلى تأكد من أن المنحنى $\sqrt{z - y^2}/y$ يتقاطع مع المنحنى $-\cot y$ عند النقطة $y = 7.95732$. إحسب مقدار الطاقة المميزة $|E|$ عند أعلى حالة إرتباط.
3. عند حالة الإرتباط الأعلى طاقة، إحسب كثافات الإحتمالية عند المواقع $x = 0$، $x = a/2$، $x = 2a$.
4. عند حالة الإرتباط الأعلى طاقة، ماهي إحتمالية أن يتواجد الجسيم خارج الجهد (أي عند $x > a$)؟ (الإجابة: 0.542!! على الرغم من أن حالة الإرتباط داخل الجهد لكن الجسيم يفضل أن يتواجد خارج الجهد)

لاحظ أن الجهد أعلاه سيفرض نوع معين من تماثل الحل. هذا يناظر حالة الجهد المتناظر كروياً في ثلاث أبعاد. $\diamondsuit$

سؤال (5.9): لو وجد حلين منفصلين distinct solutions أو أكثر لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (5.2) عند نفس الطاقة E، هذه الحالة تسمى الإنحلال degeneracy و نقول أن الحالات منحلة degenerate states كما في الباب الرابع. أثبت النظرية التالية: في بعد واحد لا توجد حالة إرتباط واحدة منحلة (مساعدة: إفترض حلين منحلين ψ_1 و ψ_2 عند نفس الطاقة E. إضرب معادلة شرودنجر لـ ψ_1 في ψ_2 و إضرب معادلة شرودنجر لـ ψ_2 في ψ_1 و إطرح المعادلتين و بسط حتى تحصل على المعادلة $\psi_2 d\psi_1/dx - \psi_1 d\psi_2/dx$ تساوي ثابت. من شرط تناهي الدالة الموجية في $\pm\infty$ أثبت أن هذا الثابت يساوي صفر و بالتالي ψ_1 و ψ_2 غير مختلفات not distinct.) $\diamondsuit$

سؤال (5.10): لديك الجهد الحاجز التالي

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & a > x > 0, \\ 0 & x > a, \end{cases}$$

و بإعتبار جسيم يسقط من اليسار إلى اليمين بحيث أن $E > V_0$. أوجد الدالة الموجية للنظام في الفضاء، و كثافات التيار، و سعات الإنعكاسية و الإختراقية. أوجد كذلك إحتمال الإنعكاس و الإختراق. هل حدد قيم الطاقة و التي لا يحدث عندها إنعكاس، أو إختراق رنيني، كما هو الحال في أثر رامسوير و تونسند. ♢

سؤال (5.11): أثبت معادلة (5.30) من (5.29). كذلك إحسب إحتمالية الإنعكاسية $|R|^2$ من R في المعادلة (5.28). ♢

سؤال (5.12): لو إختبرنا جهد البئر المتناهي (5.24) سنجد أنه يؤول إلى جهد دالة دلتا (5.60) في حالة عمق البئر V_0 يؤول إلى ملانهاية وعرضه a يؤول إلى الصفر. بالرغم من لانهائية العمق، فإن جهد دالة دلتا جهد ضعيف لأن قيمة z له و المعطاة في العلاقة (5.40) تؤول إلى الصفر. أوجد طاقة الترابط لجهد دلتا كحالة أمتدادية لجهد البئر المتناهي و أثبت أن الإجابة تتفق مع معادلة (5.68). كذلك عند الإمتداد أعلاه أثبت أن معادلة (5.30) تؤول إلى معادلة (5.80). ♢

سؤال (5.13): لنعتبر الحل الفردي لجهد البئر المتناهي (5.24) و المعطى في العلاقة (5.45) و الذي يمكن إعتباره كنموذج لجهد البئر في ثلاث أبعاد عند عزوم زاوية مدارية تساوي الصفر. إذا كان مدى الجهد 1.4×10^{-13} cm، و طاقة الترابط للنظام 2.2 MeV و إذا أخذنا الكتلة تساوي 0.8×10^{-24} gm، أوجد عمق الجهد بوحدة MeV. (إستخدم Mathematica لإجراء الحل.) ♢

سؤال (5.14): أثبت أن إحتمالية الإنعكاسية و النفاذية في المعادلات (5.79) و (5.80)، على الترتيب، تحققان العلاقة (5.73)، و الناتجة عن إنحفاظ التيار. ♢

سؤال (5.15): أوجد طاقة الجسيم و التي تتساوى عندها إحتمالية الإنعكاسية و النفاذية عندما يتشتت جسيم من على جهد دالة دلتا. ♢

سؤال (5.16): مصفوفة التشتت The scattering matrix: لو إعتبرنا جهد متناهي و محلي و عشوائي كما في الشكل (5.22)، على يسار الجهد (region 1) قيمة الجهد $V = 0$، و الحل يصبح

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

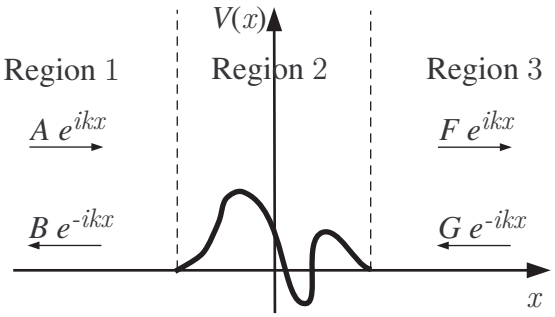
على يمين الجهد (region 3) أيضاً قيمة الجهد $V = 0$، و الحل يصبح

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}.$$

في كلتا الحالتين فإن

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

بين المنطقتين (region 2) لانعرف ما هو الحل لأن هذا يتطلب معرفة الجهد. لكن بما أن معادلة شرودنجر معادلة



شكل (5.22): التشتت على جهد عشوائي، لدينا ثلاث مناطق regions، منطقة السقوط و الإنعكاس region 1، منطقة التشتت إلى الأمام أو السقوط العكسي region 3، و منطقة الجهد العشوائي region 3.

تفاضلية خطية من الرتبة الثانية، فإن حله العام سيكون الجمع الخطي للحلين الخاصيين المستقلين $f(x)$ و $g(x)$ أي

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x),$$

بالطبع توجد أربع شروط حدية لإتصال الدوال الموجية و مشتقاتها، إثنتان من هذه الشروط تربط region 1 مع region 2 و إثنتان تربط region 2 مع region 3. يمكننا من هذه الشروط حذف C و D و الحل لـ A، B، F، و G، لنحصل على

$$B = S_{11}A + S_{12}G \qquad F = S_{21}A + S_{22}G.$$

المعاملات الأربعة S_{ij} تعتمد جميعها على k و بالتالي على الطاقة. هذه المعاملات عناصر في مصفوفة بعدها 2×2 تسمى مصفوفة التشتت scattering matrix أو S-matrix أو $\mathbf{S}$. هذه المصفوفة تعطي السعات المتباعدة عن الجهد outgoing amplitudes B و F بمعلومية السعات الوافدة إلى الجهد incoming amplitudes A و G. يمكننا أن نكتب إذاً

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}.$$

في الحالات النموذجية لجسيم يسقط على الجهد من اليسار إلى اليمين فإن $G = 0$، و تصبح سعات الإنعكاسية R و النفاذية T كالتالي

$$R = \frac{B}{A}; \qquad T = \frac{F}{A}.$$

على ضوء المعلومات أعلاه أجب على مايلي:

1. اثبت مايلي

$$|S_{11}^2|^2 + |S_{12}^2|^2 = 1,$$

$$|S_{21}^2|^2 + |S_{22}^2|^2 = 1,$$

$$S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0.$$

لاحظ أن أعلاه يعني أن $\mathbf{SS}^\dagger = \mathbf{I}$، أي أن المصفوفة $\mathbf{S}$ واحدية unitary.

2. أوجد مصفوفة التشتت S-matrix للتشتت من جهد دالة دلتا (5.60).
3. أوجد مصفوفة التشتت S-matrix للتشتت من جهد البئر المتناهي (5.24). للسهولة لاحظ التناظر بين الحلين و أستخدمه للآخر.

إيجاد مصفوفة التشتت هام جداً لحساب المقطع العرضي للتشتت لدراسة الأنظمة الذرية و النووية. ♢

6

الحركة التوافقية البسيطة
The Simple harmonic oscillator

هذا الباب مثال لأنظمة من جسيم واحد تحت تأثير جهود مستمرة في بعد واحد. من الواضح أن هذه الجهود المستمرة قد تبدو أكثر تعقيداً، من ناحية التركيب الرياضي، مقارنة مع الجهود المذكورة في الباب الخامس. على الرغم من التعقيد التركيبي لهذه الجهود إلا أن الطرق الرياضية لحل هذه الأنظمة لاتختلف من حيث المعالجة عن تلك التي للجهود غير المتصلة في بعد واحد. سنجد أنه بالإمكان تخطي عقبة الصعوبة الرياضية بإستحداث طرق معالجة رياضية تعتمد على مبدأ التناظر تسهل عملية الحل لهذه الإنظمة و تمكننا من إيجاد الدوال و القيم المميزة لهذه الأنظمة الفيزيائية. في النهاية سنجد أن الطبيعة الكمية تُنتج حلولاً تُعطي نتائج لها مغزى فيزيائي ما كانت النتائج الكلاسيكية أن توصلنا إليها.

سنُعْنى هنا بشكل خاص بدراسة جسيم تحت تأثير جهد متذبذب بسيط و خطي في بعد واحد. إن التعميم إلى ثلاث أبعاد (أو حتى إلى N بعد) سهل و مباشر أيضاً. لكن سنكتفي بدراسة النظام في بعد وحد لأخذ المدلولات الفيزيائية الخاصة بميكانيكا الكم و التي ستكون هي نفسها عند أي بعد. قبل الخوض في نظام الحركة التوافقية البسيطة، من الهام الإلمام ببعض الأساسيات الرياضية و التي سوف تُستخدم للحل الرياضي للمعادلة المميزة للحركة التوافقية البسيطة. و نعني هنا بالذات دوال هيرميت Hermite polynomial و التي تُعْطى في القسم (A.8).

6.1 المعادلة المميزة للحركة التوافقية البسيطة
Eigenvalue equation for the SHO

لنفترض وجود جسيم كتلته m تحت تأثير جهد متذبذب بسيط و خطي في بعد واحد simple one-dimension oscillator harmonic تردده ω. من المعروف كلاسيكياً أن جهد المتذبذب التوافقي يعطى كالتالي

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{6.1}$$

نعلم أن معادلة هاميلتون الكلاسيكية في بعد واحد تُعطى من المعادلة (3.10). إن تمثيل المعادلة (3.10) على شكل مؤثرات يُعْطى في المعادلة (3.11). بتعويض الجهد (6.1) في المعادلة (3.11) نحصل على المؤثر الهاميلتوني للمتذبذب التوافقي البسيط، والذي يُصبْح

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{6.2}$$

لاحظ أن مدى دالة الجهد (6.1) هو كل الفضاء أحادي البعد، لذلك فإن فضاء المؤثر الهاميلتوني أعلاه لانهائي، أي سينتج عنه مجموعة غير منتهية من الدوال المميزة و القيم المميزة. كذلك المؤثر الهاميلتوني متناظر في الفضاء بسبب تناظر دالة الجهد (6.1)، مما يعني الحصول على دوال مميزة متناظرة symmetric (زوجية) و عكس متناظرة antisymmetric (فردية). المعادلة المميزة (معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن) للمتذبذب التوافقي البسيط تصبح كالتالي

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x), \tag{6.3}$$

حيث $\psi_n(x)$ و E_n هما الدالة و القيمة المميزتين eigenfunction and eigenvalue للمؤثر الهاميلتوني للمتذبذب التوافقي البسيط عند الرتبة n. معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن للمتذبذب التوافقي البسيط بشكلها الصريح تصبح

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_n(x) = E_n\psi_n(x),$$

لاحظ أن التفاضل الجزئي أصبح تفاضلاً كلياً لأن $\psi_n(x)$ في بعد واحد و لاتعتمد على الزمن. نكتب المعادلة بشكلها المتجانس

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \left[\frac{2mE_n}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right]\psi_n(x) = 0. \tag{6.4}$$

لنعرف ثابت النظام β system constant كالتالي

$$\beta \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \tag{6.5}$$

حيث أن الثابت β لها بعد يساوي مقلوب الطول.

سؤال (6.1): أثبت أن $[\beta] = L^{-1}$؟ ♢

لو عرفنا متغير الإحداثيات عديم البعد z كالتالي

$$z \equiv \beta x. \tag{6.6}$$

بإستخدام قاعدة السلسلة chain rule لحساب التفاضل على z بمعلومية التفاضل على x نحصل على

$$\frac{d}{dx} = \frac{dz}{dx}\frac{d}{dz} = \beta\frac{d}{dz}; \qquad \frac{d^2}{dx^2} = \beta^2\frac{d^2}{dz^2},$$

بالتعويض في المعادلة (6.4) نحصل على معادلة على متغير الإحداثيات z، أي أن

$$\beta^2\frac{d^2\psi_n(z/\beta)}{dz^2} + \left[\frac{2mE_n}{\hbar^2} - \beta^4\frac{z^2}{\beta^2}\right]\psi_n(z/\beta) = 0.$$

بأخذ β^2 كعامل مشترك نحصل على

$$\frac{d^2\psi_n(z/\beta)}{dz^2} + \left[\frac{2mE_n}{\beta^2\hbar^2} - z^2\right]\psi_n(z/\beta) = 0. \tag{6.7}$$

لدى مقارنة المعادلة التفاضلية (6.7) للمتذبذب التوافقي البسيط مع المعادلة التفاضلية (A.150)، نكون قد وصلنا إلى حل المعادلة المميزة (6.3) للمتذبذب التوافقي البسيط. حيث أن القيم المميزة تُعْطى من الحد الثاني للمعادلة التفاضلية، أي أن

$$\frac{2mE_n}{\beta^2\hbar^2} = 2n+1 \quad \Rightarrow \quad E_n = (2n+1)\frac{\beta^2\hbar^2}{2m},$$

بالتعويض عن β^2 من التعريف (6.5) نحصل على القيم المميزة للطاقة عند رتبة التذبذب n

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega; \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{6.8}$$

بالمقابل الدوال المميزة تُعْطى من العلاقة (A.152)، لنحصل على الحل كدالة للإحداثيات x بدلاً عن z كالتالي

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\beta}{2^n \pi^{\frac{1}{2}} n!}\right)^{1/2} e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x). \tag{6.9}$$

بالتعويض عن قيمة β من (6.5) تصبح (6.9) كالتالي

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \tag{6.10}$$

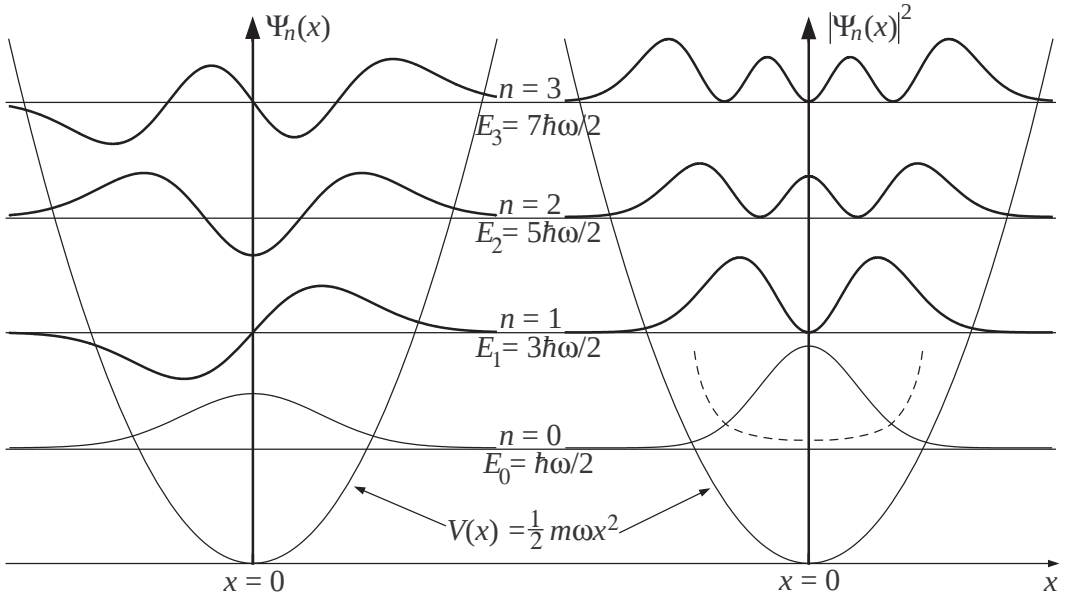
هذا يعني أن الجسيم المتذبذب يمتلك طاقات إهتزازية مكماة لها قيم تساوي أنصاف أعداد فردية من $\hbar\omega$، على عكس المتذبذب الكلاسيكي الذي له قيم طاقات مستمرة و لايربط طاقة التذبذب بالتردد. إن أقل طاقة للجسيم المتذبذب تسمى طاقة الحالة الأرضية ground state energy أو الطاقة الصفرية zero point energy و التي لها الرتبة $n = 0$ و مقدار الطاقة $\hbar\omega/2$ و لها أقل سعة ممكنة من الإهتزاز.

إن شكل الحلول المميزة غير المعتمدة على الزمن (الحالات الموقوفة stationary states) كدالة للإحداثيات و مستوي الطاقات النسبي لها موضح في الشكل (6.1) (الجهة اليسرى من الشكل). بينما الجهة اليمنى من الشكل توضح كثافة إحتمالية تواجد الجسيم المتذبذب حول نقطة الإتزان (حسب الجهد (6.1) فإن نقطة الإتزان هي $x = 0$). لاحظ أن الفرق بين مستويات الطاقة ثابت و يساوي $\hbar\omega$. يمكن أثبات ذلك بسهولة بحساب المقدار $E_{n+1} - E_n$ بإستخدام المعادلة (6.8). كذلك نلاحظ أن الحالة الأرضية لها أبسط دالة موجية متناظرة، أي أن تغير الدالة الموجية مع x أقل ما يمكن و الذي يعني أن لها أقل طاقة حركة. إن الإنتقال من حالة طاقة إلى حالة طاقة أخرى تحتاج أن يأخذ (أو يفقد) النظام المهتز طاقة مقدارها $\hbar\omega$. إن تكمية الطاقة أدت أيضاً إلى تكمية سعة التذبذب كما هو موضح في الشكل، على عكس النتائج الكلاسيكية.

إن الإختلاف بين التنبؤات الكمية و الكلاسيكية ليس فقط فيما يتعلق بتكمية طاقة و سعة النظام المهتز، بل أيضاً فيما يتعلق بدالة توزيع موقع الجسيم المهتز حول نقطة الإتزان. إن تفاصيل حساب دالة التوزيع الكلاسيكية لموقع الجسيم المهتز حول نقطة الإتزان أو بتسمية أخرى كثافة الإحتمالية الكلاسيكية للجسيم المهتز موضحة لاحقاً في القسم (6.2). لكن بشكل عام التنبآت الكلاسيكية وضحت أن موقع الجسيم حول نقطة الإتزان تأخذ قيم مستمرة و لها إحتمالية عالية عند نقاط الإهتزاز القصوى أو ما يسمى نقاط السعات الكلاسيكية (حيث يكون الجسيم في حالة سكون لحظية) و إحتمالية صغرى عند نقطة الإتزان (حيث الجسيم يكون أسرع مايمكن). إن دالة توزيع الموقع الكلاسيكية تتناسب مع مقلوب متوسط سرعة الجسيم و هي موضحة بالخط المتقطع في يمين الشكل (6.1).

إن كثافة الإحتمالية الكلاسيكية للجسيم المهتز لاتتفق مع التنبآت الكمية، كما هو موضح في الجهة اليمنى من الشكل (6.1)، و التي تبين أنه يوجد مناطق لها أفضلية لتواجد الجسيم فيها، بما فيها عند نقطة الإتزان كما هو في الحالات الزوجية. للحالات الفردية فإن الجسيم المهتز لايتواجد عند نقطة الإتزان (كثافة الإحتمالية تساوي صفر) لكنه أيضاً لايفضل التواجد عند نقاط السعات الكلاسيكية. كذلك نلاحظ للحالات الزوجية و الفردية أن هناك إحتمالية بأن نجد الجسيم خارج المنطقة المسموحة كلاسيكياً، اي خارج نطاق نقاط السعات الكلاسيكية. هذه الإحتمالية تقل كما زادت رتبة الحالة.

نحن نعلم من مبدأ التقابل أن النتائج الكلاسيكية يجب أن تكون متضمنة كحالة خاصة من النتائج الكمية و ذلك للأعداد الكمية الكبيرة. في الشكل (6.2) قمنا بإيجاد الحالة الموقوفة (الجهة اليسرى) و توزيع موقع الجسيم (الجهة اليمنى) عند الحالة الكمية $n = 100$. على نفس شكل توزيع موقع الجسيم في الجهة اليمنى رسمنا دالة توزيع موقع الجسيم الكلاسيكية (الخط المتقطع). من الشكل يتضح أن التوزيع الكلاسيكي يقارب منحنى التناسب المتوسط average fitting curve لتوزيع موقع الجسيم الكمي. كذلك نلاحظ أن توزيع موقع الجسيم الكمي له قيم عظمى عند نقاط السعات الكلاسيكية كما هو الحال في النتائج الكلاسيكية، مما يحقق مبدأ التقابل. لاحظ أن توزيع الموقع



شكل (6.1): الجهة اليسرى توضح الحلول المميزة غير المعتمدة على الزمن كدالة للإحداثيات و مستوي الطاقات النسبي لها. بينما الجهة اليمنى من الشكل توضح توزيع موقع الجسيم المتذبذب حول نقطة الإتزان. الخط المتقطع (يمين) يمثل دالة التوزيع الكلاسيكية.

الكلاسيكي يحسب كمتوسط المواقع لمتذبذب واحد عند أزمنة مختلفة. لكن التوزيع الإحتمالي للموقع الكمي يحسب كمتوسط مواقع لتجمعات ensemble من المتذبذبات المتماثلة عند نفس الزمن و عند نفس الظروف، كما وضحنا سابقاً لدى دراستنا للقيم المتوقعة في الباب الثالث. سيكون من الممكن الآن دراسة القيم المتوقعة لبعض المتغيرات الأساسية و التعليق على نتائجها. لكن سنقوم هنا بحساب فقط القيم المتوقعة للموقع و كمية الحركة بدون أي حسابات رياضية، فقط بإستخدام فكرة تناظر الدالة المميزة في الفضاء. لاحقاً سنقوم بحساب القيم المتوقعة الأخرى بإستخدام طريقة المؤثرات الدرجية ladder operators في القسم الآتي.

بإستخدام العلاقة (3.1) يمكننا حساب القيمة المتوقعة للموقع. لاحظ أن كثافة الإحتمالية $|\psi_n(x)|^2$ دائماً زوجية لأي رتبة n، كما هو موضح في يمين الشكل (6.1). و بالتالي فإن الدالة $x|\psi_n(x)|^2$ فردية لأي رتبة n. و عليه فإن القيمة المتوقعة للموقع في العلاقة (3.1) تصبح صفر. أي أن

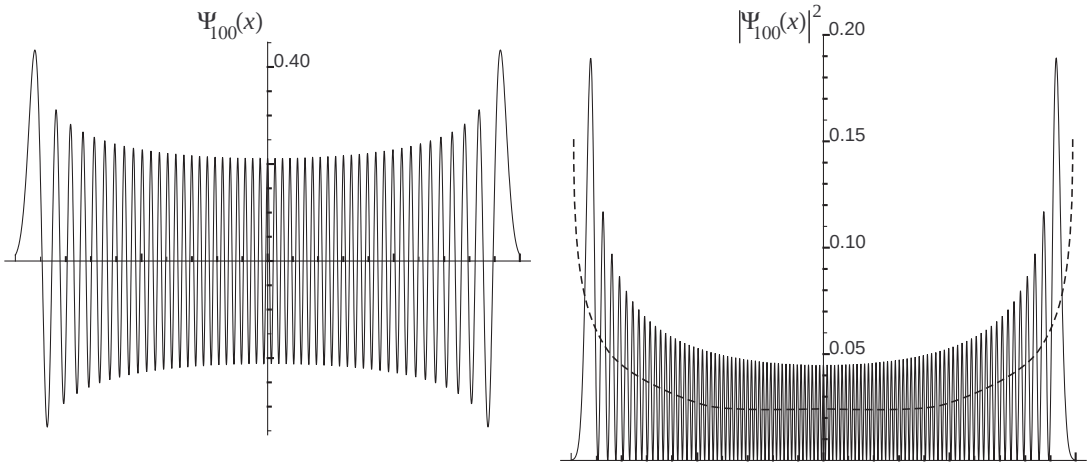
$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi_n(x)|^2 dx = 0. \tag{6.11}$$

كما ناقشنا في حالة جهد البئر اللانهائي، هنا $\langle x\rangle = 0$ لاتعني أن الجسيم يمضي معظم و قته عند نقطة الأتزان.

سؤال (6.2): وضح المعنى الحقيقي للنتيجة $\langle x\rangle = 0$ على ضوء معرفة دالة توزيع كثافة الإحتمالية، و ما هو المقدار الذي يعطينا فكرة عن الموقع المفضل للجسيم المتذبذب حول نقطة الإتزان. (مساعدة: إرجع إلى مسألة البئر اللانهائي). ♢

بإستخدام العلاقة (3.3) يمكن حساب القيمة المتوقعة لكمية الحركة للجسيم المتذبذب. هذا يتضمن إيجاد إشتقاق الدالة الموجية (6.9) بالنسبة لـ x. أي أن

$$\frac{d\psi_n(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2^n \pi^{\frac{1}{2}} n!}} \left[(-2\beta^2 x) e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x) + \beta e^{-\beta^2 x^2/2} \frac{dH_n(\beta x)}{d(\beta x)} \right],$$



شكل (6.2): الحالة الموقوفة (الجهة اليسرى) و توزيع موقع الجسيم (الجهة اليمنى) عند الحالة الكمية $n = 100$. الخط المتقطع على نفس شكل توزيع موقع الجسيم في الجهة اليمنى يمثل دالة توزيع موقع الجسيم الكلاسيكية.

من متتالية إبل (A.145) يمكن التعويض عن إشتقاق دالة هيرميت، لنحصل على

$$\frac{d\psi_n(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2^n \pi^{\frac{1}{2}} n!}} \left[(-2\beta^2 x) e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x) + 2n\beta e^{-\beta^2 x^2/2} H_{n-1}(\beta x) \right].$$

يمكننا بسهولة إدراك أنه إذا كانت n زوجية، فإن ψ_n زوجية، لكن $d\psi_n/dx$ فردية. و العكس صحيح. بالتالي فإن حاصل الضرب $\psi_n d\psi_n/dx$ دائماً فردية، لجميع قيم الرتبة n. لذلك فإن القيمة المتوقعة لكمية الحركة صفر، أي أن

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \frac{d\psi_n(x)}{dx} dx = 0. \tag{6.12}$$

مرة أخرى و كما ناقشنا في حالة جهد البئر اللانهائي، هنا $\langle p \rangle = 0$ لاتعني أن الجسيم في حالة سكون.

سؤال (6.3): وضح المعنى الحقيقي للنتيجة $\langle p \rangle = 0$ على ضوء معرفة دالة توزيع إتجاه الحركة للجسيم المتذبذب، و ما هو المقدار الذي يعطينا فكرة عن كمية الحركة المفضلة للجسيم المتذبذب حول نقطة الإتزان. (مساعدة: إرجع إلى مسئلة البئر اللانهائي). ♢

القيمة المتوقعة للطاقة لمتذبذب كمي عند الرتبة n يعطى بتأثير المؤثر الهاميلتوني على الدالة الموجية $\psi_n(x)$ و يُحسب كالتالي

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \hat{H} \psi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) E_n \psi_n(x) dx,$$

بإستخدام العلاقة (6.8) نحصل على

$$\langle H \rangle = E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \tag{6.13}$$

القيمة المتوقعة للطاقة لمتذبذب كمي عند الرتبة n تساوي القيمة المميزة للطاقة للحالة n. لماذا؟ (إرجع إلى السؤال (1) صفحة 58).

يمكننا معرفة القيم المتوقعة ككميات فيزيائية معتمدة على الزمن لو حسبناها بإستخدام الدالة المميزة المعتمدة على الزمن، و الذي تحسب من حقيقة أن

$$\psi_n(x,t) = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x) = e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}\psi_n(x),$$

و بإستخدام الدالة المميزة في (6.10) نحصل على

$$\psi_n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\left[\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + i(n+\frac{1}{2})\omega t\right]} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \tag{6.14}$$

إن حساب القيمة المتوقعة للطاقة بالدالة المميزة المعتمدة على الزمن (6.14) يتم بإعتبار المؤثر الهاميلتوني $\hat{H} \to i\hbar\partial/\partial t$، و بالتالي تصبح القيمة المتوقعة للطاقة

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x,t)\hat{H}\psi_n(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x,t)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi_n(x,t)dx,\\
&= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x,t)\frac{\partial\psi_n(x,t)}{\partial t}dx = i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x,t)\left[-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\right]\psi_n(x,t)dx,\\
&= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x,t)\psi_n(x,t)dx = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,
\end{aligned}$$

و التي تطابق تماماً النتيجة التي حصلنا عليها في (6.13).

إن حساب القيم المتوقعة $\langle x^2\rangle$، $\langle p^2\rangle$، $\langle K\rangle$، و $\langle V(x)\rangle$ لأي حالة ذبذبة من الرتبة n يمكن حسابها مباشرة بإستخدام الحل (6.9). سوف يترك هذا كتمرين للقاريء. بالمقابل سنحسب هذه القيم المتوقعة بطريقة جبرية أخرى تعتمد على خصائص تناظرية للنظام المهتز، لنرى كيف تتطابق الإجابات.

6.2 حساب دالة التوزيع الكلاسيكية للجسيم المهتز
Classical distribution function

يمكن أن نحسب دالة توزيع موقع الجسيم المهتز حول نقطة الإتزان أو بتسمية أخرى كثافة الإحتمالية الكلاسيكية $P_{\rm cl}$ لكتلة تتحرك حركة توافقية بسيطة إذا أعتبرنا أن التنبآت الكلاسيكية وضحت أن موقع الجسيم حول نقطة الإتزان تأخذ قيم مستمرة و لها إحتمالية عالية عند نقاط الإهتزاز القصوى أو ما يسمى نقاط السعات الكلاسيكية (حيث يكون الجسيم في حالة سكون لحظية) و إحتمالية صغرى عند نقطة الإتزان (حيث الجسيم يكون أسرع مايمكن). إذاً نستنتج أن دالة توزيع الموقع الكلاسيكية أو كثافة الإحتمالية الكلاسيكية $P_{\rm cl}$ تتناسب عكسياً مع سرعة الكتلة المتذبذبة v، اي أن

$$P_{\rm cl} \propto \frac{1}{v}.$$

من الواضح أن $P_{\rm cl}$ دالة ذات توزيع مستمر لأن قيم السرعة مستمرة كلاسيكياً. إذاً يمكننا أن نكتب الإحتمالية الكلاسيكية على الشكل

$$P_{\rm cl} = \frac{N}{v}, \tag{6.15}$$

حيث N ثابت يحدد من شرط معايرة الإحتمالية، و التي ينص على أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_{\rm cl}\,dx = 1. \tag{6.16}$$

لكن كلاسيكياً، إحداثي الجسيم في الحركة التوافقية البسيطة محصور بين القيمة $x_{\max} < x < -x_{\max}$ حيث أن $x_{\max}$ تمثل سعة الحركة و التي يمكن تحديدها من علاقة الطاقة الكلية

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{6.17}$$

عندما يصل الجسيم عند قيم السعات $\pm x_{\max}$ فإن طاقته الحركية (أو سرعته) تساوي صفر. و عليه من (6.17) نحصل على

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_{\max}^2 \quad \Rightarrow \quad x_{\max} = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

كذلك يمكننا التعويض عن قيمة السرعة v من العلاقة (6.17) لنحصل على

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}.$$

بالتعويض في العلاقة (6.15) و من ثم نحسب التكامل (6.16) نصل إلى

$$N\int_{-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}}\, dx = 1,$$

أو

$$\frac{N}{\omega}\int_{-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2}}\, dx = 1.$$

بأخذ $a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ حيث من الواضح أن $a > 0$، نحصل على

$$\frac{N}{\omega}\int_{-a}^{a} \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}}\, dx = 1.$$

بإستخدام التحويل $x = a\cos\theta$ يتحول التكامل إلى الشكل التالي

$$\frac{N}{\omega}\int_0^{\pi} d\theta = \frac{N}{\omega}\pi = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{\omega}{\pi}.$$

لتصبح دالة التوزيع الإحصائي بشكلها النهائي كالتالي

$$P_{\rm cl}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2}}. \tag{6.18}$$

يمكن إستخدام تعريف (6.5) و علاقة تكمية الطاقة في الصيغة (6.8) لتحويل دالة التوزيع (6.18) للحصول على صيغة شبه كلاسيكية semi-classical formula. إذا علمنا أن

$$\frac{2E}{m\omega^2} = 2\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{m\omega^2} = (2n+1)\frac{\hbar}{m\omega} = \frac{1}{\beta^2}(2n+1),$$

لتتحول عندها دالة التوزيع (6.18) إلى دالة التوزيع شبه الكلاسيكية كالتالي

$$P_{\rm cl}(x) = \frac{\beta}{\pi\sqrt{2n+1-\beta^2x^2}}. \tag{6.19}$$

أي نظام مهتز يمكن أن يُعَرَّفْ بكميتين فيزيائيتين: تردد النظام ω، و ثابت النظام β. من هاتين الكميتين يمكننا إذاً حساب دالة الجهد (يمكن أن تكتب $V(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\beta^2x^2$)، الدوال المميزة $\psi_n(x)$ eigenfunctions، كثافة الإحتمالية الكمية $|\psi_n(x)|^2$، و أخيراً دالة التوزيع شبه الكلاسيكية. بهذه الطريقة يمكننا الحصول على الأشكال التوضيحية في الشكل (6.1) و الشكل (6.2).

6.3 المؤثرات الدرجية و تمثيل المتغيرات الديناميكية
Ladder operators and dynamical variables

قبل الولوج في هذا الموضوع لنأخذ هذه القاعدة فيما يخص تحليل جمع مربع مؤثرين. إذا كان لدينا مؤثرين مجموع مربعاتهم مُعطاه بـ $\hat{A}^2 + \hat{B}^2$ فإن هذا الجمع يمكن أن يحلل بطريقيتين متكافئتين إلى

$$\hat{A}^2 + \hat{B}^2 = (\hat{A} \pm i\hat{B})(\hat{A} \mp i\hat{B}) \pm [\hat{A}, i\hat{B}]. \tag{6.20}$$

لاحظ إن وجود التبادل commutator في الحد الثاني من الطرف الأيمن يعود إلى أن المؤثرات بشكل عام غير إبدالية. يمكن إثبات صحة العلاقة (6.20) إبتداء من أيجاد المفكوك للطرف الأيمن، أي أن

$$(\hat{A} \pm i\hat{B})(\hat{A} \mp i\hat{B}) \pm [\hat{A}, i\hat{B}] = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 \mp \hat{A}(i\hat{B}) \pm (i\hat{B})\hat{A} \pm [\hat{A}, i\hat{B}],$$

$$= \hat{A}^2 + \hat{B}^2 \mp \{\hat{A}(i\hat{B}) - (i\hat{B})\hat{A}\} \pm [\hat{A}, i\hat{B}],$$

$$= \hat{A}^2 + \hat{B}^2 \mp [\hat{A}, (i\hat{B})] \pm [\hat{A}, i\hat{B}] = \hat{A}^2 + \hat{B}^2.$$

و الذي يساوي الطرف الأيسر، مما يثبت صحة العلاقة.

بإستخدام التعريف (6.5) في المؤثر الهاميلتوني (6.2) نحصل على

$$\hat{H} = \left(\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}\right)\hbar\omega = \frac{1}{2}\left(\beta^2 x^2 + \frac{\hat{p}^2}{\beta^2\hbar^2}\right)\hbar\omega.$$

لو إعتمدنا المفكوك $(-+-)$ في الطرف الأيمن من العلاقة (6.20) و قمنا بتطبيقه على المؤثر الهاميلتوني أعلاه، نحصل على

$$\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right)\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right)\right] - [\frac{1}{\sqrt{2}}\beta x, \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}].$$

يمكن حساب قيمة علاقة التبديل في الحد الثاني من الطرف الأيمن بإستخدام خصائص علاقات التبديل (3.42) و علاقة التبديل (3.43)، لنحصل على

$$[\frac{1}{\sqrt{2}}\beta x, \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}] = \frac{i}{2\hbar}[x, \hat{p}] = -\frac{1}{2}.$$

بالتعويض في المؤثر الهاميلتوني المفكك أعلاه نحصل على

$$\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right)\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right)\right] + \frac{1}{2}. \tag{6.21}$$

لنُعَرِّف مؤثر الرفع الدرجي raising ladder operator $\hat{a}^+$ كالتالي

$$\hat{a}^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z - \frac{d}{dz}\right), \tag{6.22}$$

حيث إستخدمنا التعريف (6.6) لكتابة z عوضاً عن x. بنفس الطريقة نُعَرِّف مؤثر الخفض الدرجي lowering ladder operator $\hat{a}^-$ كالتالي

$$\hat{a}^- \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{d}{dz}\right). \tag{6.23}$$

بتعويض معادلة (6.22) و (6.23) في (6.21) نحصل على المؤثر الهاميلتوني مُعبَّراً عنه بالمؤثرات الدرجية

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \tag{6.24}$$

لدى مقارنة العلاقة الهاميلتونية (6.24) مع علاقة القيمة المتوقعة لها في (6.13)، نحصل على تعبير للقيمة المتوقعة التالية

$$\langle \hat{a}^+\hat{a}^- \rangle = n, \tag{6.25}$$

و الذي يعني أن المؤثر $\hat{a}^+\hat{a}^-$ هيرميشي لأن قيمته المتوقعة حقيقية. لاحظ إننا نجد من التعريفين (6.22) و (6.23) بأن المؤثرين الدرجين مرافقين لبعضهما البعض، أي أن[1]

$$\langle \hat{a}^- \rangle^* = \langle \hat{a}^+ \rangle, \tag{6.26}$$

بالتالي فإن $\langle \hat{a}^+\hat{a}^- \rangle^* = \langle \hat{a}^+\hat{a}^- \rangle$ مما يتفق مع هيرميشية المؤثر $\hat{a}^+\hat{a}^-$. بالمقابل، إذا طبقنا علاقة الفك الثانية $(+-+)$ في المعادلة (6.20) على المؤثر الهاميلتوني، و أستخدمنا التعاريف (6.22) و (6.23) نحصل على

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^-\hat{a}^+ - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \tag{6.27}$$

سؤال (6.4): أثبت العلاقة (6.27) بإعتماد المفكوك $(+-+)$ في العلاقة (6.20) و إستخدام التعاريف (6.22) و (6.23). ♢

لو قارنا بين العلاقة (6.27) و (6.24) نحصل على

$$\hat{a}^-\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a}^- + 1,$$

أي أن مؤثري الرفع و الخفض الدرجيان يتبعان علاقة التبديل التالية

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1. \tag{6.28}$$

يمكن التأكد من صحة علاقة التبديل (6.28) مباشرة من إستخدام تعاريف $\hat{a}^+$ و $\hat{a}^-$ في (6.22) و (6.23)، على الترتيب، لنجد أن

$$\begin{aligned}
[\hat{a}^-, \hat{a}^+] &= [\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}\right)], \\
&= \frac{1}{2}[\beta x + \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}, \beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}], \\
&= \frac{1}{2}\left([\beta x, \beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}] + [\frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}, \beta x - \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}]\right), \\
&= \frac{1}{2}\left([\beta x, \beta x] - [\beta x, \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}] + [\frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}, \beta x] - [\frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}, \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}]\right).
\end{aligned}$$

[1] كما سبق أن وضح في الحاشية (1) footenote في الصفحة 93، بالنسبة للمؤثرات: تطبيق المرافق المركب complex conjugate (الذي يرمز له بالزهرة النجمية asters $*$) لايستخدم للمؤثرات و يُستعاض عنه بالمجاور adjoint (الذي يرمزله بالرمز الخنجر dagger $\dagger$) لأنه يتضمن تطبيق عملية المرافق complex conjugate و المُبَادلة transpose على المؤثر. لذلك نقول أن $\hat{a}^+ = (\hat{a}^-)^\dagger$.

حيث طبقنا قوانين علاقات التبديل (3.42). لاحظ أن أي مؤثر دائماً إبدالي مع نفسه. لذلك فإن التبديل الأول و الأخير في الطرف الأيمن يساويان الصفر. نحصل إذاً على

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \frac{1}{2}\left(-[\beta x, \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}] + [\frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}, \beta x]\right) = \frac{1}{2}\left(-2[\beta x, \frac{i\hat{p}}{\beta\hbar}]\right) = \frac{-i}{\hbar}[x, \hat{p}] = 1,$$

حيث إستخدمنا علاقة التبديل (3.43) لنحصل على النتيجة النهائية و التي تتفق مع العلاقة (6.28).

سيكون من الجدير بالإهتمام دراسة تبادل المؤثرات الدرجية مع المؤثر الهاميلتوني المتناظر لإستكشاف أي خواص تناظرية لهذه المؤثرات. لو أردنا حساب $[\hat{H}, \hat{a}^+]$ نحصل على

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{a}^+] &= \hbar\omega[\hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{1}{2}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\left([\hat{a}^+\hat{a}^-, \hat{a}^+] + [\frac{1}{2}, \hat{a}^+]\right), \\
&= \hbar\omega[\hat{a}^+\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}^-\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}^-), \\
&= \hbar\omega\hat{a}^+(\hat{a}^-\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^-) = \hbar\omega\hat{a}^+[\hat{a}^-, \hat{a}^+].
\end{aligned}$$

بإستخدام علاقة التبديل (6.28) نحصل على

$$[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\hat{a}^+. \tag{6.29}$$

بنفس الطريقة يمكن أثبات علاقة التبديل التالية

$$[\hat{H}, \hat{a}^-] = -\hbar\omega\hat{a}^-. \tag{6.30}$$

سؤال (6.5): بإستخدام قوانين علاقات التبديل (3.42) و علاقة التبديل (6.28)، أثبت العلاقة (6.30). ♢

السؤال الذي يطرح نفسه هو ماهو تأثير مؤثر الرفع $\hat{a}^+$ على الدالة الموجية $\psi_n(x)$؟ بمعنى آخر هل الدالة الموجية $\hat{a}^+\psi_n(x)$ هي دالة مميزة للمؤثر الهاملتوني للمتذبذب التوافقي البسيط؟ للإجابة على هذا السؤال دعنا نستكشف أثر $\hat{H}$ على الدالة الموجية $\hat{a}^+\psi_n(x)$ كالتالي

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{a}^+\psi_n(x) &= (\hat{a}^+\hat{H} + \hbar\omega\hat{a}^+)\psi_n(x) = (\hat{a}^+E_n + \hbar\omega\hat{a}^+)\psi_n(x), \\
&= (E_n + \hbar\omega)\hat{a}^+\psi_n(x).
\end{aligned}$$

لاحظ إننا في الخطوة الثانية إستخدمنا علاقة التبديل (6.29). كذلك نعلم مسبقاً أن $E_{n+1} = (E_n + \hbar\omega)$، أي أن إضافة $\hbar\omega$ لأي مستوى طاقة ذبذبة يعني الإنتقال إلى مستوى طاقة تذبذب الأعلى له مباشرة. إذاً يمكن أن نكتب

$$\hat{H}\hat{a}^+\psi_n(x) = E_{n+1}a^+\psi_n(x).$$

هذه معادلة مميزة. هذا يعني أن $\hat{a}^+\psi_n(x)$ هي دالة مميزة للمؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ بقيمة مميزة E_{n+1}. بكلام آخر الدالة المميزة $\hat{a}^+\psi_n(x)$ تمثل الحالة الكمية المميزة $n+1$ و ليست n. إذاً نستطيع أن نكتب

$$\hat{a}^+\psi_n(x) = C_n\psi_{n+1}(x).$$

يمكن حساب قيمة الثابت C_n بإستخدام علاقات التعامد كالتالي

$$\int_{-\infty}^{\infty}(C_n\psi_{n+1})^*C_n\psi_{n+1}dx = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{a}^+\psi_n)^*\hat{a}^+\psi_n dx,$$

أو

$$|C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n+1}^* \psi_{n+1} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \hat{a}^- \hat{a}^+ \psi_n dx.$$

حيث إستخدمنا العلاقة (6.26) للتعبير عن المرافق للمؤثر الدرجي. بتطبيق علاقات التعامد و توظيف علاقة التبديل (6.28) نحصل على

$$|C_n|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* (\hat{a}^+ \hat{a}^- + 1) \psi_n dx = \langle \hat{a}^+ \hat{a}^- \rangle + 1,$$

بإستخدام العلاقة (6.25) نحصل على

$$|C_n|^2 = n + 1.$$

لو أهملنا معامل الطور المركب، و الذي لن يغير كثافة الإحتمالية أو القيم المتوقعة عند الحالة، نعتبر أن الثابت C_n حقيقي، لتصبح قيمته $C_n = \sqrt{n+1}$ و عليه نحصل على[2]

$$\hat{a}^+ \psi_n(x) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x). \tag{6.31}$$

بنفس الطريقة تماماً يمكن أن نثبت أن

$$\hat{H} \hat{a}^- \psi_n(x) = E_{n-1} a^- \psi_n(x),$$

أي أن $\hat{a}^- \psi_n(x)$ هي دالة مميزة للمؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ بقيمة مميزة E_{n-1}. أو نقول أن الدالة المميزة $\hat{a}^- \psi_n(x)$ تمثل الحالة الكمية المميزة $n-1$ و ليست n. إذاً نستطيع أن نكتب

$$\hat{a}^- \psi_n(x) = C_n' \psi_{n-1}(x),$$

و بحساب قيمة الثابت C_n' بإستخدام علاقات التعامد نحصل على $C_n' = \sqrt{n}$، و بالتالي نكتب

$$\hat{a}^- \psi_n(x) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(x). \tag{6.32}$$

سؤال (6.6): أثبت أن $\hat{a}^- \psi_n(x)$ هي دالة مميزة للمؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ بقيمة مميزة E_{n-1}. و منها أثبت العلاقة (6.32). $\diamondsuit$

يمكن التحقق من العلاقة (6.25) بإستخدام تأثيرات المؤثرات الدرجية على الدالة الموجية $\psi_n(x)$ في العلاقات (6.31) و (6.32). لو أثرنا بـ $\hat{a}^+$ على الدالة الموجية $\hat{a}^- \psi_n(x)$ في العلاقة (6.32) نحصل على

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ \hat{a}^- \psi_n(x) &= \hat{a}^+ \sqrt{n} \psi_{n-1}(x) = \sqrt{n} \hat{a}^+ \psi_{n-1}(x), \\ &= \sqrt{n} \sqrt{n-1+1} \psi_{n-1+1}(x) = n \psi_n(x), \end{aligned}$$

و الذي يحقق العلاقة (6.25). بإستخدام علاقات التعامد، من السهل علينا إثبات أنه لأي عدد صحيح $m > 0$ فإن

$$\langle (\hat{a}^+)^m \rangle = \langle (\hat{a}^-)^m \rangle = 0. \tag{6.33}$$

---

[2] بشكل عام أي مقدار مركب يساوي قيمة حقيقية مضروبة في طور، أي إننا نستطيع أن نكتب أي مقدار مركب

$$z = x + iy = re^{i\theta},$$

حيث $r = |z|^2 = x^2 + y^2$، $x = r\cos\theta$، و $y = r\sin\theta$. إذا كان معامل الطور phase factor $e^{i\theta}$ لايلعب أي دور فيزيائي (يُسَبِّبْ أي تراكب أو تداخل للحالات، أنظر صفحة 50)، فإنه يُهْمَل و تُعْتَبر $z = r$، أي حقيقية.

العلاقة (6.33) تتحقق فقط في الحالات التذبذبية النقية، أي أن المتذبذب التوافقي البسيط له رتبة وحيدة من قيم العدد الكمي n.

سؤال (6.7): بإستخدام علاقات التعامد لمجموعة الدوال الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط، أثبت العلاقة (6.33) لـ $m = 1, 2$. ♢

في حالة أن المتذبذب التوافقي يتكون من حالة خلط (أو تراكب خطي) من عدد من الحالات التذبذبية النقية، كما في العلاقة (3.57)، فإن الحالة الكلية توصف بالدالة الموجية الكلية المستقلة عن الزمن

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \psi_n(x), \tag{6.34}$$

حيث أن المعاملات A_n أعداد مركبة، فإن حسابنا للقيم المتوقعة للمؤثرات الدرجية لن تحقق العلاقة (6.33). يمكن حساب القيمة المتوقعة $\langle(\hat{a}^+)^m\rangle$، حيث m عدد صحيح، لحالة الخلط (6.34) كالتالي

$$\begin{aligned}
\langle(\hat{a}^+)^m\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)(\hat{a}^+)^m \Psi(x) dx, \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_k A_k^* \psi_k^*(x)\right) (\hat{a}^+)^m \left(\sum_n A_n \psi_n(x)\right) dx, \\
&= \sum_{k,n} A_k^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x)(\hat{a}^+)^m \psi_n(x) dx.
\end{aligned}$$

يمكن معرفة أثر المؤثر الدرجي المتعدد $\langle(\hat{a}^+)^m\rangle$ على الحالة $\psi_n(x)$ بمساعدة العلاقة (6.31)، لنحصل على

$$\begin{aligned}
(\hat{a}^+)^m \psi_n(x) &= (\hat{a}^+)^{m-1} \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x), \\
&= (\hat{a}^+)^{m-2} \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x), \\
&\vdots \\
&= (\hat{a}^+)^{m-m} \sqrt{(n+1)(n+2)\cdots(n+m)}\psi_{n+m}(x).
\end{aligned}$$

لننتهي إلى

$$(\hat{a}^+)^m \psi_n(x) = \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!}}\psi_{n+m}(x). \tag{6.35}$$

القيمة المتوقعة تصبح إذاً

$$\begin{aligned}
\langle(\hat{a}^+)^m\rangle &= \sum_{k,n} A_k^* A_n \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x)\psi_{n+m}(x) dx, \\
&= \sum_{k,n} A_k^* A_n \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!}} \delta_{k,n+m}.
\end{aligned}$$

لنحصل في نهاية المطاف

$$\langle(\hat{a}^+)^m\rangle = \sum_n A_{n+m}^* A_n \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!}} : \quad \text{if } n = j \quad \text{then} \quad \exists\, n = j + m, \tag{6.36}$$

و التي تعني أن العلاقة تتحقق بشرط إذا وجدت قيمة للمؤشر $n = j$ يوجد على الأقل حالة $n = j + m$. بنفس الطريقة يمكن حساب القيمة المتوقعة $\langle(\hat{a}^-)^m\rangle$ لحالة الخلط (6.34) لنحصل أيضاً

$$\langle(\hat{a}^-)^m\rangle = \sum_n A_{n+m}\, A_n^* \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!}} : \quad \text{if}\, n = j \quad \text{then} \quad \exists\, n = j + m. \tag{6.37}$$

لاحظ أن $\langle(\hat{a}^+)^m\rangle$ مرافق مركب لـ $\langle(\hat{a}^-)^m\rangle$، كما ذكرنا في (6.26). بقي أن نذكر أن حالة الخلط (6.34) يمكن أن تكتب بالصيغة المعتمدة على الزمن

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{iE_n t/\hbar}\psi_n(x) = e^{i\omega t/2}\sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{in\omega t}\psi_n(x), \tag{6.38}$$

و التي يستفاد منها بحساب القيم المتوقعة المعتمدة على الزمن للكميات الفيزيائية. إن وجود معامل التطور الزمني سيجعل $|\Psi(x,t)|^2$ و بالتالي القيم المتوقعة تتذبذب مع الزمن بتردد مقداره ω.

السؤال الآن ماهي الفائدة النظرية من المؤثرات الدرجية و كيف ستسهم هذه المؤثرات في فهمنا و دراستنا للنظام المتذبذب التوافقي؟ الجواب هو أن هذه المؤثرات لها فوائد كثيرة تتعدى في واقع الأمر النظام المتذبذب إلى فروع أشمل في الفيزياء الكمية، كفيزياء كم المجالات. لن نستطيع إحصاء هذه الفوائد جميعاً هنا، لكن سنأخذ بعضاً منها فيما يتعلق بنظامنا.

عن طريق المؤثرات الدرجية نستطيع بناء الدالة المميزة $\psi_n(x)$ لأي رتبة n من رتب الذبذبة التوافقية البسيطة فقط لو عرفنا الدالة المميزة للحالة الأرضية $\psi_0(x)$. حيث أننا نعلم أن

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= \hat{a}^+\psi_0(x), \\
\psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{1\times 2}}(\hat{a}^+)^2\psi_0(x), \\
\psi_3(x) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^+\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{1\times 2\times 3}}(\hat{a}^+)^3\psi_0(x),
\end{aligned}$$

أو بشكل عام نستطيع أن نكتب الحالة المميزة $\psi_n(x)$ بدلالة الحالة المميزة للحالة الأرضية $\psi_0(x)$ كالتالي

$$\psi_n(x) = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0(x). \tag{6.39}$$

لاحظ الشبه بين العلاقة (6.39) و صيغة رودريجز (A.143) لدالة هيرميت. هل تستطيع أن تحدد الشبه و لماذا؟ العلاقة (6.39) هي حالة خاصة من العلاقة (6.35) وذلك عندما $m = 0$. أيضاً لو كان لدينا صيغة للحالة المميزة $\psi_n(x)$ فإننا نستطيع الإنتقال إلى الحالة المميزة $\psi_{n-1}(x)$ بتطبيق مؤثر الخفض $\hat{a}^-$. لاحظ أن المؤثرات الدرجية تنقل الحالة المميزة إلى حالة مميزة أخرى بتماثل partiy مختلف. بكلام آخر الحالات المميزة $\hat{a}^+\psi_n(x)$ و $\hat{a}^-\psi_n(x)$ لهما نفس التماثل و الذي يعاكس تماثل الحالة المميزة $\psi_n(x)$.

بالإضافة إلى أعلاه، فإن أي مؤثر، ونعني أي مؤثر خطي و هيرميشي، لأي متغير ديناميكي في النظام المتذبذب التوافقي البسيط يمكن التعبير عنه بالمؤثرات الدرجية. لقد قمنا بذلك بالفعل سابقاً للمؤثر الهاميلتوني في العلاقات (6.24) و (6.27). يمكننا كذلك التعبير عن الموقع بالمؤثرات الدرجية. لو جمعنا المعادلتين (6.22) و (6.23) نحصل على

$$\hat{a}^+ + \hat{a}^- = \frac{2}{\sqrt{2}}\beta x,$$

أو نكتب

$$x = \frac{1}{\beta\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a}^-) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}^-), \tag{6.40}$$

حيث إستخدمنا التعريف (6.5) للتعبير عن ثابت النظام β. كذلك نستطيع التعبير عن مؤثر مربع الموقع x^2 كالتالي

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^+ + \hat{a}^-)(\hat{a}^+ + \hat{a}^-), \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(\hat{a}^+)^2 + (\hat{a}^-)^2 + \hat{a}^+\hat{a}^- + \hat{a}^-\hat{a}^+\right]. \end{aligned}$$

بتطبيق علاقة التبديل (6.28) نحصل على $\hat{a}^-\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a}^- + 1$. بالتعويض في المعادلة أعلاه نحصل على

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(\hat{a}^+)^2 + (\hat{a}^-)^2 + 2\hat{a}^+\hat{a}^- + 1\right]. \tag{6.41}$$

بنفس الطريقة يمكننا التعبير عن مؤثر كمية الحركة بإستخدام بالمؤثرات الدرجية لو طرحنا المعادلة (6.23) من المعادلة (6.22)، لنحصل على

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a}^-). \tag{6.42}$$

كذلك يمكن إيجاد مربع مؤثر كمية الحركة بإستخدام بالمؤثرات الدرجية بتربيع المعادلة (6.42)، لنحصل على

$$\hat{p}^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}\left[2\hat{a}^+\hat{a}^- + 1 - (\hat{a}^+)^2 - (\hat{a}^-)^2\right]. \tag{6.43}$$

سؤال (6.8): من المعادلتين (6.22) و (6.23) و بتطبيق علاقة التبديل (6.28) أثبت بالتفصيل العلاقات (6.42) و (6.43). ♢

سؤال (6.9): بإستخدام العلاقة (6.41) عبر عن جهد الحركة التوافقية البسيطة (6.1) بإستخدام المؤثرات الدرجية. كذلك بإستخدام العلاقة (6.43) عبر عن الطاقة الحركية للحركة التوافقية البسيطة بإستخدام المؤثرات الدرجية. بعد ذلك أثبت أن مجموع مؤثر الجهد و الطاقة الحركية يُعطي المؤثر الهاميلتوني في العلاقة (6.24). ♢

من السهل الآن حساب القيم المتوقعة للمتغيرات الديناميكية للنظام. لو حسبنا قيمة $\langle x\rangle$، و بإستخدام العلاقة (6.33)، سنجد أن

$$\langle x\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle\hat{a}^+\rangle + \langle\hat{a}^-\rangle\right) = 0,$$

مما يتفق مع نقاش التناظر السابق في العلاقة (6.11). كذلك يمكن حساب قيمة $\langle x^2\rangle$ بإستخدام العلاقات (6.25)، (6.33)، و (6.41) لنحصل على

$$\begin{aligned} \langle x^2\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left[\langle(\hat{a}^+)^2\rangle + \langle(\hat{a}^-)^2\rangle + 2\langle\hat{a}^+\hat{a}^-\rangle + 1\right], \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(0 + 0 + 2n + 1\right], \end{aligned}$$

لننتهي إلى أن

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2}). \tag{6.44}$$

هذا يعني أن الجسيم المهتز يقضي جُل وقته في النقطتين $\pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+1/2)}$ حول نقطة الإتزان $x = 0$ و بنفس الإحتمالية.

أيضاً من العلاقة (6.42) و (6.33) يمكن حساب القيمة المتوقعة لمؤثر كمية الحركة $\langle\hat{p}\rangle$ لنحصل على

$$\langle p\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\langle\hat{a}^{+}\rangle - \langle\hat{a}^{-}\rangle\right) = 0,$$

و الذي يتفق مع نقاشنا فيما يخص فكرة التناظر في العلاقة (6.12). لو أردنا تحديد متوسط مقدار كمية الحركة للجسيم المهتز يلزمنا حساب $\langle p^2\rangle$ ، لنحصل على

$$\begin{aligned}\langle p^2\rangle &= \frac{m\hbar\omega}{2}\left[2\langle\hat{a}^{+}\hat{a}^{-}\rangle + 1 - \langle(\hat{a}^{+})^2\rangle - \langle(\hat{a}^{-})^2\rangle\right], \\ &= \frac{m\hbar\omega}{2}\left[2n + 1 - 0 - 0\right]\end{aligned}$$

لنحصل على

$$\langle p^2\rangle = m\hbar\omega(n+\frac{1}{2}), \tag{6.45}$$

و الذي يعني أن الجسيم المهتز في الحالة n يتجه إلى اليمين (أي إتجاه $+x$) بمتوسط كمية حركة مقدارها $\sqrt{m\hbar\omega(n+1/2)}$ و إلى اليسار (أي إتجاه $-x$) بمتوسط كمية حركة مقدارها $-\sqrt{m\hbar\omega(n+1/2)}$ و بنفس الإحتمالية. لهذ فإن المحصلة تساوي صفر أي أن $\langle p\rangle = 0$.

نحن جاهزون الآن لإختبار مبدأ هايزنبرج (2.28) للمتذبذب التوافقي البسيط. حيث نجد أن الخطأ في تحديد الموقع Δx يصبح

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) - 0},$$

بينما الخطأ في تحديد كمية الحركة Δp يصبح

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{m\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) - 0},$$

و بالتالي يصبح حاصل ضرب الخطأ في قياس الموقع في الخطأ في قياس كمية الحركة يساوي

$$\Delta x\Delta p = \hbar(n+\frac{1}{2}) \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{6.46}$$

و التي تحقق مبدأ هايزنبرج (2.28). المساوة هنا تحدث فقط عند الحالة الأرضية، عندما $n = 0$.

كذلك من معرفتنا بقيم $\langle x^2\rangle$ في (6.44) و $\langle p^2\rangle$ في (6.45) يمكننا حساب القيم المتوقعة للجهد التوافقي البسيط (6.1) و طاقة الحركة للنظام المتذبذب. حيث نجد بالنسبة للجهد أن

$$\langle V(x)\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega(n+\frac{1}{2}).$$

من العلاقة (6.13) نجد أن

$$\langle V(x)\rangle = \frac{1}{2}E_n, \tag{6.47}$$

أي أن طاقة الجهد في المتوسط تمثل 50% من الطاقة الكلية للنظام المهتز. في المقابل نجد أن القيمة المتوقعة للطاقة الحركية تصبح

$$\langle K\rangle = \frac{\langle\hat{p}^2\rangle}{2m} = \frac{1}{2}\hbar\omega(n+\frac{1}{2}).$$

أيضاً من العلاقة (6.13) نجد أن

$$\langle K\rangle = \frac{1}{2}E_n, \tag{6.48}$$

أي أن الـ 50% الباقية من الطاقة الكلية تكون على شكل طاقة حركة. إذا نكتب

$$\langle K\rangle + \langle V\rangle = \langle H\rangle = E_n,$$

لأن النظام محافظ يتبع قانون حفظ الطاقة الميكانيكية. إن تقاسم الطاقة الكلية بالتساوي بين طاقة الحركة و طاقة الجهد لهو سمة من سمات الهاميلتون التربيعي quadratic Hamiltonian (أي الذي يعتمد على مربع الموقع x^2). طبعاً نحن نعلم من الفيزياء الكلاسيكية أن طاقة الحركة و طاقة الجهد تتغيران مع الزمن بشكل دوري. لكن متوسط مقدار طاقة الجهد و طاقة الحركة خلال فترة زمنية كافية يعطي 50% لكل منهما من الطاقة الكلية. مرة أخرى القيم المتوقعة للجهد التوافقي و القيمة المتوقعة للطاقة الحركية المحسوبة كمياً يجب أن تقاس للعديد من الأنظمة المتذبذبة حضرت و أخذت القياسات عند نفس الزمن.

6.4 حساب القيم المتوقعة بإستخدام الدوال المميزة
Calculating the expectation values using the eigenfunctions

هذا الجزء لايعطي أية مفاهيم إضافية عن النظام المتذبذب التوافقي البسيط، لكن في المقابل يُمَكن القاريء من المقارنة بين جبر المؤثرات الدرجية و تطبيق الحلول المباشرة. لقد أستخدمنا المؤثرات الدرجية لحساب القيم المتوقعة لجميع المتغيرات الديناميكية بسهولة كبيرة نسبياً، مقارنة مع إيجادها بتطبيق الحلول المباشرة للدالة الموجية و التي تتطلب تكاملات رياضية طويلة. سوف يترك إيجاد القيم المتوقعة بتطبيق التكاملات المباشرة للحلول المميزة (الدوال الموجية) كتمرين إختياري للقارئ. لكن هنا سوف نقوم أولاً بإثبات العلاقتين (6.31) و (6.32) و حساب $\langle x^2\rangle$ و $\langle p^2\rangle$ بإيجاد علاقات إستدعاء recursion relation للحلول المميزة بإستخدام صيغة رودريجز (A.143) فقط من أجل القراء الأكثر فضولاً.

لنبدأ بحساب $\hat{a}^+\psi_n(x)$ حيث يعطى تعريف $\hat{a}^+$ من المعادلة (6.22) و سنختار الدالة المميزة $\psi_n(z)$ في العلاقة (A.152) عوضاً عن $\psi_n(x)$ في (6.9)، لكن سنعوض قيمة دوال هيرميت فيها بإستخدام صيغة رودريجز (A.143). نحصل بالتالي على صيغة أكثر أساسية للدالة الموجية كدالة للموقع عديم الأبعاد z كالتالي

$$\psi_n(z) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}. \tag{6.49}$$

إذاً يصبح $\hat{a}^+\psi_n(x)$ كالتالي

$$\hat{a}^+\psi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z\psi_n - \frac{d\psi_n}{dz}\right). \tag{6.50}$$

يمكن حساب المشتقة قي الحد الثاني من الطرف الأيمن كالتالي

$$\frac{d\psi_n}{dz} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\left[ze^{z^2/2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2} + e^{z^2/2}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}e^{-z^2}\right],$$

$$= z\underbrace{\left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}\right]}_{\psi_n(z)} + \left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}e^{-z^2}\right].$$

في الحد الثاني سنقوم بالضرب و القسمة لثابت المعيرة لـ $n+1$ لنحصل على

$$\frac{d\psi_n}{dz} = z\psi_n(z) + \left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\frac{\sqrt{2^{n+1}\pi^{\frac{1}{2}}(n+1)!}}{(-1)^{n+1}}\underbrace{\frac{(-1)^{n+1}}{\sqrt{2^{n+1}\pi^{\frac{1}{2}}(n+1)!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}e^{-z^2}}_{\psi_{n+1}(z)}\right],$$

$$= z\psi_n(z) + \left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\frac{\sqrt{2^{n+1}\pi^{\frac{1}{2}}(n+1)!}}{(-1)^{n+1}}\psi_{n+1}(z)\right].$$

من السهل إثبات أن قيمة الثابت في الحد الثاني بين الأقواس المربعة كالتالي

$$\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\frac{\sqrt{2^{n+1}\pi^{\frac{1}{2}}(n+1)!}}{(-1)^{n+1}} = (-1)^{n-n-1}\sqrt{2^{n+1-n}}\sqrt{\frac{(n+1)!}{n!}} = -\sqrt{2(n+1)},$$

لننتهي إلى المعادلة التكرارية التالية

$$\frac{d\psi_n}{dz} = z\psi_n(z) - \sqrt{2(n+1)}\psi_{n+1}(z). \tag{6.51}$$

بتعويض المعادلة (6.51) في (6.50)، نحصل مباشرة على العلاقة (6.31) و هي أن $\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$. لاحظ أن العلاقة (6.51) مفيدة في حساب بعض القيم المتوقعة، مثل $\langle p\rangle$. كذلك يمكن إستخدام ذات المعادلة (6.51) لحساب المشتقة الثانية دون إجراء المزيد من الإشتقاقات.

نريد الآن حساب $\hat{a}^-\psi_n$ حيث يُعطى تعريف $\hat{a}^-$ من المعادلة (6.23). نحصل إذاً على

$$\hat{a}^-\psi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z\psi_n + \frac{d\psi_n}{dz}\right), \tag{6.52}$$

حيث ψ_n تعطى من (6.49). الآن لدى حسابنا للمشتقة قي الحد الثاني من الطرف الأيمن كما فعلنا سابقاً نحصل على

$$\frac{d\psi_n(z)}{dz} = z\psi_n(z) + \left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}e^{-z^2}\right].$$

لنأخذ التفاضل في الحد الثاني من الطرف الأيمن

$$\begin{aligned}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}e^{-z^2} &= -2\frac{d^n}{dz^n}ze^{-z^2} = -2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}\left(\frac{d}{dz}ze^{-z^2}\right),\\ &= -2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}\left(e^{-z^2} + z\frac{d}{dz}e^{-z^2}\right),\\ &= -2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2} - 2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2}.\end{aligned}$$

بالتعويض في معادلة المشتقة أعلاه نحصل على

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_n}{dz} &= z\psi_n + \left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\left(-2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2} - 2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2}\right)\right],\\ &= z\psi_n - 2\left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\left(e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2} + e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2}\right)\right].\end{aligned}$$

بضرب و قسمة الثابت $1-n$ نحصل على

$$\frac{d\psi_n}{dz} = z\psi_n - 2\left[\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2^{n-1}\pi^{\frac{1}{2}}(n-1)!}}{(-1)^{n-1}}\frac{(-1)^{n-1}}{\sqrt{2^{n-1}\pi^{\frac{1}{2}}(n-1)!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2}+ \\ e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2} \end{pmatrix}\right].$$

لنقوم الآن بفك الأقواس، لنحصل على

$$\begin{aligned}
\frac{d\psi_n}{dz} &= z\psi_n - 2\left[\begin{pmatrix} \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\frac{\sqrt{2^{n-1}\pi^{\frac{1}{2}}(n-1)!}}{(-1)^{n-1}}\psi_{n-1}+ \\ \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2} \end{pmatrix}\right], \\
&= z\psi_n - 2\left[\left(\frac{-1}{\sqrt{2n}}\psi_{n-1} + \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2}\right)\right], \\
&= z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} - 2\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2}.
\end{aligned}$$

بقي لنا أيجاد صيغة مناسبة لحساب التفاضل في الحد الثالث من الطرف الأيمن، لنحصل على

$$\begin{aligned}
\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}z\frac{d}{dz}e^{-z^2} &= \frac{d^{n-2}}{dz^{n-2}}z\frac{d^2}{dz^2}e^{-z^2} + \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2}, \\
&= \frac{d^{n-3}}{dz^{n-3}}z\frac{d^3}{dz^3}e^{-z^2} + 2\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2}, \\
&\vdots \\
&= z\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2} + (n-1)\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2}.
\end{aligned}$$

بالتعويض نحصل على

$$\begin{aligned}
\frac{d\psi_n}{dz} &= z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} - 2\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\begin{pmatrix} z\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}+ \\ (n-1)\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2} \end{pmatrix}, \\
&= z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} - 2z\psi_n - 2\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}(n-1)\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2}, \\
&= -z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} - 2(n-1)\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2}.
\end{aligned}$$

مرة أخرى نقوم بالضرب و الطرح للثابت، لنحصل على

$$\begin{aligned}
\frac{d\psi_n}{dz} &= -z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} - \\
&\quad 2(n-1)\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\frac{\sqrt{2^{n-1}\pi^{\frac{1}{2}}(n-1)!}}{(-1)^{n-1}}\frac{(-1)^{n-1}}{\sqrt{2^{n-1}\pi^{\frac{1}{2}}(n-1)!}}e^{z^2/2}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}e^{-z^2},
\end{aligned}$$

بالتبسيط، نحصل على

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_n}{dz} &= -z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} - 2(n-1)\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}\frac{\sqrt{2^{n-1}\pi^{\frac{1}{2}}(n-1)!}}{(-1)^{n-1}}\psi_{n-1},\\ &= -z\psi_n + \sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1} + (n-1)\sqrt{\frac{2}{n}}\psi_{n-1}.\end{aligned}$$

أو لننتهي إلى علاقة الإستدعاء recursion relation التالية

$$\frac{d\psi_n}{dz} = -z\psi_n(z) + \sqrt{2n}\psi_{n-1}(z). \tag{6.53}$$

بتعويض المعادلة (6.53) في (6.52)، نحصل مباشرة على العلاقة (6.32) و هي أن $\hat{a}^-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$.

علاقات الإستدعاء (6.51) و (6.53) من العلاقات الأساسية لحل أي مسألة تتعلق بالقيم المتوقعة للمتذبذب التوافقي البسيط. لو ساوينا بين (6.51) و (6.53) نحصل على

$$z\psi_n - \sqrt{2(n+1)}\psi_{n+1} = -z\psi_n + \sqrt{2n}\psi_{n-1},$$

أو

$$2z\psi_n = \sqrt{2n}\psi_{n-1} + \sqrt{2(n+1)}\psi_{n+1},$$

إذاً نحصل على علاقة الإستدعاء الهامة التالية

$$z\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\psi_{n-1} + \sqrt{n+1}\psi_{n+1}\right). \tag{6.54}$$

لوضربنا العلاقة (6.54) بـ z نحصل على

$$z^2\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}z\psi_{n-1} + \sqrt{n+1}z\psi_{n+1}\right),$$

بإستخدام العلاقة (6.54) مرة أخرى لحساب قيمة $z\psi_{n-1}$ و $z\psi_{n+1}$ نحصل على التالي

$$z\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n-1}\psi_{n-2} + \sqrt{n}\psi_n\right),$$

و

$$z\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\psi_n + \sqrt{n+2}\psi_{n+2}\right),$$

لنحصل على

$$\begin{aligned}z^2\psi_n &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{array}{c}\sqrt{n}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n-1}\psi_{n-2} + \sqrt{n}\psi_n\right) + \\ \sqrt{n+1}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\psi_n + \sqrt{n+2}\psi_{n+2}\right)\end{array}\right],\\ &= \frac{1}{2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2} + n\psi_n + (n+1)\psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right],\end{aligned}$$

لنحصل على العلاقة الهامة التالية

$$z^2\psi_n = \frac{1}{2}\left(\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2} + (2n+1)\psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right). \tag{6.55}$$

و التي تفيد في حساب القيمة المتوقعة $\langle x^2 \rangle$. يمكننا أيضاً، و بسهولة، من إستخدام المعادلة التفاضلية (A.150) للتعويض عن المشتقة الثانية للدالة الموجية من أجل حل القيمة المتوقعة $\langle p^2 \rangle$.

سؤال (6.10): بإستخدام العلاقة (6.55) إحسب القيمة المتوقعة $\langle z^2 \rangle$ ومنها إوجد القيمة المتوقعة $\langle x^2 \rangle$. قارن مع النتيجة (6.44). $\diamondsuit$

سؤال (6.11): بتعويض قيمة $z^2\psi_n$ من العلاقة (6.55) في المعادلة التفاضلية (A.150) أوجد علاقة الإستدعاء لـ $d^2\psi_n/dz^2$ و منها إحسب القيمة المتوقعة $\langle p^2 \rangle$. قارن مع النتيجة (6.45). $\diamondsuit$

6.5 أسئلة و تمارين

سؤال (6.12): إذا كانت الحالة ψ حل مُعَاير من حلول معادلة شرودنجر ة فأثبت أن $\int |\hat{a}^- \psi|^2 dx < \infty$ دائماً. هذا يعني أن مؤثر الخفض لا يمكن أن يولد حالة لها عيارية لانهائية (أو حالة غير عيارية). $\diamondsuit$

سؤال (6.13): أوجد الحالات ψ_0 و ψ_1 من العلاقة (6.9) و تأكد من العيارية التعامدية orthonormality (إختبار زوجية و فردية الدوال سيسهل عليك التكاملات). $\diamondsuit$

سؤال (6.14): إحسب القيم المتوقعة $\langle x \rangle$، $\langle x^2 \rangle$، $\langle p \rangle$، و $\langle p^2 \rangle$ للحالات ψ_0 و ψ_1، ومنها تأكد من إتباعها لمبدأ عدم اليقين. كذلك إحسب مقادير $\langle V \rangle$ و $\langle K \rangle$ لنفس الحالات أعلاه. $\diamondsuit$

سؤال (6.15): في الحالة الأرضية للمتذبذب التوافقي البسيط، إحسب إحتمالية تواجد الجسيم خارج منطقة الجهد الكلاسيكي. $\diamondsuit$

سؤال (6.16): لديك جسيم داخل جهد متذبذب توافقي بسيط، يوصف بالدالة الموجية الإبتدائية التالية

$$\Psi(x,0) = A\left[\psi_0(x) + \psi_1(x)\right],$$

حيث A ثابت.
أ- عاير الدالة $\Psi(x,0)$.
ب- أوجد $\Psi(x,t)$.
ج- أوجد $|\Psi(x,t)|^2$.
د- أوجد $\langle x \rangle$ كدالة للزمن.
ه- أوجد السعة و التردد الزاوي للنظام الموصوف بـ $\Psi(x,t)$.
و- من أعلاه أوجد قيمة $\langle p \rangle$ كدالة للزمن، و تحقق من نظرية إيرنفيست Ehrenfest.
ز- أرسم الدالة $|\Psi(x,t)|^2$ عند الأزمنة: $t = 0, \pi/\omega, 2\pi/\omega, 3\pi/\omega$. $\diamondsuit$

سؤال (6.17): إحسب علاقات التبديل التالية (أ) $[\hat{A}, \hat{p}]$، (ب) $[\hat{A}, \hat{p}^2]$، (ج) $[\hat{A}, x]$، (د) $[\hat{A}, x^2]$، (هـ) $[\hat{A}, K]$، (و) $[\hat{A}, V(x)]$، إذا كانت 1) $\hat{A} = \hat{a}^+$ و 2) $\hat{A} = \hat{a}^-$. $\diamondsuit$

7

معادلة شرودنجر في ثلاث أبعاد
Schrödinger equation in three dimension

في هذا الباب سنتناول أنظمة تحت تأثير جهود في ثلاث أبعاد. الآن ننتقل إلى مرحلة أخرى أكثر تعقيداً، من ناحية التركيب الرياضي مقارنة مع الأنظمة المذكورة في الباب الخامس و السادس، لكنها أقرب إلى الواقع. على الرغم من هذا التعقيد إلا أن الطرق الرياضية لحل هذه الأنظمة لاتختلف من حيث المعالجة عن الأنظمة في بعد واحد. سنجد أنه بالإمكان تخطي عقبة الصعوبة الرياضية بتوظيف المعالجة الرياضية المتبعة في الدوال الخاصة و التي تسهل عملية الحل لهذه الإنظمة و تمكننا من إيجاد الدوال و القيم المميزة لهذه الأنظمة الفيزيائية. كذلك سنجد أن بعض الأنظمة في ثلاثة أبعاد يمكن أن تبسط إلى أنظمة مشابهه في بعد واحد.

لقد تكلمنا سابقاً عن معادلة شرودنجر في ثلاث أبعاد حيث أعتبرنا جسيم كتلته m و إحداثيه يُعْطى من (3.63) و كمية حركته تُعْطى من (3.69) تحت تأثير جهد $V(\mathbf{r})$ و يوصف بالدالة الموجية $\psi(\mathbf{r},t)$ و يتبع معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن (3.71). ما يهمنا هو حل معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن في ثلاث أبعاد و التي تعطى كالتالي

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{7.1}$$

حالما نحصل على الحلول المستقلة عن الزمن و قيم الطاقة الممكنة لها، يمكن الحصول على الحلول المعتمدة على الزمن بنفس الطريقة التي إتبعناه سابقاً و المعطاة بشكل عام في العلاقة (3.23) و بشكل خاص في ((3.25.

ما يهمنا أيضاً في هذا الفصل هو التعامل مع الجهود المركزية central potentials و التي تكون فيها طاقة الجهد معتمدة على المسافة من نقطة معينة، تُعْتبَر كنقطة الأصل للنظام. و بالتالي تصبح دالة الجهد $V(r) = V(\mathbf{r})$. من أشهر الأمثلة لنظام له جهد مركزي هو ذرة الهيدروجين. لكن قبل ذلك سنقوم بدراسة حالة خاصة لأنظمة تحت تأثير جهود ثلاثية الأبعاد في نظام المحاور الكارتيزية Cartesian coordinate system. كذلك سنهتم بنظام يحوي جسيمات محصورة بجهود لانهائية ثلاثية الأبعاد و التي لها تناظرات كروية و أسطوانية.

7.1 معادلة شرودنجر في نظام المحاور الكارتيزية
Schrödinger equation in cartesian coordinates

في نظام المحاور الكارتيزية تُكْتب معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن كالتالي

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z). \tag{7.2}$$

بتمثيل مركبات كمية الحركة بإستخدام المؤثرات كما في العلاقة (3.69)، نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(x,y,z)+V(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z). \tag{7.3}$$

لنفترض حالة خاصة في نظام المحاور الكارتيزية، أن الجهد يُعْطى كمجموع ثلاث جهود مستقلة كالتالي

$$V(x,y,z)=V_1(x)+V_2(y)+V_3(z), \tag{7.4}$$

من الأمثلة على هذه الحالة الخاصة في العلاقة (7.4) جسيم محصور داخل صندوق جهد لانهائي infinte box أبعاده L_1، L_2، و L_3، أو جسيم تحت تأثير قوة توافقية بسيطة harmonic force في ثلاث أبعاد، عندها يمكن كتابة الجهد في نظام المحاور الكارتيزية بالشكل

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2),$$

و الذي يماثل العلاقة (7.4). في هذه الحالة حركة الجسيم بإتجاه x، على سبيل المثال، لن تتأثر بحركته بإتجاه y أو z. نتيجة لذلك يمكن أن نحلل الدالة الموجية إلى دوال مستقلة للمحاور الكارتيزية الثلاثة كالتالي

$$\psi(x,y,z)=u_1(x)u_2(y)u_3(z), \tag{7.5}$$

بتعويض حالة الجهد الخاصة المعطاة في العلاقة (7.4) و تحليل الدالة الموجية (7.5) في معادلة شرودنجر (7.3) و بالقسمة على $u_1(x)u_2(y)u_3(z)$، نحصل على

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{u_1(x)}\frac{d^2u_1(x)}{dx^2}+\frac{1}{u_2(y)}\frac{d^2u_2(y)}{dy^2}+\frac{1}{u_3(z)}\frac{d^2u_3(z)}{dz^2}\right]+V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)=E,$$

بإعادة تجميع الحدود لكل مركبة على حدة، نحصل على

$$\begin{aligned}
&\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{u_1(x)}\frac{d^2u_1(x)}{dx^2}+V_1(x)\right]+\\
&\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{u_2(y)}\frac{d^2u_2(y)}{dy^2}+V_2(y)\right]+\\
&\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{u_3(z)}\frac{d^2u_3(z)}{dz^2}+V_3(z)\right]=E.
\end{aligned}$$

بما أن كل حد داخل الأقواس المربعة $[\cdots]$ مستقل عن الحدود الأخرى، فإن الحد الأول يُعْطي الطاقة الناتجة عن الحركة بإتجاه x، و لتكن في هذه الحالة E_1، الحد الثاني يُعْطي الطاقة E_2 الناتجة عن الحركة بإتجاه y، و الحد الثالث يُعْطي الطاقة E_3 الناتجة عن الحركة بإتجاه z. بحيث أن قانون حفظ الطاقة يتحقق بالشكل التالي

$$E=E_1+E_2+E_3. \tag{7.6}$$

إذاً نحصل على مجموعة من ثلاث معادلات مستقلة، كل واحدة تمثل مركبة من مركبات الإتجاهات الكارتيزية المتعامدة و المستقلة، كالتالي

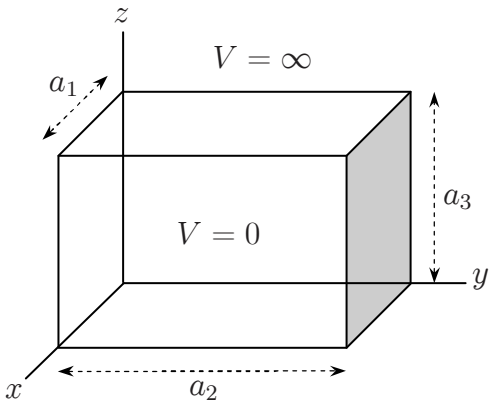
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_1(x)}{dx^2}+V_1(x)u_1(x)=E_1u_1(x),$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_2(y)}{dy^2}+V_2(y)u_2(y)=E_2u_2(y),$$

و

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_3(z)}{dz^2}+V_3(z)u_3(z)=E_3u_3(z).$$

هذه المعادلات ليست سوى معادلات شرودنجر في بعد واحد، و التي تحل بنفس الخطوات التي أتبعناها مُسَبقاً.



شكل (7.1): صندوق الجهد البعد ثلاثي البعد. الجسيم محصور داخل الصندوق و لايسمح له بالتواجد خارجه.

7.1.1 جسيم في صندوق ثلاثي البعد Particle in a 3-dimensional box

يُعَرَّف صندوق الجهد ثلاثي البعد في الإحداثيات الكارتيزية كما يلي

$$V(x,y,z) = \begin{cases} & 0 \le x \le a_1, \\ 0 & 0 \le y \le a_2, \\ & 0 \le z \le a_3, \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{7.7}$$

هذا الجهد موضح في الشكل (7.1) حيث يُحْصر الجسيم ضمن أبعاد الصندوق و لايسمح له بالتواجد خارجه. الجهد هنا ثلاثي الأبعاد في الإحداثيات الكارتيزية و قابل للفصل بإعتبار أن حركة الجسيم المحصورة داخل الجهد يمكن تقسيمها إلى ثلاث حركات مستقلة على طول المحاور الكارتيزية الثلاث: x، y، و z. من الواضح أن الجهد يحقق العلاقة (7.4) و عليه نستخدم علاقة الفصل (7.5) للدالة الموجية و نطبق مباشرةً النتيجة (7.6) لنحصل على معادلات شرودنجر المفصولة الثلاث

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_1(x)}{dx^2} &= E_1u_1(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_2(y)}{dy^2} &= E_2u_2(y), \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_3(z)}{dz^2} &= E_3u_3(z). \end{aligned} \tag{7.8}$$

بأخذ

$$k_1^2 = \frac{2mE_1}{\hbar^2}, \qquad k_2^2 = \frac{2mE_2}{\hbar^2}, \qquad k_3^2 = \frac{2mE_3}{\hbar^2}. \tag{7.9}$$

تصبح معادلات شرودنجر الثلاث

$$\begin{aligned} \frac{d^2u_1(x)}{dx^2} + k_1^2u_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2u_2(y)}{dy^2} + k_2^2u_2(y) &= 0, \\ \frac{d^2u_3(z)}{dz^2} + k_3^2u_3(z) &= 0, \end{aligned} \tag{7.10}$$

و حلولها العامة تصبح

$$\begin{aligned} u_1(x) &= A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x, \\ u_2(y) &= A_2 \sin k_2 y + B_2 \cos k_2 y, \\ u_3(z) &= A_3 \sin k_3 z + B_3 \cos k_3 z. \end{aligned} \tag{7.11}$$

الحل العام لكل محور يحوي حد فردي (عكس متناظر) و حد زوجي (متناظر). فيزيائياً نعلم أن الحدين لايجتمعان للحل الواحد و أن لابد من أن أحدهما يختفي. كي نقوم بذلك، نطبق الشروط الحدية على أساس أن الجسيم محصور داخل صندوق الجهد و بالتالي دالته الموجية على حدود حاجز الجهد يجب أن تختفي. وعليه فإن الدوال الموجية يجب أن تختفي عند الأصل، أي

$$\begin{aligned} u_1(0) &= 0 + B_1 = 0 \quad \Rightarrow B_1 = 0, \\ u_2(0) &= 0 + B_2 = 0 \quad \Rightarrow B_2 = 0, \\ u_3(0) &= 0 + B_3 = 0 \quad \Rightarrow B_3 = 0, \end{aligned}$$

لننتهي إلى الحلول الفردية فقط في (7.11) لنحصل على

$$u_1(x) = A_1 \sin k_1 x, \quad u_2(y) = A_2 \sin k_2 y, \quad u_3(z) = A_3 \sin k_3 z. \tag{7.12}$$

بتطبيق الشروط الحدية على حدود الجهد الأخرى، نجد أن

$$u_1(a_1) = A_1 \sin k_1 a_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad k_1 a_1 = n_1 \pi, \forall n_1 = 1, 2, 3, \cdots,$$

$$u_2(a_2) = A_2 \sin k_2 a_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad k_2 a_2 = n_2 \pi, \forall n_2 = 1, 2, 3, \cdots,$$

و

$$u_3(a_3) = A_3 \sin k_3 a_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad k_3 a_3 = n_3 \pi, \forall n_3 = 1, 2, 3, \cdots.$$

نستنتج أن

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{a_1}, \qquad k_2 = \frac{n_2 \pi}{a_2}, \qquad k_3 = \frac{n_3 \pi}{a_3}. \tag{7.13}$$

مباشرة من (7.9) و (7.13) نستنتج قيم الطاقات المميزة

$$E_{n_1} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{2 m a_1^2}, \qquad E_{n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_2^2}{2 m a_2^2}, \qquad E_{n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_3^2}{2 m a_3^2}. \tag{7.14}$$

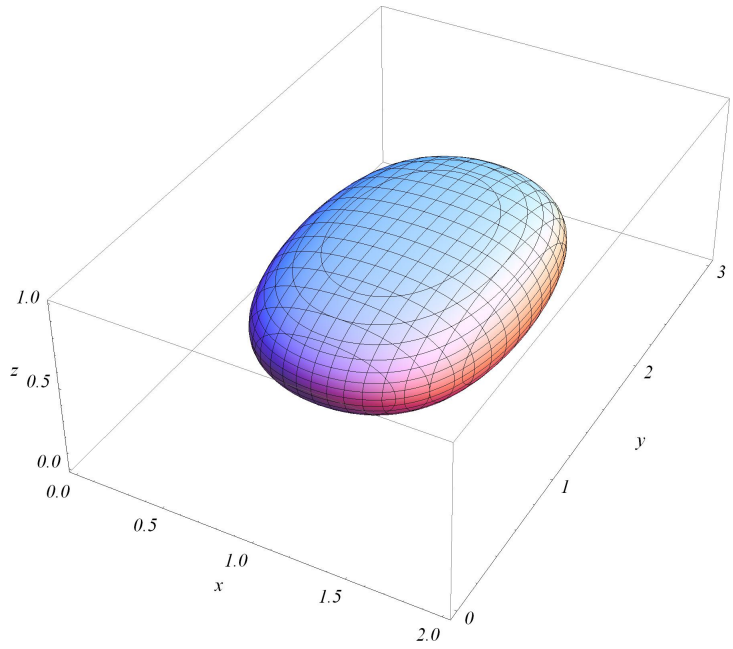
من علاقة الطاقة الكلية (7.6) نحصل على الطاقة الكلية للنظام

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right]. \tag{7.15}$$

من علاقة الطاقة الكلية يتضح لنا إنعدام الإنحلال degeneracy في قيمها طالما أن أبعاد حواف الجهد غير متساوية، أي أن $a_1 \neq a_2 \neq a_3$. لدى تساوي أبعاد الجهد فإن للجسيم تناظر في الحركة بالنسبة للمحاور الكارتيزية الثلاث ينتج عن ذلك تناظر في الهاميلتون لهذه المحاور. التناظر هذا يترجم إلى تحاطط في الطاقة الكلية. هذا يتضح في السؤال(7).

الدالة المميزة الكلية حسب (7.5) تصبح

$$\psi(x, y, z) = A \sin \left(\frac{n_1 \pi x}{a_1} \right) \sin \left(\frac{n_2 \pi y}{a_2} \right) \sin \left(\frac{n_3 \pi z}{a_3} \right), \tag{7.16}$$



شكل (7.2): دالة توزيع كثافة الإحتمالية $|\psi_{111}(x,y,z)|^2$ في الحالة الأرضية لجسيم محصور في صندوق الجهد نسبة أبعاده $a_1 : a_2 : a_3 = 2 : 3 : 1$.

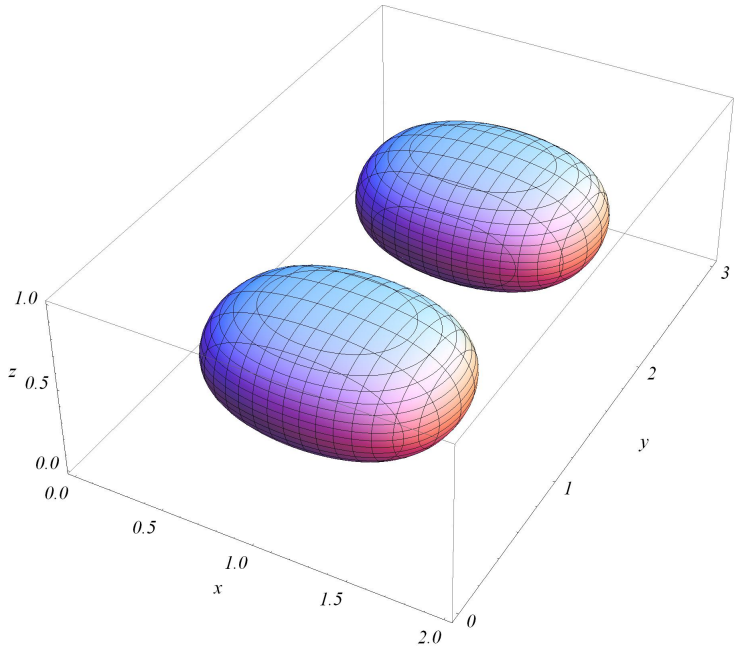
حيث أخذنا $A = A_1A_2A_3$ و التي سنحسبها من المعايرة. بتطبيق شرط المعايرة على الفضاء المعرفة عليه الدالة الموجية نحصل على

$$\begin{aligned} 1 &= \iiint_{box} |\psi(x,y,z)|^2 dxdydz, \\ &= A^2 \int_0^{a_1} \sin^2\left(\frac{n_1\pi x}{a_1}\right) dx \int_0^{a_2} \sin^2\left(\frac{n_2\pi y}{a_2}\right) dy \int_0^{a_3} \sin^2\left(\frac{n_3\pi z}{a_3}\right) dz, \\ &= A^2 \left(\frac{a_1}{2}\right)\left(\frac{a_2}{2}\right)\left(\frac{a_3}{2}\right). \end{aligned}$$

لنصل إلى $A = \sqrt{2^3/\mathcal{V}}$ حيث $\mathcal{V} = a_1a_2a_3$ يمثل الحجم الهندسي للجهد. الدالة المميزة الكلية للنظام تصبح إذاً

$$\psi(x,y,z) = \left(\frac{2^3}{\mathcal{V}}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_1\pi x}{a_1}\right) \sin\left(\frac{n_2\pi y}{a_2}\right) \sin\left(\frac{n_3\pi z}{a_3}\right). \tag{7.17}$$

لنأخذ مثال لصندوق جهد ثلاثي البعد حوافه تُعْطى بالنسبة $a_1 : a_2 : a_3 = 2 : 3 : 1$. الشكل (7.2) يُعْطي دالة توزيع كثافة الإحتمالية للحالة الأرضية $|\psi_{111}(x,y,z)|^2$. الحاصل هو الإهليجي المجسم ellipsoid و الذي لايمس أسطح صندوق الجهد. محوره الأكبر يمتد على على المحور الذي له أكبر ابعاد من صندوق الجهد (هنا محور y) و محوره الأصغر يمتد عى طول المحور ذو الأبعاد الأقل من صندوق الجهد (هنا محور z). إن تصور دالة التوزيع شائك نوعاً ما بسبب الأبعاد العالية للنظام. لكن الشكل (7.2) يُعطي ما يسمى مجموعة السطوح المتساوية isosurfaces و هي مجموعة السطوح التي تكون قيمة $|\psi_{111}(x,y,z)|^2$ ثابتة. هذه السطوح المتراكبة تُكَوِّن الحيز الذي يمكن أن نجد فيه الجسيم عند أقل طاقة. هذ الحيز معاير للوحدة. في الواقع، السطح الخارجي يمثل بطن موجة موقوفة ثلاثية الأبعاد. لو كان صندوق الجهد متساوي الحواف فمن السهل أن نتوقع أن $|\psi_{111}(x,y,z)|^2$ تعطي كرة.

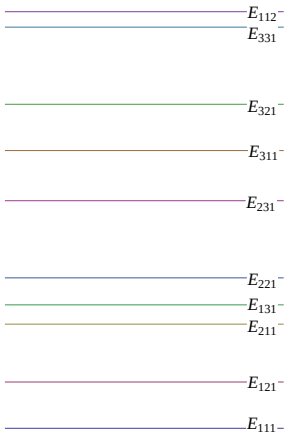


شكل (7.3): دالة توزيع كثافة الإحتمالية $|\psi_{121}(x,y,z)|^2$ في حالة الأثارة الأولى لجسيم محصور في صندوق الجهد نسبة أبعاده $a_1 : a_2 : a_3 = 2 : 3 : 1$.

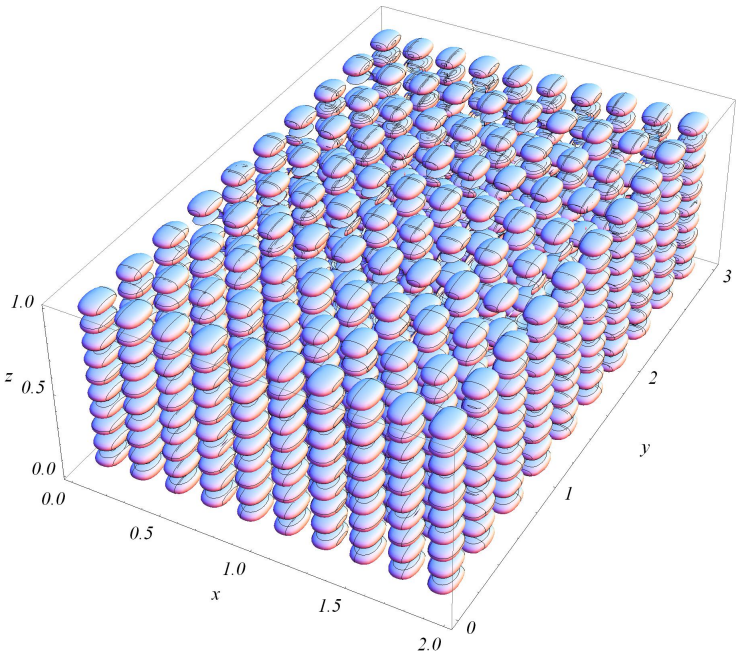
من علاقة الطاقة (7.15) فإن حالة الإثارة الأولى ستكون عند الرتبة الثانية للمحور الذي لصندوق الجهد أبعاد أكبر. هنا محور y. و عليه فإن حالة الإثارة الأولى هي $(1,2,1)$. عندما $n_2 = 2$ ينتج عن الحركة على طول محور y بطنين من الموجات الموقوفة و تبقى الموجات الموقوفة بطن واحد على طول محوري x و z. هذا موضح في الشكل (7.3). فيزيائياً الحصول على بطنين خلال الحافة الأكبر من صندوق الجهد يحتاج إلى طاقة أقل من الحصول على بطنين على طول الحواف الاقل طولاً، لأن الطول الموجي للموجات الموقوفة عند نمط معين يتناسب مع بعد المسافة التي تتكون عليها. هذا الطول الموجي يقل كلما زادت رتبة النمط مما يعني زيادة التردد و بالتالي زيادة الطاقة اللازمة للحصول على موجات موقوفة عند أنماط أكبر.

نفهم إذاً زيادة الرتبة n_3 تحتاج إلى طاقة أعلى منها للرتب n_1 و n_2 لأن بعد صندوق الجهد على طول محور z اصغر و بالتالي الحصول على نمطين (بطنين) من الموجات الموقوفة على مسافة أقل تحتاج إلى طاقة أعلى. في الواقع نجد حسابياً أن الحالة $(1,1,2)$ تمثل حالة الإثارة التاسعة كما يوضح الشكل (7.4)، بينما نجد أن الحالة (131) تمثل حالة الإثارة الثالثة. في حال تساوي أبعاد الصندوق ليصبح مكعب الجهد فإن الحالات $(2,1,1)$، $(1,2,1)$، و $(1,1,2)$ هي حالات منحلة لحالة الإثارة الأولى، بينما $(1,3,1)$ تمثل إحدى الحالات المنحلة لحالة الإثارة الثالثة!

من المتوقع أنه إذا زادت رتبة الأعداد الكمية فإن التوزيع يتجه إلى الحالة الكلاسيكية و التي تعني أن الجسيم يتواجد عند أي نقطة داخل الصندق بنفس الإحتمالية، في حالة تشبه الغازات المثالية و دالة التوزيع المتساوي. الشكل (7.5) يعطي دالة توزيع كثافة الإحتمالية للحالة $(10,10,10)$ نجد أن أماكن تواجد الجسيم داخل الصندوق بدت و كأنها تنتظم و تتوزع في كل مكان. بطون الموجان الموقوفة تصغر (تقل الاطوال الموجية) و خصوصاً على طول محور z. لك أن تتخيل الوضع في الحالة $(1000,1000,1000)$ و التي تقترب جداً من الحالة الكلاسيكية، بتوافق واضح مع مبدأ التقابل.



شكل (7.4): المستويات الكمية لأول عشر حالات من حالات الطاقة الممكنة لجسيم محصور في صندوق الجهد نسبة أبعاده $a_1 : a_2 : a_3 = 2 : 3 : 1$.



شكل (7.5): دالة توزيع كثافة الإحتمالية $|\psi_{10,10,10}(x,y,z)|^2$ لجسيم محصور في صندوق الجهد نسبة أبعاده $a_1 : a_2 : a_3 = 2 : 3 : 1$.

7.2 الجهود المركزية Central potentials

كلاسيكياً، القوى المركزية هي قوى تبادلية (تتبع قانون نيوتن الثالث) تعمل على طول الخط الواصل بين مركزي الجسمين المتفاعلين. هذا الخط يسمى خط عمل القوة force line of action. لهذا السبب، فإن نظاماً مكوناً من جسمين يتفاعلان من خلال القوى المركزية له زخم خطي (كمية حركة) ثابت (أو محفوظ) طالما إنعدمت محصلة القوى الخارجية على هذا النظام. بالإضافة إلى ذلك، في حالة عدم وجود قوى فتل خارجية external torque فإن محصلة العزوم الزاوية حول أي نقطة تقع على خط عمل القوة ثابتة أيضاً بسبب إنعدام قوى الفتل الداخلية للنظام حول تلك النقطة. بما إن نقاشنا محدود عن الأنظمة المحافظة، فإن القوى المركزية المحافظة لها دالة جهد. إن دالة جهد القوة المركزية تعتمد على المسافة القطرية radial distance r بين مركزي الجسمين المتفاعلين، و التي يمكن إعتبار مركز أحدهما كنقطة الأصل. هذا يعني هندسياً أن دالة الجهد لها تناظر كروي حول نقطة الأصل، و عليه دالة الجهد V تُكتب $V(r)$. لهذا السبب نستخدم نظام الإحداثيات القطبية الكروية spherical polar coordinate system (r, θ, ϕ) بدلاً عن نظام الإحداثيات الكارتيزية المربعة (x, y, z) لوصف النظام.

إن مربع مؤثر كمية الحركة يصبح

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right].$$

من الواضح أنه لدينا جزئين رئيسيين في تمثيل مربع مؤثر كمية الحركة في الإحداثيات الكروية: أولهما الجزء القطري، نرمز له بـ $\hat{p}_r^2$ ويُعْطى كالتالي

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right), \tag{7.18}$$

و هو ناتج عن الحركة القطرية radial motion للجسيم إلى النقطة المركزية (إتجاه $-\hat{\mathbf{r}}$) أو من النقطة المركزية (إتجاه $+\hat{\mathbf{r}}$). الجزء الثاني في تمثيل مربع مؤثر كمية الحركة هو الجزء الزاوي angular part (θ, ϕ)، و نرمز له بـ $\hat{L}^2$ ونُعْطى من

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right], \tag{7.19}$$

و هو ناتج عن الحركة المدارية orbital motion بشكليها الزاوي العمودي أو القطبي zenithal anglular motion المعتمد على θ، والزاوي السمتي (أو الدوراني) azimuthal anglular motion المعتمد على ϕ. من الواضح أن المؤثر $\hat{L}^2$ ذاتي الترافق أو هيرميشي، كما أسلفنا للمعادلات التفاضلية المُشْتَقة من معادلة لابلاس. إن إختيار الرمز $\hat{L}^2$ لإثارة شكوك القاريء أن ما يُقصَد به هنا هو مؤثر العزم الزاوي المداري، المُكَمى في العلاقة (1.35). نعم هو بعينه! للتأكد من ذلك، لنتذكر الصيغة الكلاسيكية للعزم الزاوي من ميكانيكا نيوتن و التي تُعْطى بالتعريف

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}.$$

بالتعبير عن هذه القيم بمؤثرات، نحصل على

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla}) \quad \Rightarrow \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla})\cdot(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla}). \tag{7.20}$$

بإستخدام التحليل الموتر tensor analysis يمكن تحليل $(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla})\cdot(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla})$ بإستخدام تعريف المركبة i للضرب المتجه $(\mathbf{a}\times\mathbf{b})_i$ و التي تعطى كالتالي

$$(\mathbf{a}\times\mathbf{b})_i = \sum_{jk}\varepsilon_{ijk}a_jb_k, \tag{7.21}$$

حيث أن ε_{ijk} هو رمز ليڤي-سيڤيتا Levi-Civita symbol، و هو شبه موتر pseudotensor من الرتبة الثالثة. لذلك له 6 مركبات فقط بدلاً عن 9 مركبات كما هو الحال في الموترات الحقيقية من الرتبة الثالثة. يعرف هذا الرمز كالتالي:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{for } (ijk) = (123), (312), \text{ or } (231). \\ -1 & \text{for } (ijk) = (321), (132), \text{ or } (213). \\ 0 & \text{for } i = j, \text{ or } j = k, \text{ or } i = k. \end{cases} \tag{7.22}$$

حيث أن $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{312} = \varepsilon_{231} = +1$ تسمى التبديلات الزوجية للمؤشرات even permutations of inicies و $\varepsilon_{321} = \varepsilon_{132} = \varepsilon_{213} = -1$ تسمى التبديلات الفردية للمؤشرات odd permutation of indicies. في المقابل رمز ليڤي-سيڤيتا يساوي الصفر لأي حالات آخرى. نستنتج من أعلاه أن الموتر عكس تناظري antisymmetric، اي أن

$$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{kij} = \varepsilon_{jki} = -\varepsilon_{kji} = -\varepsilon_{ikj} = -\varepsilon_{jik}. \tag{7.23}$$

سنهتم بخاصية التقلص contraction التالية

$$\sum_i \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm} = \sum_i \varepsilon_{jki}\varepsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}. \tag{7.24}$$

نعود إلى (7.20) لنحسب ناتج $(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla})$ ليصبح

$$(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) = \sum_i (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla})_i (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla})_i = \sum_{ijklm} \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \varepsilon_{ilm} x_l \frac{\partial}{\partial x_m}.$$

بإستخدام علاقة التقلص (7.24) نحصل على

$$\sum_{ijklm} \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \varepsilon_{ilm} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} = \sum_{jklm} (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}) x_j \frac{\partial}{\partial x_k} x_l \frac{\partial}{\partial x_m},$$

$$= \sum_{jklm} \left(x_j \frac{\partial}{\partial x_k} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} - x_j \frac{\partial}{\partial x_k} x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \right).$$

بتطبيق المشتقة نحصل على

$$(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) = \sum_{jklm} \left[x_j \delta_{kj} \frac{\partial}{\partial x_k} + x_j x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} - \left(x_j \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j x_k \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \right],$$

حيث وظفنا إحدى تمثيلات كرونكر دلتا بشكلها التفاضلي، $\delta_{jk} = \partial x_j / \partial x_k$. في الطرف الأيمن: المجموع في الحد الأول يُلغَى مع المجموع في الحد الثالث. المجموع في الحد الثاني ليس سوى $r^2\nabla^2$. و أخيراً، المجموع في الحد الأخير ليس سوى $-(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nabla})^2$. و عليه ننتهي إلى أن

$$(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}) = r^2\nabla^2 - (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nabla})^2.$$

مرة أخرى، في الطرف الأيمن الحد الأول في الإحداثيات الكروية يصبح

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

بينما في الحد الثاني و بسبب الضرب القياسي للمتجه القطري بـ$\boldsymbol{\nabla}$، تتلاشى المركبات الزاوية لتبقي فقط المركبة القطرية

$$(\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})^2 = r^2\nabla_r^2 = \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right).$$

إذاً حاصل الطرح سيعطينا فقط الحدود الزاوية

$$(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla})\cdot(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla}) = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{7.25}$$

بتعويض النتيجة (7.25) في التمثيل (7.20) نحصل على نفس الصيغة (7.19). هذا يؤكد أن المؤثر في الصيغة (7.19) يمثل مربع العزم الزاوي المداري.

إذاً مربع مؤثر كمية الحركة $\hat{\mathbf{p}}^2$ في الإحداثيات القطبية يمكن أن يكتب

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{r^2}\hat{L}^2 \tag{7.26}$$

و عليه تصبح معادلة شرودنجر (7.1) في الإحداثيات الكروية كالتالي

$$\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)\right)\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi),$$

أو بالشكل

$$\{r^2\hat{p}_r^2 - 2mr^2[E-V(r)]\}\psi(r,\theta,\phi) + \hat{L}^2\psi(r,\theta,\phi) = 0 \tag{7.27}$$

بما إنه لدينا جزئين منفصلين، جزء قطري يعتمد فقط على r و جزء زاوي يعتمد على θ و ϕ، يمكننا إذاً إستخدام فكرة فصل المتغيرات للدالة الموجية $\psi(r,\theta,\phi)$ من أجل حل المعادلة أعلاه. حيث نفرض أن

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi). \tag{7.28}$$

بتعويض بالتحليل (7.28) في المعادلة (7.27) مع القسمة على $R(r)Y(\theta,\phi)$، نحصل على

$$\frac{1}{R(r)}\{r^2\hat{p}_r^2 - 2mr^2[E-V(r)]\}R(r) + \frac{1}{Y(\theta,\phi)}\hat{L}^2Y(\theta,\phi) = 0, \tag{7.29}$$

حيث الحد الأول قطري بشكل تام و الحد الثاني زاوي بشكل تام. لاحظ أن الجزء القطري مستقل عن الجزء الزاوي، إذاً لايمكن أن يكون مجموعهما يساوي صفراً إلا في حالة واحدة، و هي أن الحد الأول يساوي ثابت بينما الحد الثاني يساوي سالب هذا الثابت، ليكون مجموعهما يساوي صفراً دائماً. لكن ماهو هذا الثابت؟ للإجابة على هذا التساؤل، نقوم بمقارنة صيغة (7.19) مع المعادلة التفاضلية للتوافقية الكروية (A.44) لنستنتج أن

$$-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}Y_{lm}(\theta,\phi) + l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi) = 0,$$

و بالتالي نحصل على المعادلة المميزة eigenequation لمربع مؤثر العزم الزاوي المداري

$$\hat{L}^2Y_{lm}(\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\phi). \tag{7.30}$$

نجد إذاً أن مجموعة الدوال التوافقية هي دوال مميزة eigenfunctions للمؤثر الخطي و الهيرميشي $\hat{L}^2$ بقيم مميزة $l(l+1)\hbar^2$.

سؤال (7.1): من علاقة $\hat{L}^2$ بمؤثر كمية الحركة، أثبت أن $\hat{L}^2$ مؤثر خطي و هيرميشي. $\diamondsuit$

نعود الآن إلى معادلة (7.29)، بإستخدام المعادلة المميزة (A.41) نحصل على المعادلة القطرية، حيث ان

$$\frac{1}{R(r)}\{r^2\hat{p}_r^2 - 2mr^2[E - V(r)]\}R(r) + l(l+1)\hbar^2 = 0,$$

أو نكتب

$$\frac{r^2\hat{p}_r^2}{\hbar^2}R_{nl}(r) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)]R_{nl}(r) + l(l+1)R_{nl}(r) = 0. \tag{7.31}$$

من الواضح أن الحل يعتمد على العزم الزاوي المداري لإحتواء المعادلة على العدد الكمي l لكن الحركة السمتية أو الدورانية azimuthal motion لاتؤثر في الحل بسبب غياب العدد الكمي m. في المقابل، و بسبب إعتماد الحل على الطاقة، كما هو واضح في الحد الثاني، سيظهر لدينا عدد كمي آخر تعتمد عليه الطاقة، يسمى بالعدد الكمي الرئيسي principal quantum number. سنرمز لهذا العدد الكمي بالرمز n. لهذا السبب علّمنا دالة الحل بالصيغة $R_{nl}(r)$.

يجب أولاً أن نحدد دالة الجهد ثم نقوم بحل المعادلة القطرية أعلاه. سوف نقوم في هذا الفصل بحل المعادلة القطرية (7.31) لثلاثة حالات، ذرة الهيدروجين، الجسيم الحر في الإحداثيات الكروية، و أخيراً الجسيم المحصور في جهد كروي لانهائي.

7.3 معادلة شرودنجر للنظام ذو الجسيمين
The Schrödinger equation for two-particle system

للجسيم المنفرد، الدالة الموجية $\psi(\mathbf{r}, t)$ هي دالة للإحداثيات المكانية $\mathbf{r}$ ، والزمانية t للجسيم. في حالة النظام ذي الجسيمين فإن الدالة الموجية الكلية $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ هي دالة لإحداثيات الجسيم الأول $\mathbf{r}_1$ ، وإحداثيات الجسيم الثاني $\mathbf{r}_2$ ، بالإضافة إلى الزمن t والوقت. التطور الزمني لـ $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ يُعطى من معادلة شرودنجر (3.12)

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t), \tag{7.32}$$

حيث أن الهاميلتون للنظام $\hat{H}$ يُعطى بـ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t). \tag{7.33}$$

المؤشران 1 و 2 للمؤثر ∇ يعني التفاضل على أحداثيات الجسيم رقم 1 (موقعه و كتلته $\mathbf{r}_1$ و m_1) و الجسيم رقم 2 (موقعه و كتلته $\mathbf{r}_2$ و m_2).

كثافة الإحتمالية في هذه الحالة تُعرف كالتالي

$$P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)d^3r_1d^3r_2 = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3r_1d^3r_2, \tag{7.34}$$

و التي تُعطي إحتمال أن نجد الجسيم رقم 1 في عنصر حجم d^3r_1 و إحتمال أن نجد الجسيم رقم 2 في عنصر حجم d^3r_2. كما هو الحال دائماً الدالة الموجية الكلية $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ معايرة، أي

$$\iint P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)d^3r_1d^3r_2 = \iint |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3r_1d^3r_2 = 1. \tag{7.35}$$

في حالة الجهود المستقلة عن الزمن، يمكننا الحصول على الحل الكامل، كما فعلنا سابقاً، بفصل المتغيرات

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-iEt/\hbar}, \tag{7.36}$$

حيث الدالة الموجية المكانية ψ تحقق معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{7.37}$$

و E تمثل الطاقة الكلية للنظام. بشكل عام حل المعادلة (7.37) صعب، لكن لدينا حالتان خاصتان يمكن إستخدامهما من أجل تقليص المعادلة (7.37) إلى معادلة شبيهة للجسيم المنفرد.

7.3.1 الجسيمات غير المتفاعلة Noninteracting particles

في هذه الحالة نفرض أن الجسيمين لا يتفاعلان مع بعضهما البعض، لكن كل جسيم يتعرض إلى قوة خارجية، كأن يرتبط كل جسيم إلى زنبركين منفصلين. طاقة الجهد الكلية في هذه الحالة عبارة عن مجموع الجهد على كل جسيم على حدة

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2), \tag{7.38}$$

وبالتالي يمكن حل المعادلة (7.37) بإستخدام فصل المتغيرات

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2). \tag{7.39}$$

بتعويض المعادلتين (7.38) و (7.39) في المعادلة (7.37) و قسمة الطرفين على الطرف الأيمن من المعادلة (7.39) مع تجميع الحدود التي تعتمد على $\mathbf{r}_1$ لوحدها و التي تعتمد على $\mathbf{r}_2$ لوحدها، سنصل إلى

$$\underbrace{\left[-\frac{1}{\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)} \frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) + V_1(\mathbf{r}_1) \right]}_{E^{(1)}} + \underbrace{\left[-\frac{1}{\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)} \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) + V_2(\mathbf{r}_2) \right]}_{E^{(2)}} = E,$$

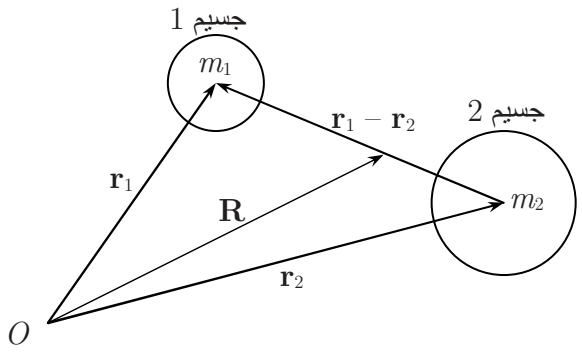
والذي ينتج عنها معادلتي شرودنجر منفصلتين لكل جسيم

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) + V_1(\mathbf{r}_1)\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) &= E^{(1)}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) + V_2(\mathbf{r}_2)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) &= E^{(2)}, \end{aligned} \tag{7.40}$$

حيث أن $E = E^{(1)} + E^{(2)}$. في هذه الحالة فإن الدالة الموجية الكلية المعتمدة على الزمن للجسيمين ليست سوى حاصل الضرب للدالة الموجية لكل جسيم منفرد. أي

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \left[e^{-iE^{(1)}t/\hbar}\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \right] \left[e^{-iE^{(2)}t/\hbar}\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) \right], \\ &= \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)\Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) = \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) e^{-i(E^{(1)}+E^{(2)})t/\hbar}. \end{aligned} \tag{7.41}$$

هذه النتيجة طبيعية حيث تعني أن كل جسيم في حالة خاصة له، مستقلة عن الآخر. لكن في المحصلة الدالة الموجية الكلية (7.41) حل لمعادلة شرودنجر (7.32). هذا صحيح طالما أن الجسيمين غير متفاعلين.



شكل (7.6): إحداثي نظام مكون من جسيمين متفاعلين بطاقة جهد مركزية و تبادلية بالنسبة لنقطة مرجع.

7.3.2 التفاعل بالجهد المركزي Interaction by central potential

لنعتبر نظام كما في الشكل (7.6)، مكون من جسيمين 1 و 2 كتلهما m_1 و m_2، و إحداثيهما بالنسبة لنقطة مرجع O هو $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$، على الترتيب، و يتفاعلان إبدالياً من خلال الجهد مركزي

$$V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = V(r), \tag{7.42}$$

حيث أن

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \tag{7.43}$$

إذا إعتبرنا أن النظام يوصف بالدالة الموجية $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$، فإن معادلة شرودنجر التي تصف النظام تُعطى كالتالي

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V\left(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\right)\right]\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{7.44}$$

لكن في واقع الأمر إختيار الإحداثيات $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$ لوصف كلاً من m_1 و m_2، على الترتيب، ليس من أفضل الخيارات المتاحة لنا! بما أن دالة الجهد (7.42) تعتمد على المسافة النسبية r، فإنه من المناسب إستخدام نظام إحداثيات يتكون من $\mathbf{r}$ و $\mathbf{R}$، يصف نظام من الكتل μ و M، حيث أن R هو إحداثي مركز الكتلة center of mass position يُعطى بـ

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \tag{7.45}$$

و $M = m_1 + m_2$ يمثل الكتلة الكلية للنظام، و أخيراً μ تُعْرَف بالكتلة المختزلة و تُعْطى بـ

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \tag{7.46}$$

من المعادلة (7.45) يمكن أن نكتب

$$m_1\mathbf{r}_1 = M\mathbf{R} - m_2\mathbf{r}_2,$$

بجمع $m_2\mathbf{r}_1$ مع الطرفين نحصل على

$$M\mathbf{r}_1 = M\mathbf{R} + m_2\mathbf{r}.$$

بإستخدام (7.46) ننتهي إلى أن

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{\mu}{m_1}\mathbf{r}. \tag{7.47}$$

بنفس الطريقة يمكن أن نثبت أن

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{\mu}{m_2}\mathbf{r}. \tag{7.48}$$

يمكن إستخدام الإحداثيات الكارتيزية لـ $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$، $\mathbf{r} = (x, y, z)$ و $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ مع إستخدام قاعدة السلسلة أن نثبت التالي

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x}.$$

من (7.43) نجد أن $\partial x/\partial x_1 = 1$ و من (7.45) نجد أن $\partial X/\partial x_1 = m_1/M = \mu/m_2$. و عليه فإن

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\mu}{m_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}.$$

بإتباع نفس الخطوات لإيجاد المشتقات بالنسبة لبقية المركبات y_1 و z_1 نحصل على

$$\frac{\partial}{\partial y_1} = \frac{\mu}{m_2}\frac{\partial}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial y} \qquad \text{and} \qquad \frac{\partial}{\partial z_1} = \frac{\mu}{m_2}\frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial}{\partial z},$$

بضم المشتقات مع بعضهم البعض نحصل على صيغة لـ $\boldsymbol{\nabla}_1$ بدلالة $\boldsymbol{\nabla}_R$ و $\boldsymbol{\nabla}_r$ كالتالي

$$\boldsymbol{\nabla}_1 = \frac{\mu}{m_2}\boldsymbol{\nabla}_R + \boldsymbol{\nabla}_r. \tag{7.49}$$

كذلك هو الحال بإتباع نفس الخطوات لإحداثي الجسيم الثاني r_2، نجد أن

$$\boldsymbol{\nabla}_2 = \frac{\mu}{m_1}\boldsymbol{\nabla}_R - \boldsymbol{\nabla}_r. \tag{7.50}$$

بإستخدام العلاقات (7.49) و (7.50) في معادلة شرودنجر (7.44) نحصل على تعبير لمعادلة شرودنجر في نظام الإحداثيات الجديدة

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \tag{7.51}$$

يمكن أن نستخدم فصل المتغيرات لنكتب الدالة الموجية $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ كحاصل ضرب دالة موجية للحركة النسبية $\psi_r(\mathbf{r})$ و دالة موجية لحركة مركز الكتلة $\Psi_R(\mathbf{R})$، أي أن

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_r(\mathbf{r})\Psi_R(\mathbf{R}). \tag{7.52}$$

كذلك نعتبر أن الطاقة الكلية عبارة عن مجموع طاقتي مركز الكتلة و الحركة النسبية، أي أن

$$E = E_r + E_R. \tag{7.53}$$

بإستخدام علاقة الدالة الموجية (7.52) و الطاقة (7.53) في معادلة شرودنجر (7.53) نفصل المعادلة إلى معادلتين مستقلتين

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Psi_R(\mathbf{R}) = E_R\Psi_R(\mathbf{R}), \tag{7.54}$$

و

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\psi_r(\mathbf{r}) = E_r\psi_r(\mathbf{r}). \tag{7.55}$$

معادلة شرودنجر (7.54) تمثل حركة مركز الكتلة center of mass motion و هي مماثلة لمعادلة الجسيم الحر و بالتالي حلها ببساطة هو الموجة المستوية كما ذكرنا في القسم (4.5). في المقابل فإن معادلة شرودنجر (7.55) تمثل معادلة الحركة النسبية relative motion (أي حركة الجسيم 2 بالنسبة للجسيم 1) و هي نفس حركة جسيم وحيد له كتلة تساوي مقدار الكتلة المختزلة و تحت تأثير دالة الجهد (7.42).

هذا التحليل هو نفسه المستخدم في الميكانيكا التقليدية و الذي يؤدي إلى إختزال مسألة الجسيمين إلى ما يكافئها من حركة الجسيم الواحد. إن ما يهمنا في معظم الأحوال هو إيجاد الحلول لمعادلة الحركة النسبية، لأنها هي التي تعكس تأثير الجهد على حركة الجسيمين، و منها نستطيع أن نستنبط قيم الطاقة المميزة للنظام.

سؤال (7.2): بالتفصيل الشديد أثبت علاقتي التحويل (7.47) و (7.48) و كذلك إستنبط علاقات النبلا (7.49) و (7.50) للإحداثيين $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$ و لجميع المركبات. كذلك أثبت معادلة شرودنجر (7.51). ♢

سؤال (7.3): بإستخدام علاقة فصل المتغيرات (7.52) و تقسيم الطاقة (7.53) إفصل معادلة شرودنجر (7.51) إلى معادلتين تمثلان حركة مركز الكتلة و الحركة النسبية كما هو الحال في (7.54) و (7.55)، على الترتيب. علل سبب نجاح طريقة الفصل (7.52) و ماهي الديناميكا التي تؤدي إلى فشل طريقة فصل المتغيرات؟ ♢

7.4 ذرة الهيدروجين The hydrogen atom

تُعْتبر ذرة الهيدروجين أبسط ذرة، حيث تتركب من جسيمين نُقَطيين (حسب المقاييس الذرية on the atomic scale): أولاً نواة ثقيلة و ساكنة نسبياً لها شحنة موجبة مقدارها $+e$، ثانياً إلكترون أخف بكثير شحنته $-e$ يحوم حول النواة في مدارات. إن مركز كتلة النظام - و الذي يمكن إعتباره نقطة الأصل- يقع على محور عمل القوة و هو قريب جداً من مركز النواة. النظام في حالة الإرتباط ($E < 0$) نتيجة لقوى الجذب المتبادلة الكهروستاتيكية. إن جهد هذه القوة يسمى الجهد الكولومي و يُعطى بـ

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}, \tag{7.56}$$

حيث $Z = 1$ تمثل العدد الذري. للتعميم سنأخذها كما هي دون التعويض بقيمة الوحدة. بتعويض الجهد (7.56) في المعادلة القطرية (7.31) مع أخذ تعويض $\hat{p}_r^2$ من الصيغة (7.18)، نحصل على المعادلة القطرية لذرة الهيدروجين

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R_{nl}(r) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right]R_{nl}(r) - l(l+1)R_{nl}(r) = 0,$$

حيث μ هي الكتلة المختزلة reduced mass تُعطى من

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_p} + \frac{1}{m_e}, \tag{7.57}$$

حيث M_p هي كتلة النواة (كتلة البروتون)، و m_e هي كتلة الإلكترون. هنا إعتبرنا النتيجة من القسم (7.3) بأخذ الحركة النسبية (حركة الإلكترون بالنسبة للبروتون) بعين الإعتبار و إهمال حركة مركز الكتلة. بسبب أن كتلة البروتون 1836 مرة أكبر من كتلة الإلكترون فإن الكتلة المختزلة μ تقترب من كتلة الإلكترون m_e، أي أن $\mu \approx m_e$. بتبسيط أكثر للمعادلة القطرية نحصل على

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{nl}(r)}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}l(l+1)\right]R_{nl}(r) = 0. \tag{7.58}$$

بما أن النظام لدينا في حالة إرتباط bound state، فيزيائياً الدالة القطرية R_{nl} يجب أن تستوفي الشروط الرياضية التالية

$$\lim_{r\to\infty} R_{nl} \to 0; \quad \text{and} \quad \lim_{r\to 0} R_{nl} < \infty. \tag{7.59}$$

هنا إعتبرنا نقطة الأصل هي النواة، لذلك التناهي عند نقطة الأصل $r = 0$ هنا ليس سوى أن تختفي R. لأن وصول الإلكترون عند النواة سينهي الذرة. سوف لن نعتبر هنا حالات الإستمرارية continuum states و التي لها طاقة موجبة.

لنأخذ التعريفات التالية

$$\kappa^2 \equiv -\frac{8\mu E}{\hbar^2}; \quad \text{and} \quad \rho \equiv \kappa r. \tag{7.60}$$

بتعويض التعاريف (7.60) في المعادلة القطرية (7.58) نحصل على

$$\frac{\kappa^2}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR_{nl}}{d\rho}\right) + \kappa^2\left[-\frac{1}{4} + \frac{\mu Z e^2}{2\pi\epsilon_0\kappa\hbar^2}\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_{nl} = 0.$$

نعرف الكمية الفيزيائية عديمة الوحدة التالية

$$\rho_0 \equiv \frac{\mu Z e^2}{2\pi\epsilon_0\kappa\hbar^2}, \tag{7.61}$$

بتعويضها في المعادلة القطرية مع تطبيق الإختصارات لـ $\kappa^2 > 0$ نحصل على

$$\frac{d^2R_{nl}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_{nl}}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\rho_0}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_{nl} = 0. \tag{7.62}$$

من الخصائص الرياضية الهامة لهذه المعادلة القطرية أن لها نقطة تفرد منتظمة regular singularity عند المركز $\rho = 0$. كذلك لها نقطة تفرد غير منتظمة irregular singularity عندما $\rho \to \infty$. من المصطلح إطلاق تسميات على الحدود داخل الأقواس المربعة. فمثلاً الحد $l(l+1)/\rho^2$ يُصْطلح عليه بإسم الحد النابذ centrifugal term بالرغم من عدم صحة هذا الإسم إلا إننا سنلتزم به. كذلك الحد ρ_0/ρ يصطلح عليه بالحد المركزي، و هي تسمية مقبولة.

7.4.1 حلول المعادلة القطرية Radial equation solutions

سندرس الآن سلوكيات المعادلة القطرية التقاربية asymptotic behavior ($\rho \to \infty$) و التقريبية approximate behavior ($\rho \to 0$). عندما $\rho \to \infty$، المعادلة القطرية (7.62) تتقارب إلى

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} - \frac{1}{4}R \sim 0, \tag{7.63}$$

و حلها يُعطى بـ

$$R \sim Ae^{-\rho/2} + Be^{\rho/2},$$

لكن الحد $e^{\rho/2}$ يضطرد blows up عندما $\rho \to \infty$، و عليه فإنه لابد أن $B = 0$. من الواضح أن حل المعادلة (7.63) هو

$$R \sim Ae^{-\rho/2}. \tag{7.64}$$

في المقابل، عندما $\rho \to 0$ فإن الحد النابذ يصبح الحد الأساسي المسيطر (إلا في حالة أن $l \neq 0$) و بالتالي المعادلة القطرية (7.62) تقترب إلى

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R \approx 0, \tag{7.65}$$

و حلها يُعْطى بـ

$$R \approx C\rho^l + D\rho^{-(l+1)}.$$

مرة أخرى نجد أن الحد $\rho^{-(l+1)}$ يضطرد blows up عندما $\rho \to 0$، و عليه فإنه لابد أن $D = 0$. من الجلي أن حل (7.65) هو

$$R \approx C\rho^l. \tag{7.66}$$

من أجل الوصول إلى حل رياضي مقبول فيزيائياً سنقوم الآن بدمج الحلين: الحل التقربي (7.64) و الحل التقريبي (7.66) بالطريقة

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} G(\rho), \tag{7.67}$$

حيث أننا نتأمل أن الدالة $G(\rho)$ تتقارب كـ ρ^{-l} (عندما $\rho \to \infty$). بإيجاد المشتقتين الأولى و الثانية لـ $R(\rho)$

$$\frac{dR}{d\rho} = \frac{1}{2}e^{-\rho/2}\rho^{l-1}\left[2\rho\frac{dG(\rho)}{d\rho} + (2l-\rho)G(\rho)\right],$$

و

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} = \frac{1}{4}e^{-\rho/2}\rho^{l-2}\left\{4\rho\left[\rho\frac{d^2G(\rho)}{d\rho^2} + (2l-\rho)\frac{dG(\rho)}{d\rho}\right] + \left[4l^2 - 4l(\rho+1) + \rho^2\right]G(\rho)\right\},$$

و من ثم تعويضهما في المعادلة القطرية (7.62) نحصل على

$$e^{-\rho/2}\rho^{l-1}\left[\rho\frac{d^2G}{d\rho^2}(\rho) + (2l+2-\rho)\frac{dG}{d\rho}(\rho) + (\rho_0 - l - 1)G(\rho)\right] = 0.$$

بعيداً عن القيم الحدية لـ ρ فإننا نأخذ المعادلة التفاضلية في الأعلى بين القوسين المربعين تساوي الصفر. هذا يعطينا معادلة تفاضلية لـ $G(\rho)$ كالتالي

$$\rho\frac{d^2G}{d\rho^2}(\rho) + (2l+2-\rho)\frac{dG}{d\rho}(\rho) + (\rho_0 - l - 1)G(\rho) = 0, \tag{7.68}$$

و هي معادلة خطية من الرتبة الثانية تقابل معادلة لاجوير المزاملة التفاضلية (A.130). من المقارنة نجد أن

$$k = 2l+1; \quad \text{and} \quad j = \rho_0 - l - 1. \tag{7.69}$$

هذا يعني أن حل المعادلة (7.68) سيتناسب مع دالة لاجوير المزاملة، أي أن

$$G(\rho) \propto L^{2l+1}_{\rho_0-l-1}(\rho), \tag{7.70}$$

حيث أن ثابت التناسب يحسب من شرط المعايرة للدالة القطرية R (و ليس G) في التعريف (7.67). كذلك يتضح لنا من (7.69) أن المعامل ρ_0 لايأخذ إلا قيم صحيحة. بما أن $j \geq 0$ و $l \geq 0$، فلابد أن $\rho_0 \geq 1$. من هنا نعرف العدد الكمي الرئيسي n، بحيث أن

$$n \equiv \rho_0 = \frac{\mu Z e^2}{2\pi\epsilon_0\kappa\hbar^2}; \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{7.71}$$

بتربيع الطرفين و التعويض عن κ من التعريف (7.60)، يمكن حساب القيم المميزة لطاقة الترابط

$$E = -\frac{\mu Z^2}{2n^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\right)^2 = -\frac{1}{2}\mu c^2\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}; \qquad n = 1, 2, 3, \cdots, \tag{7.72}$$

حيث α ثابت التناسب الدقيق معرف في الصيغة (1.39). علاقة الطاقة (7.72) مطابقة تماماً لعلاقة الطاقة لبوهر (1.43)، مع وجود إختلافين واضحين: أولهما أن نتيجة الطاقة حُسِبَت (وليس فقط حُسبَت) من الدالة الموجية و التي منها نستطيع إستنباط التوزيعات الإحصائية و تحديد شدة طيف الإنبعاث، دون إعتبار المدارات الكلاسيكية. ثانياً علاقة الطاقة (7.72) تعتمد على الكتلة المختزلة μ المعرفة من (7.57) عوضاً عن كتلة الإلكترون m في علاقة الطاقة لبوهر (1.43). هذا أدى إلى حدوث إزاحة طفيفة في الأطوال الموجية لأطياف الذرات الشبيهة للهيدروجين hydrogen like atoms المحسوبة من علاقة رايدبرج (1.44) عند إستبدال m بـ μ. هذا أدى بالعالم أوري Urey و مجموعته إلى إكتشاف نظير الهيدروجين الديُتيريوم deuterium عام 1932، حيث ان كتلة الديُتيريوم ضعف كتلة الهيدروجين تقريباً.

حل المعادلة القطرية المعايرة من دوال لاجوير Radial solution using Laguerre polynomilas

سنبدأ من المعادلة التفاضلية القطرية (7.62). لو أخذنا

$$R_{nl}(\rho/\kappa) = \frac{\chi(\rho)}{\rho}, \tag{7.73}$$

لنحصل على

$$\frac{dR_{nl}}{d\rho} = -\frac{\chi(\rho)}{\rho^2} + \frac{\chi'(\rho)}{\rho},$$

$$\frac{2}{\rho}\frac{dR_{nl}}{d\rho} = -2\frac{\chi(\rho)}{\rho^3} + 2\frac{\chi'(\rho)}{\rho^2},$$

و

$$\frac{d^2R_{nl}}{d\rho^2} = \frac{2\chi(\rho)}{\rho^3} - \frac{2\chi'(\rho)}{\rho^2} + \frac{\chi''(\rho)}{\rho}.$$

بالتعويض في (7.62) نحصل على المعادلة التفاضلية

$$\chi''(\rho) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\rho_0}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi(\rho) = 0. \tag{7.74}$$

بمقارنة المعادلة (7.74) بالمعادلة التفاضلية (A.135)، نجد أن

$$\frac{k^2-1}{4} = l(l+1) \quad \Rightarrow \quad k = 2l+1,$$

و

$$\rho_0 \equiv n = \frac{2j+k+1}{2} = j+l+1 \quad \Rightarrow \quad j = n-l-1,$$

و الذي يتفق تماماً مع العلاقة (7.69). بمقارنة $\chi(\rho)$ مع الحل في (A.134) سنحصل على الدالة $\chi(\rho)$ بمعلومية دوال لاجوير المصاحبة

$$\chi(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^{l+1}L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho).$$

بإستخدام علاقة المعايرة (A.136)، يمكن أن نعاير الدالة $\chi(\rho)$ كالتالي

$$\int_0^\infty [\chi(\rho)]^2\, d\rho = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}2n. \tag{7.75}$$

و بالتالي نكتب الدالة $\chi(\rho)$ بصيغتها المعايرة

$$\chi_{nl}(\rho) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^{l+1} L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho). \tag{7.76}$$

بإستخدام التعريف (7.73) الدالة القطرية R_{nl} تصبح

$$R_{nl}(\rho/\kappa) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^{l} L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho). \tag{7.77}$$

عند تعويض قيمة الطاقة من النتيجة (7.72) في تعريف κ (7.60) و أخذ الجذر التربيعي، نحصل على

$$\kappa = \frac{2Z}{n} \frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{2Z}{n a_0}, \tag{7.78}$$

حيث a_0 يُعْرَف بنصف قطر بوهر Bohr radius و يعطى بـ

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\hbar}{\mu c \alpha} = 0.529 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}, \tag{7.79}$$

و عليه يمكن كتابة ρ كالتالي

$$\rho = \kappa r = \frac{2}{n}\left(\frac{Zr}{a_0}\right). \tag{7.80}$$

بإستخدام العلاقة (7.80) في (7.77)، نحصل على صيغة مغلقة للدالة القطرية المعايرة

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{l} e^{-Zr/na_0} L^{2l+1}_{n-l-1}(2Zr/na_0), \tag{7.81}$$

حيث أضفنا المعامل $(2Z/na_0)^{3/2}$ في الطرف الأيمن لضمان المعايرة للتكامل $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr$ بدلاً عن $\int_0^\infty |R(\rho)|^2 \rho^2 d\rho$. وبالتالي فإن الدالة القطرية $R_{nl}(r)$ لها أبعاد تساوي $1/L^{3/2}$، حيث L بُعد الطول، عوضاً عن الدالة عديمة الأبعاد $R_{nl}(\rho)$. إن شرط $n \geq 1$ عدد صحيح ضروري من أجل ضمان تناهي الدالة القطرية $R_{nl}(r)$ إلى الصفر عندما $r \to \infty$. هذا سيؤدي إلى قيم الطاقة المميزة (7.72).

حلول متسلسلة القوى للمعادلة القطرية Power series solution for the radial equation

المعادلة التفاضلية (7.68) لها نقطة تفرد منتظمة regular singularity حول النقطة $\rho = 0$. حسب نظرية فوكس Fuchs's theorem للحلول بإستخدام متسلسلات القوى لهذا النوع من المعادلات التفاضلية [1] سيعطي على الأقل حلاً واحداً طالما المتسلسلة حول نقطة على الأسوء هي نقطة تفرد منتظمة.

سنقوم بإستخدام طريقة فوربينيوس Frobenius series لحلول متسلسلات القوى حول $\rho = 0$ من خلال الصيغة

$$G(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu \rho^{\nu+q}; \qquad b_0 \neq 0, \tag{7.82}$$

حيث q ثابت يحدد لاحقاً. بأخذ المشتقتين الأولى و الثانية

$$\frac{dG(\rho)}{d\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+q) b_\nu \rho^{\nu+q-1},$$

و

$$\frac{d^2G(\rho)}{d\rho^2} = \sum_{\nu=0}^{\infty}(\nu+q)(\nu+q-1)b_\nu\rho^{\nu+q-2},$$

و بتعويضهما في المعادلة التفاضلية (7.68) نحصل على

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}(q+\nu+2l+1)(q+\nu)b_\nu\rho^{q+\nu-1} + \sum_{\nu=0}^{\infty}(\rho_0-l-1-q-\nu)b_\nu\rho^{q+\nu} = 0.$$

الحد الأول يُعْطي الحد الأصغر قوة لـ ρ و ذلك عندما $\nu = 0$. و بالتالي نحصل على

$$q(q+2l+1)b_0\rho^{q-1}+\sum_{\nu=1}^{\infty}(q+\nu+2l+1)(q+\nu)b_\nu\rho^{q+\nu-1}+\sum_{\nu=0}^{\infty}(\rho_0-l-1-q-\nu)b_\nu\rho^{q+\nu} = 0.$$

من تفرد تمثيل متسلسلات القوى على فترة ثابتة فإن معاملات ρ مرفوعة عند نفس القوة يجب أن تساوي الصفر. و عليه لو أخذنا الحد الثاني في المعادلة أعلاه و الذي يبدأ مجموعه من $\nu = 1$ وقمنا بجعل المجموع يبدأ من $\nu = 0$ مع إستبدال $\nu \to \nu+1$ نحصل على

$$q(q+2l+1)b_0\rho^{q-1} + \sum_{\nu=0}^{\infty}\left[\begin{array}{c}(q+\nu+2l+2)(q+\nu+1)b_{\nu+1}+\\(\rho_0-l-1-q-\nu)b_\nu\end{array}\right]\rho^{q+\nu} = 0.$$

من معاملات الحد الأصغر قوة، ذلك معاملات الـρ^{q-1} نحصل على المعادلة المُبَيِّنة indicial equation حيث أن

$$q(q+2l+1) = 0,$$

و منها نجد أن قيم q التي تعطي جميع الحلول ممكنة هي

$$q = -2l-1; \qquad q = 0.$$

بينما نجد من الحدود الذي تحوي المجموع summation، و أخذنا الحد الذي عنده $\nu = j$ فإن معاملات ρ^{q+j} ستعطي العلاقة التكرارية

$$b_{j+1} = \frac{j+q+l-\rho_0+1}{(q+j+2l+2)(q+j+1)}b_j. \tag{7.83}$$

عند قيمة $q = -2l-1$، و هي قيمة صحيحة و سالبة، فإن العلاقة التكرارية (7.83) تصبح

$$b_{j+1} = \frac{j-l-\rho_0}{(j+1)(j-2l)}b_j.$$

من الملاحظ أن المقام يختفي عندما $j = 2l$، هذا يعني أن الجذر $q = -2l-1$ لايعطي حل متناهي. في المقابل نجد أنه عند $q = 0$ فإن العلاقة التكرارية (7.83) تصبح

$$b_{j+1} = \frac{j+l-\rho_0+1}{(j+2l+2)(j+1)}b_j, \tag{7.84}$$

و هي متناهية لأي قيمة ممكنة من قيم j. و عليه نحصل على معاملات متسلسلة القوى بمعلومية b_0 كالتالي

$$b_1 = \frac{l-\rho_0+1}{2l+2}b_0,$$

$$b_2 = \frac{(l-\rho_0+1)\,(l-\rho_0+2)}{2(2l+2)(2l+3)}b_0,$$

$$b_3 = \frac{(l-\rho_0+1)\,(l-\rho_0+2)\,(l-\rho_0+3)}{6(2l+2)(2l+3)(2l+4)}b_0,$$

$$b_4 = \frac{(l-\rho_0+1)\,(l-\rho_0+2)\,(l-\rho_0+3)\,(l-\rho_0+4)}{24(2l+2)(2l+3)(2l+4)(2l+5)}b_0,$$

$$\vdots$$

$$b_j = b_0\frac{1}{j!}\prod_{p=1}^{j}\frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}. \tag{7.85}$$

بتعويض المعاملات b_j في (7.82) مع تذكر أن $q=0$ نحصل على حل الدالة $G(\rho)$ كمتسلسلة قوى لانهائية. هذا يعني أن المؤشر ν عندما يصل إلى قيمة كبيرة جداً ما j فإن العلاقة التكرارية (7.83) تؤول إلى

$$b_{j+1} \sim \frac{1}{j}b_j = \frac{1}{j!}b_0; \quad j \gg 1, \tag{7.86}$$

و بالتالي تصبح الدالة $G(\rho)$ كالتالي

$$G_{nl}(\rho) = b_0\left[1+\sum_{\nu=1}^{j_{\max}}\frac{1}{\nu!}\prod_{p=1}^{\nu}\frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}\rho^\nu + \sum_{\nu>j_{\max}}^{\infty}\frac{1}{\nu!}\rho^\nu\right],$$

حيث $j_{\max}$ يمثل القيمة التي عندها يمكن تطبيق التقارب (7.86). إن حد المجموع الثاني داخل الأقواس ليس سوى الدالة الأسية e^ρ. إذاً الدالة $G(\rho)$ لها حد كثيرة حدود لـ ρ مع حد أُسي e^ρ. هذا يعني أن الدالة R حسب التعريف (7.67) تتصرف كـ $e^{\rho/2}$. أي أنها غير متناهية عندما $\rho \to \infty$ و بالتالي غير قابلة للمعايرة! إذاً لابد أن تنقطع متسلسلة القوى عندما تصل $\nu > j_{max}$. هذا يعني أن $b_{j_{\max}+1}=0$. هذا يحدث في حالة أن

$$l-\rho_0+j_{\max}+1=0. \tag{7.87}$$

هذا يعني أن $\rho_0 = j_{\max}+l+1$، بعبارة أخرى ρ_0 تساوي قيم صحيحة. حقيقة أنه يمكننا الوصول إلى صيغة مغلقة و نظيفة للمعاملات b_j إذا ماكانت ρ_0 عدد صحيح! بهذا نحصل على علاقات المضروب. لكن ما هي قيم ρ_0 الصحيحة التي يمكن تبنيها؟ من تعريفنا لـ ρ_0 في (7.61) من الواضح جداً أنها لايمكن أن تكون سالبة أو حتى صفر. من الممكن فقط $\rho_0 \geq 1$ و الذي يتفق ما ذكرناه بداية لدى تعريفنا للعدد الكمي الرئيسي n في (7.71) و الذي منه حصلنا على قيم الطاقة الميزة (7.72). إذاً نكرر بأن

$$\rho_0 = n = j_{\max}+l+1 \geq 1.$$

بتعويض المعاملات (7.85) في (7.82) مع تذكر أن $q=0$ نحصل على حل الدالة $G(\rho)$ كالتالي

$$G_{nl}(\rho) = b_{nl}\left[1+\sum_{\nu=1}^{n-l-1}\frac{\rho^\nu}{\nu!}\prod_{p=1}^{\nu}\frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}\right], \tag{7.88}$$

حيث إستبدلنا الثابت b_0 بـ b_{nl} لأنه يعتمد على قيم العدد الكمي الرئيسي n و على العدد الكمي الزاوي المداري l. و تحدد قيمة الثابت b_{nl} لاحقاً من معايرة الدالة القطرية $R(r)$. من من الواضح أن المجموع في (7.88) لن يكون معنوياً إلا إذا تحقق

$$n-l-1 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad n \geq l+1, \tag{7.89}$$

جدول (7.1): حل متسلسلة القوى للدوال $G_{nl}(\rho)$.

كثيرات حدود الدالة $G(\rho)$
$G_{10}(\rho) = b_{10}$
$G_{20}(\rho) = b_{20}\left(1-\frac{\rho}{2}\right)$
$G_{21}(\rho) = b_{21}$
$G_{30}(\rho) = b_{30}\left(1-\rho+\frac{\rho^2}{6}\right)$
$G_{31}(\rho) = b_{31}\left(1-\frac{\rho}{4}\right)$
$G_{32}(\rho) = b_{32}$
$G_{40}(\rho) = b_{40}\left(1-\frac{3\rho}{2}+\frac{\rho^2}{2}-\frac{\rho^3}{24}\right)$
$G_{41}(\rho) = b_{41}\left(1-\frac{\rho}{2}+\frac{\rho^2}{20}\right)$
$G_{42}(\rho) = b_{42}\left(1-\frac{\rho}{6}\right)$
$G_{43}(\rho) = b_{43}$

عدا ذلك ستأخذ ν قيم سالبة و هذا غير مقبول. الجدول (7.1) يوضح حلول متسلسلة القوى للدالة $G_{nl}(\rho)$ حسب العلاقة (7.89) عند قيم مختلفة للعدد الكمي الرئيسي n و العدد الكمي الزاوي المداري l. بتعويض الدالة $G_{nl}(\rho)$ في (7.88) في حل المعادلة القطرية (7.67) نحصل على حل الجزء القطري $R_{nl}(\rho)$ على الشكل

$$R_{nl}(\rho) = b_{nl}\rho^l e^{-\rho/2}\left[1+\sum_{\nu=1}^{n-l-1}\frac{\rho^\nu}{\nu!}\prod_{p=1}^{\nu}\frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}\right].$$

بإستخدام (7.80) للتعويض عن ρ، نحصل على الحل الكامل للجزء القطري $R_{nl}(r)$ على الشكل

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{\rho}{r}\right)^{3/2} b_{nl}\left(\frac{2}{n}\frac{Zr}{a_0}\right)^l e^{-Zr/na_0}\left[\begin{array}{c}1+\\ \sum_{\nu=1}^{n-l-1}\frac{1}{\nu!}\left(\frac{2Z}{n}\frac{r}{a_0}\right)^\nu\times\\ \prod_{p=1}^{\nu}\frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}\end{array}\right], \tag{7.90}$$

حيث أن $n \geq l+1$ و الثابت b_{nl} يُحدَّد من المعايرة. المعامل $\rho/r = 2Z/na_0$ ثابت يتم إضافته لدى الإنتقال من المتغير عديم الأبعاد ρ إلى المتغير القطري r. إن معايرة الدالة الموجية في الإحداثيات الكروية يكتب كالتالي

$$1 = \int|\psi(r,\theta,\phi)|^2 d^3r = \int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\,|\psi(r,\theta,\phi)|^2. \tag{7.91}$$

بعد فصل المتغيرات فإن معايرة الدالة القطرية تصبح

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1. \tag{7.92}$$

على سبيل المثال، لو أردنا معايرة الدالة $R_{10}(r)$، بإستخدام (7.90) نجد أنها تُحسب كالتالي

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty\left|\left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{3/2} b_{10}e^{-Zr/a_0}\right|^2 r^2dr = \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^3 b_{10}^2\int_0^\infty e^{-2Zr/a_0}r^2dr, \\ &= \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^3 b_{10}^2\frac{a_0^3}{4Z^3} = 2b_{10}^2 \end{aligned}$$

و عليه فإن قيمة الثابت هي

$$b_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

من الممكن إمتصاص المعامل $(\rho/r)^{3/2} = (2Z/na_0)^{3/2}$ لدى تحويل المتغير $\rho \to r$ بإستخدام ثابت المعايرة b'_{nl} بدلاً عن b_{nl}، حيث أن

$$b'_{nl} = \left(\frac{\rho}{r}\right)^{3/2} b_{nl} = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} b_{nl}, \tag{7.93}$$

وبالتالي يتم حساب ثابت المعايرة b'_{nl} مباشرة من التكامل $\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$. في المثال أعلاه للدالة $R_{10}(r)$، نجد من المعايرة أن

$$b'_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2},$$

والتي تتفق مع المعادلة (7.93). إذاً نلخص و نقول: سنستخدم المعامل b_{nl} لمعايرة الدالة عديمة الأبعاد $R_{nl}(\rho)$ و المعامل b'_{nl} لمعايرة الدالة القطرية $R_{nl}(r)$التي لها أبعاد $1/L^{3/2}$، حيث أن العلاقة بين b_{nl} و b'_{nl} تُعطى من خلال العلاقة (7.93).

علاقة الحلين و طيف الهيدروجين Two solution relation and Hydrogenlike spectrum

من نظرتنا إلى المعادلة (7.67) إستنتجنا علاقة التناسب (7.70) حيث أدركنا على الفور أن الدالة $G(\rho)$ ليست سوى دالة لاجوير المزاملة. و أن حل متسلسلة القوى (7.88) ليس إلا دالة لاجوير المصاحبة، أي أن

$$G_{nl}(\rho) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho). \tag{7.94}$$

بسياق آخر، نجد أن

$$L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho) = \left[1 + \sum_{\nu=1}^{n-l-1} \frac{\rho^\nu}{\nu!} \prod_{p=1}^{\nu} \frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}\right], \tag{7.95}$$

و الثابت b_{nl} ليس إلا

$$b_{nl} = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}. \tag{7.96}$$

سواء حسبنا الدالة القطرية بإستخدام دوال لاجوير المزاملة في العلاقة (7.81) أو من حلول متسلسلة القوى (7.90) سنحصل على نفس النتيجة تماماً. الجدول (7.2) يُعطي بعض أوائل الدوال الموجية القطرية و المُعَايرة للذرات شبيهة الهيدروجين. بينما الشكل (7.7) يوضح سلوك هذه الدوال و ما يقابلها من التوزيعات الإحصائية.

حسب علاقة فصل المتغيرات (7.28)، نكتب الدالة الموجية الكلية للذرات شبيهة الهيدروجين

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi), \tag{7.97}$$

حيث $R_{nl}(r)$ تُعْطى من (7.90) و مجدولة في الجدول (7.2). حل الجزء الزاوي $Y_{lm}(\theta,\phi)$ يُعْطى من التعريف (A.43) و مجدول في الجدول (A.2). كما أن الشكل (7.7) يوضح توزيع المواقع للإلكترون عند الحالات الكمية المختلفة، فإن الشكل (A.2) يوضح التوزيعات الزاوية لدالة الموقع حول النواة و التي منها يمكن أن نستنتج فضاء المدارات المسموح للإلكترون أن يسلكها حول النواة. إن كثافة توزيعات الموقع و التوزيعات الزاوية للإلكترون حول النواة موضحة في الشكل (7.8).

جدول (7.2): أوائل الدوال الموجية القطرية المُعَايرة للذرات شبيهة الهيدروجين.

$R_{10}(r) = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}}e^{-Zr/a_0}$
$R_{20}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{2a_0^3}}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$
$R_{21}(r) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{Z^3}{6a_0^3}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$
$R_{30}(r) = \frac{2}{3}\sqrt{\frac{Z^3}{3a_0^3}}\left[1-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)+\frac{2}{27}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right]e^{-Zr/3a_0}$
$R_{31}(r) = \frac{4}{27}\sqrt{\frac{2Z^3}{3a_0^3}}\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right)\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}$
$R_{32}(r) = \frac{4}{81}\sqrt{\frac{Z^3}{30a_0^3}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$
$R_{40}(r) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}}\left[1-\frac{3}{4}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)+\frac{1}{8}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2-\frac{1}{192}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^3\right]e^{-Zr/4a_0}$
$R_{41}(r) = \frac{1}{16}\sqrt{\frac{5Z^3}{3a_0^3}}\left[1-\frac{1}{4}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)+\frac{1}{80}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right]\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/4a_0}$
$R_{42}(r) = \frac{1}{64\sqrt{5}}\sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}}\left(1-\frac{1}{12}\frac{Zr}{a_0}\right)\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/4a_0}$
$R_{43}(r) = \frac{1}{768\sqrt{35}}\sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^3 e^{-Zr/4a_0}$

مثال (7.1): من متسلسلة القوى $G(\rho)$ أوجد المعادلة القطرية المعايرة لذرة شبيهة الهيدروجين عند الحالة $n=3$ و $l=1$ و منها إحسب $\langle r\rangle$. ما هي كثافة الإحتمالية أن نجد الإلكترون عند $r=\langle r\rangle$؟ إحسب الدالة الموجية الكلية للحالة. ♠

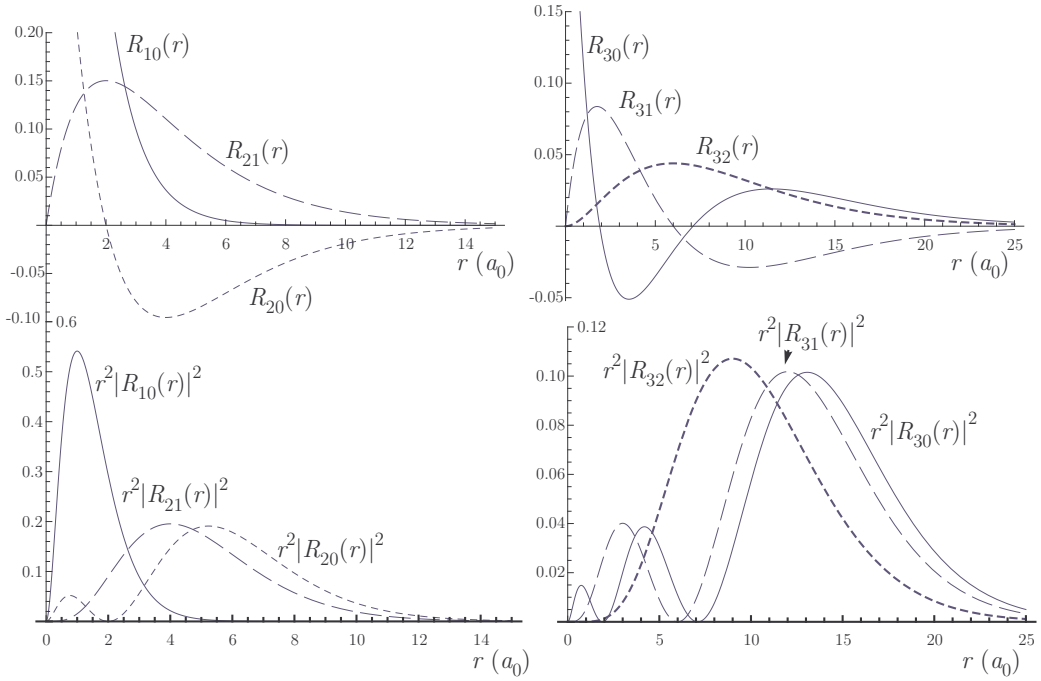
حل مثال (7.1): من علاقة (7.88) نكتب الحل

$$G_{31}(\rho) = b_{31}\left[1+\sum_{\nu=1}^{1}\frac{\rho^\nu}{\nu!}\prod_{p=1}^{\nu}\frac{(l-n+p)}{(2l+p+1)}\right] = b_{31}\left[1-\frac{\rho}{4}\right].$$

بإستخدام العلاقة (7.67) نحصل على الدالة القطرية

$$R_{31}(\rho) = \rho\, e^{-\rho/2}G_{31}(\rho) = b_{31}\left[1-\frac{\rho}{4}\right]\rho\, e^{-\rho/2}.$$

بإستخدام العلاقة (7.80) للإنتقال من المتغير ρ إلى r حيث نستبدل ثابت المعايرة b_{nl} بـ b'_{nl}، نكتب الدالة القطرية



شكل (7.7): الدوال الموجية القطرية المعايرة $R_{nl}(r)$ (بوحدة $a_0^{-3/2}$) لذرة الهيدروجين $Z=1$ و توزيعاتها الإحتمالية $r^2|R_{nl}(r)|^2$ (بوحدة a_0^{-1}) لأوائل رتب الإعداد الكمية الرئيسية و الأعداد الكمية الزاوية المدارية.

$$R_{31}(r) = \frac{2}{3} b'_{31} \left[1 - \frac{1}{6}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)\right]\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{1}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)}.$$

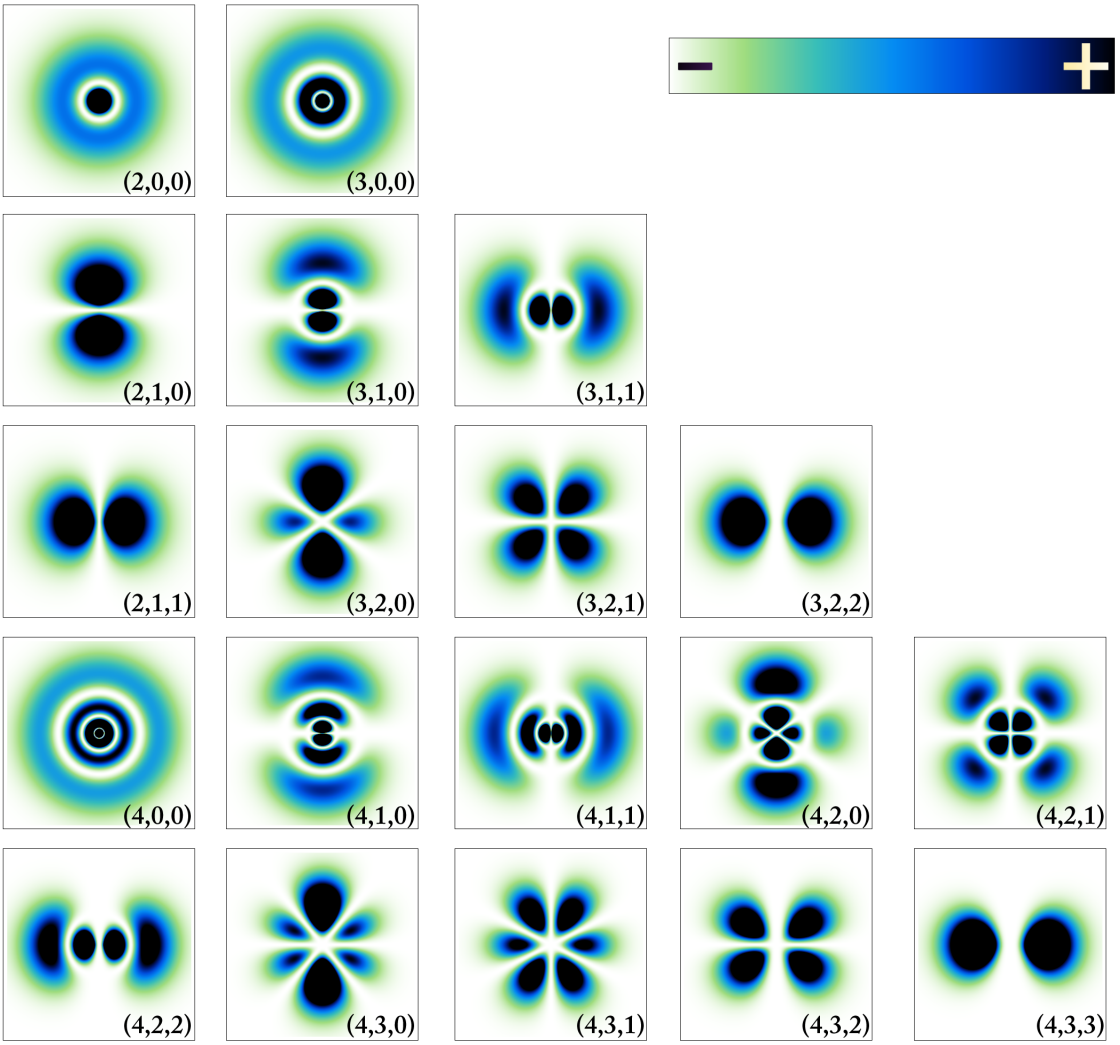
لنعاير الآن الدالة القطرية

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty |R_{31}(r)|^2 r^2 dr = \frac{4}{9} b'^2_{31} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \int_0^\infty \left[1 - \frac{1}{6}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)\right]^2 r^4 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)} dr, \\ &= \left(\frac{2}{3}\right)^2 b'^2_{31} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \int_0^\infty \left[1 - \frac{1}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) + \frac{1}{36}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] r^4 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)} dr. \end{aligned}$$

نستخدم علاقة التكامل (C.17)، هنا $\alpha = 2Z/3a_0$، لنحصل بعد إجراء التكامل على

$$\begin{aligned} 1 &= \left(\frac{2}{3}\right)^2 b'^2_{31} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \left[4! \left(\frac{3a_0}{2Z}\right)^5 - \frac{5!}{3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)\left(\frac{3a_0}{2Z}\right)^6 + \frac{6!}{36}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \left(\frac{3a_0}{2Z}\right)^7\right], \\ &= \left(\frac{2}{3}\right)^2 b'^2_{31} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \left[4! \left(\frac{3}{2}\right)^5 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 - \frac{5!}{3}\left(\frac{3}{2}\right)^6 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 + \frac{6!}{36}\left(\frac{3}{2}\right)^7 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^5\right], \\ &= \left(\frac{2}{3}\right)^2 \left(\frac{3}{2}\right)^5 b'^2_{31} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 \left[4! - \frac{5!}{3}\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{6!}{36}\left(\frac{3}{2}\right)^2\right], \\ &= b'^2_{31} \left(\frac{3a_0}{2Z}\right)^3 [24 - 60 + 45]. \end{aligned}$$

$$\therefore b'_{31} = \frac{1}{3}\left(\frac{2Z}{3a_0}\right)^{3/2} = \frac{2}{9}\left(\frac{2Z^3}{3a_0^3}\right)^{1/2}.$$



شكل (7.8): شكل كثافة التوزيعات القطرية و الزاوية للإلكترون حول النواة من الأغمق (أشد كثافة إحتمالية) إلى الأفتح (أقل إحتمالية).

تصبح المعادلة القطرية إذاً

$$R_{31}(r) = \frac{4}{27}\left(\frac{2Z^3}{3a_0^3}\right)^{1/2}\left[1-\frac{1}{6}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)\right]\left(\frac{Zr}{a_0}\right)\, e^{-\frac{1}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)}.$$

يمكن حساب القيمة المتوقعة $\langle r\rangle$ للحالة $n=3, l=1$ كالتالي

$$\begin{aligned}
\langle r\rangle_{31} &= \int_0^\infty R_{31}^*(r) r R_{31}(r)\, r^2 dr = \int_0^\infty r\,|R_{31}(r)|^2\, r^2 dr,\\
&= \frac{16}{729}\left(\frac{2Z^3}{3a_0^3}\right)\int_0^\infty r\left[1-\frac{1}{6}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)\right]^2\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)} r^2 dr,\\
&= \frac{16}{729}\left(\frac{2Z^5}{3a_0^5}\right)\int_0^\infty \left[1-\frac{1}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)+\frac{1}{36}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] r^5 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)} dr,\\
&= \frac{32}{2187}\frac{Z^5}{a_0^5}\left[\begin{array}{c}\int_0^\infty r^5 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)}dr - \frac{1}{3}\frac{Z}{a_0}\int_0^\infty r^6 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)}dr + \\ \frac{1}{36}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\int_0^\infty r^7 e^{-\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)}dr\end{array}\right],\\
&= \frac{32}{2187}\frac{Z^5}{a_0^5}\left[\begin{array}{c}5!\left(\frac{3}{2}\right)^6\left(\frac{a_0}{Z}\right)^6 - \frac{1}{3}\frac{Z}{a_0}6!\left(\frac{3}{2}\right)^7\left(\frac{a_0}{Z}\right)^7 + \\ \frac{1}{36}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 7!\left(\frac{3}{2}\right)^8\left(\frac{a_0}{Z}\right)^8\end{array}\right],\\
&= \frac{32}{2187}\frac{Z^5}{a_0^5}\left(\frac{3}{2}\right)^6\left(\frac{a_0}{Z}\right)^6\left[5! - 6!\frac{1}{2}+\frac{1}{36}7!\left(\frac{3}{2}\right)^2\right],\\
&= \frac{32}{2187}\left(\frac{3}{2}\right)^6\left(\frac{a_0}{Z}\right)[120-360+315] = \frac{75}{6}\frac{a_0}{Z} = \frac{25}{2}\frac{a_0}{Z}.
\end{aligned}$$

الدالة الموجية عند $r=\langle r\rangle$ تصبح

$$\begin{aligned}
R_{31}\left(\frac{25a_0}{2Z}\right) &= \frac{4}{27}\left(\frac{2Z^3}{3a_0^3}\right)^{1/2}\left[1-\frac{1}{6}\left(\frac{25}{2}\right)\right]\left(\frac{25}{2}\right)\, e^{-\frac{1}{3}\left(\frac{25}{2}\right)},\\
&= -\frac{325}{81}\sqrt{\frac{Z^3}{6a_0^3}}e^{-25/6}.
\end{aligned}$$

كثافة الإحتمالية إذاً تصبح

$$|R_{31}\left(r=\langle r\rangle\right)|^2 = 6.44948\times 10^{-4}\frac{Z^3}{a_0^3}$$

واضح أن وحدته هي مقلوب وحدة الحجوم لانها في ثلاث أبعاد. لو أردنا معرفة الإحتمالية أن يتواجد الإلكترون بين r و $r+dr$ عند $r=\langle r\rangle$ نكتب

$$r^2\,|R_{31}(r)|^2\Big|_{r=\langle r\rangle} = 0.100773\frac{Z}{a_0},$$

و التي لها وحدة مقلوب الطول. ♣

مثال (7.2): أوجد المسافات القطرية للإلكترون في الحالة الأرضية لذرة شبيهة الهيدروجين و التي عندها تصبح لكثافة الإحتمالية قيم عظمى، و إحسب كثافة الإحتمالية عند هذه المسافات. ما هو إحتمال تواجد الإلكترون داخل

المنطقة $(0, 2a_0)$ في الحالة الأرضية لذرة الهيدروجين؟ ♠

حل مثال (7.2): نأخذ الدالة القطرية للحالة الأرضية من الجدول (7.2) و نحسب دالة التوزيع الإحصائي القطري $r^2|R_{10}(r)|^2$ لنحصل على

$$r^2|R_{10}(r)|^2 = 4\frac{z^3}{a_0^3}r^2e^{-2rz/a_0}.$$

عند القيم العظمى، فإن المشتقة الأولى تساوي الصفر. لهذا نأخذ المشتقة الأولى و منها نحسب قيم r التي تجعلها صفر، أي

$$\frac{d}{dr}\left(r^2|R_{10}(r)|^2\right) = 8\frac{z^3}{a_0^3}re^{-2rz/a_0} - 8\frac{z^4}{a_0^4}r^2e^{-2rz/a_0} = 0,$$

بأخذ العوامل المشتركة و مساوتها بالصفر نحصل على

$$8r\left(1 - \frac{z}{a_0}r\right)\frac{z^3}{a_0^3}e^{-2rz/a_0} = 0,$$

نبسط عن طريق التخلص من المعاملات غير الصفرية، لنحصل على

$$r\left(1 - \frac{z}{a_0}r\right) = 0; \qquad \Rightarrow \qquad r = 0 \text{ and } r = a_0/Z.$$

عند $r = 0$ تمثل القيمة الصغرى، بينما القيمة العظمى لدالة التوزيع الإحصائية القطرية تحدث عند $r = a_0/Z$. هذا يتفق مع الشكل (7.7) لذرة الهيدروجين، حيث نجد أن $r^2|R_{10}(r)|^2$ لها قيمة عظمى عند $r = a_0$. إن كثافة الإحتمالية عند $r = a_0/Z$ تساوي

$$r^2|R_{10}(r)|^2\Big|_{r=a_0/Z} = 4\frac{Z}{a_0}e^{-2} = 0.541341\frac{Z}{a_0}.$$

إحتمال تواجد الإلكترون داخل المنطقة $(0, 2a_0)$ تصبح

$$\int_0^{2a_0} r^2|R_{10}(r)|^2dr = e^{-4Z}\left(-8Z^2 - 4Z + e^{4Z} - 1\right),$$

لذرة الهيدروجين $Z = 1$ فإن هذه الإحتمالية 0.761897 أي أكبر من ثلاث أرباع الإحتمالية و الباقي 0.238103 في المنطقة $(2a_0, \infty)$. ♣

مثال (7.3): أعد نفس المطلوب في المثال (7.2) لذرة الصوديوم في الحالة الأرضية؟ الهدف من هذا المثال هو لمقارنة النتائج بين ذرة الهيدروجين و ذرة شبيهة للهيدروجين. ♠

حل مثال (7.3): التشكيل الإلكتروني electronic configuration لذرة الصوديوم هو $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^1$. الإلكترونات في القشور الفرعية ممتلئة و خاملة كيميائياً إلا إلكترون الوحيد في الحالة $3s^1$ و الذي يُدْعى إلكترون التكافؤ و يعتبر الإلكترون النشط كيميائياً. لذلك فإن الحالة الطيفية لذرة الصوديوم في الحالة الأرضية تُعْطى بمجوعة الأعداد الكمية $(n, l, m_l) = (3, 0, 0)$. و عليه فإن الدالة القطرية $R_{30}(r)$. بحساب مشتقة دالة التوزيع الإحصائي القطرية نحصل على

$$\frac{d}{dr}(r^2|R_{30}(r)|^2) =$$
$$\frac{8rZ^3e^{-\frac{2rZ}{3a_0}}\left(2187a_0^5 - 5103a_0^4rZ + 3564a_0^3r^2Z^2 - 972a_0^2r^3Z^3 + 108a_0r^4Z^4 - 4r^5Z^5\right)}{59049a_0^8}.$$

واضح أول الجذور هو $r = 0.0$ و الذي يمثل المنطقة التي لايتواجد فيها الإلكترون. بقية الجذور التي تصفر المشتقة الأولى تأتي من حساب جذور المعادلة

$$2187a_0^5 - 5103a_0^4 rZ + 3564a_0^3 r^2 Z^2 - 972a_0^2 r^3 Z^3 + 108a_0 r^4 Z^4 - 4r^5 Z^5 = 0,$$

و التي لها مجموعة الجذور $(0.740037, 1.90192, 4.18593, 7.09808, 13.074)a_0/Z$. بالنظر إلى الشكل (7.7) نجد أن $(0.740037, 4.18593, 13.074)a_0/Z$ تمثل القيم العظمى لدالة التوزيع القطرية بكثافات إحتمالية $(0.0148336, 0.0386797, 0.101534)Z/a_0$، على الترتيب. في حالة $Z = 11$ فإن كثافات الإحتمالية تصبح $(0.16317, 0.425476, 1.11688)/a_0$. إحتمال تواجد الإلكترون داخل المنطقة $(0, 2a_0)$ تصبح

$$\int_0^{2a_0} r^2 |R_{30}(r)|^2 dr = \frac{e^{-4Z/3}\left\{-4Z\left[2Z\left(8(4Z(2Z-9)+81)Z^2+729\right)+2187\right]-6561\right\}}{6561} + 1,$$

للصوديوم في الحالة الأرضية فإن هذه الإحتمالية تصبح 0.960133 أو 96%. ♣

7.4.2 الإنحلال في طيف الهيدروجين The degeneracy of the spectrum

الدالة الموجية ψ_{nlm} تتميز بثلاث أعداد كمية: العدد الكمي الرئيسي n الذي يميز مستويات الطاقة، العدد الكمي الزاوي المداري l، و العدد الكمي الزاوي المغناطيسي m. الإرتباط بين n و l موضح في العلاقات (7.71) و (7.89). بينما نجد من القسم (A.2) لدوال ليجندر المزاملة في المعادلة (A.23) و في القسم (A.3) لدوال التوافق الكروي في الشرح الذي يلي المعادلة (A.43) أن لكل قيمة ممكنة من l، حيث l العدد الكمي المرتبط بالمؤثر $\hat{L}^2$ حسب المعادلة المميزة (7.30)، يوجد $2l+1$ قيمة ممكنة من m. هذه القيم الممكنة من m تشترك أيضاً بنفس العدد الكمي الرئيسي n.

لو إعتبرنا الحالة الأرضية ground state و التي تتميز بـ $n = 1$، أي أن $j_{\max} = l = 0$. هذا يعني أن الحالة الأرضية فريدة، بدالة موجية وحيدة ψ_{100}.

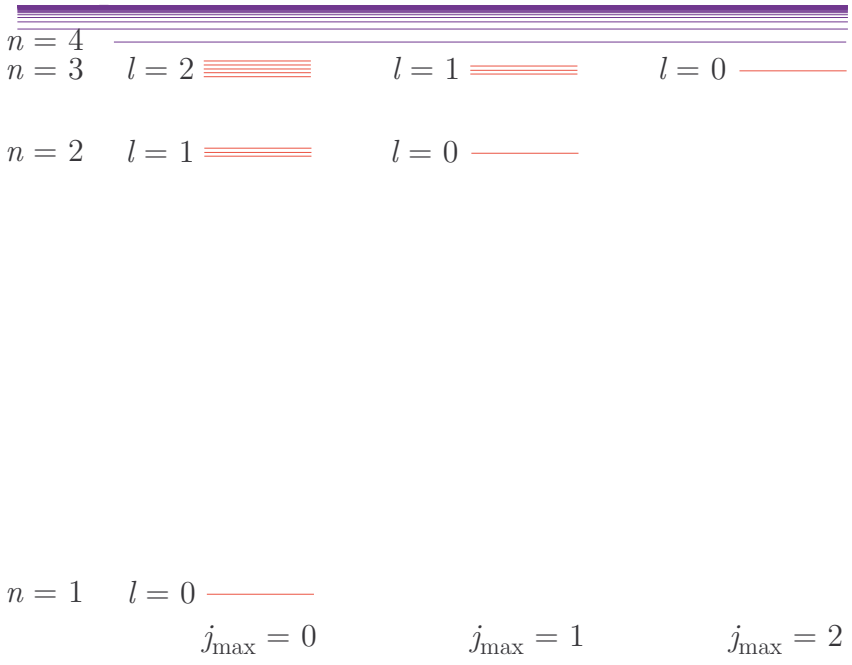
لنعتبر الآن حالة الإثارة الأولى و التي لها $n = 2$. لدينا إحتمالين: إما $j_{\max} = 1$ و $l = 0$ بقيمة ممكنة للعدد الكمي الزاوي المغناطيسي هي $m = 0$، أو $j_{\max} = 0$ و $l = 1$ بقيم ممكنة للعدد الكمي الزاوي المغناطيسي $m = -1, 0, 1$. يظهر أنه لدينا أربع دوال موجية لنفس العدد الكمي الرئيسي $n = 2$، ونعني هنا: ψ_{200}، ψ_{210}، ψ_{211}، و $\psi_{20,-1}$. هذه الدوال الموجية مختلفة و تصف حالات مستقلة تماما عن بعضها البعض. لكن لها نفس العدد الكمي الرئيسي، مما يعني أن هذه الحالات االمستقلة لها نفس الطاقة. هذه حالات إنحلال degeneracy states ناتجة عن وجود عدة حالات من العزم الزاوي المداري بمساقط مغناطيسية مختلفة و لنفس العدد الكمي الرئيسي.

بنفس الطريقة نجد لحالة الإثارة الثانية $n = 3$ قيم العدد الكمي الزاوي: $l = 0$ بقيمة واحدة لـ m، $l = 1$ بثلاث قيم ممكنة لـ m، و أخيراً $l = 2$ بخمس قيم ممكنة لـ m. مجموع الحالات إذاً $1 + 3 + 5 = 9$ حالات منحلة. شكل (7.9) يوصف طيف ذرة الهيدروجين موضحاً الحالات المنحلة الممكنة لكل قيمة للعدد الكمي الرئيسي.

بشكل عام لو أن $N_d(n)$ ترمز لعدد الحالات المنحلة للحالة الرئيسية n، فإنها ستُعطى بالعلاقة

$$N_d(n) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \tag{7.98}$$

إن الإنحلال degeneracy بشكل عام تظهر نتيجة لثوابت حركة إضافية additional constant of motion. بلغة التناظر يوجد تناظر في الهاميلتون الذي يصف النظام. كما درسنا في الباب الرابع و خصوصاً القسم (4.4)، أي كمية فيزيائية لاتعتمد على الزمن صراحة تعتبر من ثوابت الحركة إذا كان مؤثرها إبدالي مع الهاميلتون. لو ألقينا



شكل (7.9): طيف الهيدروجين مع بيان حالات الإنحلال degeneracy states المقابلة لكل قيمة رئيسية من n.

نظرة فاحصة للمؤثر الهاميلتوني (7.27) سنجد أن وجود الجهد المركزي $V(r)$ أدى إلى إنتهاك في إنحفاظ كمية الحركة الخطية. لكن لم يؤثر على العزوم الزاوية.

كلاسيكيا نحن نعلم أن وجود الجهد المركزي يعني وجود محصلة قوى مركزية على الإلكترون تغير كمية حركته. لكن إختيار نقطة إسناد reference point تقع على مركز الكتلة للذرة - و التي بدورها تقع على خط عمل القوة بين الجسمين المتفاعلين الإلكترون و البروتون- بالتالي القوة الكولومبية على الإلكترون لن تسبب أي قوة فتل torque حول نقطة الإسناد. لهذا فإن العزوم الزاوية للإلكترون من ثوابت الحركة. فإنه من المتوقع كلاسيكياً أن يكون مدار الإلكترون حول النواة على مستوى (ثنائي الأبعاد) يحوي كلا الجسمين، الإلكترون و البروتون. جبرياً، متجه العزم الزاوي $\mathbf{L}$ يجب أن يكون ثابتاً في الفضاء[1]. لكن بسبب حركة مركز الكتلة لذرة الهيدروجين، فإن العزم الزاوي سيتغير إتجاهه، لكن يبقى مقداره ثابتاً. بلغة المتجهات، متجه العزم الزاوي ليس له إتجاه محدد في الفضاء أي أن $\mathbf{L}$ غير محفوظ، لكن المقدار $|\mathbf{L}|$ محفوظ.

حسب نظرية الكم فإن مربع مؤثر العزم الزاوي المداري، $\hat{L}^2$ (و ليس $\hat{\mathbf{L}}$)، إبدالي مع المؤثر الهاميلتوني. يعني أن العزم الزاوي محفوظ في المقدار و ليس في الإتجاه. هناك توزيعات لإتجاه العزم الزاوي في الفضاء تخبرنا عنها الجزء الزاوي من الدالة الموجية، أو $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$ و التي تُعطي التوزيع الزاوي لمواقع الإلكترون حول النواة كما في الشكل (A.2). على سبيل المثال عندما $l = 0$ فإن $Y_{00}(\theta,\phi)$ ثابتة، لا تعتمد على المواقع الزاوية θ و ϕ. التوزيع الزاوي لموقع الإلكترون متجانس حول النواة. لهذا يُعبر عن شكل دالة التوزيع الزاوي من خلال الرسوم الوسيطية parametric plots بالشكل الكروي. هنا لايوجد أفضلية لإتجاه معين لمتجه العزم الزاوي في الفضاء. هذه الحالة تسمى حالة التناحي (أو تجانس الإتجاهات) isotrpic. لاحظ مثلاً عند قيم العدد الكمي الزاوي المداري $l > 0$ مواقع الإلكترون حول النواة تعتمد على θ و بالتالي هناك أفضليه زاوية للتواجد الإلكتروني في الفضاء حول النواة، كما يوضح الشكل (7.8). هذا لايمكن أن يحدث فيما لو كان إتجاه متجه العزم الزاوي المداري ثابت في الفضاء. لهذا السبب من غير الممكن أن نتنبأ بشكل محدد لمدار الإلكترون حول النواة.

[1] أنظر إلى المرجع [2] صفحة 91-90.

السؤال المناسب الآن: لماذا لا نستطيع تحديد شكل مدار الإلكترون الكلاسيكي حول النواة؟ أو بصيغة أخرى لماذا يتغير إتجاه العزم الزاوي المداري في الفضاء؟ الإجابة هي أن هذا النظام مجهري يتأثر بحساسية بالقياس التي نجريه عليه لتحديد المواقع الزاوية و العزم الزاوي. إن تحديد الموقع الزاوي θ (و ليس الموقع السمتي ϕ) حول النواة يسبب إضطراب في متجه العزم الزاوي، و العكس صحيح. هذا يشبه إلى حد ما مبدأ عدم اليقين في العلاقة (2.28)، لكن هنا بين الموقع الزاوي و العزم الزاوي، لنحصل على

$$\Delta L \, \Delta\theta \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{7.99}$$

حيث أن الإضطراب الحاصل في القياس- في أحسن حالاته- يغير العزم الزاوي في الإتجاه فقط. هناك أساليب قياس تؤثر أيضاً على المقدار: كالمجالات المغناطيسية الخارجية، كما هو الحال في أثر زيمان.

إن إبدالية $\hat{L}^2$ مع المؤثر الهاميلتوني لذرة الهيدروجين يعني أن القيم المميزة $l(l+1)\hbar^2$ محفوظة. ليس مربع العزم الزاوي و حسب، بل أيضاً العزم الزاوي بإتجاه محور z و الذي يرمز له بـ $\hat{L}_z$ (محور z يعتبر إتجاه المجالات الخارجية المؤثرة على النظام، كالمجال المغناطيسي الخارجي) إبدالى أيضاً مع المؤثر الهاميلتوني للنظام. هذا التناظر أدى عدم إعتماد الطاقة على قيم العزوم الزاوية، مما سبب الإنحلال. إن ثبات العزم الزاوي L_z ناتج رياضياً عن عدم إعتماد دالة التوزيع الزاوي $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$ على الزاوية السمتية ϕ. هذا يظهر جلياً في تناظر $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$ حول محور z كما يوضح الشكل (A.2).

توجد طريقتين لرفع الإنحلال عن النظام: طريقة رياضية و ذلك بتغيير نقطة الإسناد بعيداً عن مركز النواة، و طريقة عملية تتضمن كسر التناظر للعزوم الزاوية و ذلك بالتأثير بمجال إضطرابي خارجي يتفاعل مع العزوم الزاوية، مما يؤدي إلى إنقسامات طيفية للحالات المُنحَلة. الطريقة الثانية يمكن أن تنفذ بتأثير مجال مغناطيسي خارجي يتفاعل مع عزم ثنائي القطبية المغناطيسية magnetic dipolemoment μ_L حسب العلاقة (1.47). هنا μ_L نفسه يعتمد على $\hat{\mathbf{L}}$ و بالتالي تختل العلاقة الإبدالية بين العزم الزاوي و الهاميلتون. هذه الطريقة تُعرف بأثر زيمان و سيتم دراستها بالتفصيل لاحقاً.

الطريقة الرياضية لرفع الإنحلال تتم ببساطة بإعادة تعريف الجهد (7.56) ليصبح

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{g^2}{r^2}, \tag{7.100}$$

مما يؤدي إلى تغيير الحد النابذ في المعادلة القطرية (7.58)، دون المساس بالجهد، حيث نستبدل $l(l+1)/r^2$ بـ $l'(l'+1)/r^2$ حيث أن

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}.$$

هذا سيجعل العدد الكمي الرئيسي في التعريف (7.71) يتحول إلى

$$n = j_{\max} + l' + 1 = j_{\max} + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2},$$

و بالتالي علاقة الطاقة (7.72) تتحول إلى

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{Z^2\alpha^2}{\left[j_{\max} + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}\right]^2}.$$

علاقة الطاقة هنا تعتمد على العزم الزاوي مما يؤدي إلى رفع الإنحلال للحالات التي لها قيم l مختلفة. لكن لا تزال هناك إنحلالات جزئية موجودة بسبب عدم إعتماد الطاقة على العدد الكمي الزاوي المغناطيسي m.

7.5 جسيم في جهد كروي لانهائي Particle in an infinite spherical well

لنعتبر جسيم كتلته m محصور داحل جهد البئر الكروي لانهائي نصف قطره a. دالة الجهد تعرف رياضياً بـ

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a, \\ \infty & r > a. \end{cases} \tag{7.101}$$

إن الدالة الموجية للجسيم تساوي صفر عندما $r > a$، و عليه فإننا نتعامل فقط مع الحالة $r < a$. هذه حالة يكون فيها دالة الجهد معرفة على ثلاث أبعاد و بالتالي هي أعم من الحالة في بعد واحد كما في القسم (4.1). بإستخدام المعادلة القطرية (7.31) مع أخذ تعويض $\hat{p}_r^2$ من الصيغة (7.18)، نحصل على المعادلة القطرية

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r) + \frac{2mEr^2}{\hbar^2}R(r) - l(l+1)R(r) = 0. \tag{7.102}$$

نعرف العدد الموجي

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \tag{7.103}$$

نكتب إذاً المعادلة القطرية للجسيم المحصور داخل الجهد

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

هذه ليست سوى المعادلة التفاضلية لدوال بسل الكروية (A.90)، و بالتالي فإن حل المعادلة القطرية ليس سوى الجمع الخطي لدوال بسل الكروية و دوال نويمان الكروية، أي أن

$$R(r) = Aj_l(kr) + Bn_l(kr). \tag{7.104}$$

كما هو مذكور في القسم (A.5) فإن دوال نويمان الكروية غير متناهية عند المركز $r = 0$، كما يظهر لنا الشكل (A.7). و عليه فإنه على الثابت $B = 0$. عندئذٍ يُختزل الحل (7.104) إلى

$$R(r) = Aj_l(kr). \tag{7.105}$$

إن القيم المميزة للحل تحدد من الشروط الحدية للدالة الموجية، ألا و هو إختفاء الدالة الموجية عند $r = a$. بناء عليه فإن

$$j_l(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = \alpha_{ln}; \quad n = 1, 2, \cdots, \tag{7.106}$$

حيث α_{ln} يمثل الصفر (الجذر) رقم n لدالة بسل الكروية من الرتبة l و المعطاة في الجدول (A.4). بإستخدام التعريف (7.103) مع الشرط (7.106) نحصل على قيم الطاقة المميزة

$$E_{ln} = \frac{\alpha_{ln}^2\hbar^2}{2ma^2}. \tag{7.107}$$

حيث أن العدد الكمي الزاوي المداري $l = 0, 1, 2, \cdots$ و العدد الكمي $n = 1, 2, 3, \cdots$. لايوجد أي قيود أخرى تربط الأعداد الكمية بعضها ببعض. كذلك بسبب التميز التقريبي approximate uninqness لقيم الجذور α_{ln} فإنه لا توجد إنحلالات degeneracies عند قيم مختلفة لـ l. لكن نجد أن إزدياد قيم n لا تعني قيم أكبر للطاقة! مثلاً $E_{32} > E_{03}$. الإنحلالات degeneracies الممكنة للطاقة ستظهر لدى إعتبار المساقط المغناطيسية للعدد الكمي الزاوي المداري l. لكل مستوى طاقة E_{ln} يوجد $2l + 1$ حالة كمية ممكنة تُعْطى بمجموعة الأعداد الكمية nml حيث قيم الممكنة $m = -l, -l + 1, \cdots, l - 1, l$. على سبيل المثال المستويات التي تشترك بقيمة الطاقة E_{11} هي $(1, 1, 1)$، $(1, 0, 1)$، $(1, -1, 0)$. السبب يعود إلى أن التناظر الكروي للجهد (7.101) حول محور



شكل (7.10): مستويات الطاقة النسبية لأول 22 مستوى طاقة لجسيم محصور داخل الجهد الكروي اللانهائي.

z يجعل معادلة الهاميلتون متناظرة أيضاً حول هذا المحور و بالتالي لاتعتمد قيم الطاقة على المساقط الممكنة للزخم الزاوي المداري على هذا المحور، و التي نعتبرها المساقط المغناطيسية، على إعتبار أن إتجاه z يمثل إتجاه المجال المغناطيسي الخارجي.

الشكل (7.10) يوضح مستويات الطاقة النسبية لأول 22 مستوى طاقة لجسيم محصور داخل الجهد الكروي اللانهائي. لاحظ إنعدام الإنحلال لقيم ln لكن الإنحلال يظهر لدى إعتبار قيم العدد الكمي للمساقط المغناطيسية m.

الحل الكلي للدالة الموجية تصبح

$$\psi_{lmn}(r,\theta,\phi) = Aj_l\left(\alpha_{ln}\frac{r}{a}\right)Y_{lm}(\theta,\phi), \tag{7.108}$$

حيث $m = -l, -l+1, \cdots, l-1, 1$ يمثل العدد الكمي الزاوي المغناطيسي. الثابت A يحدد من شرط المعايرة للدالة الموجية على الفضاء. لحساب الثابت نطبق المعايرة في الإحداثيات الكروية كالتالي

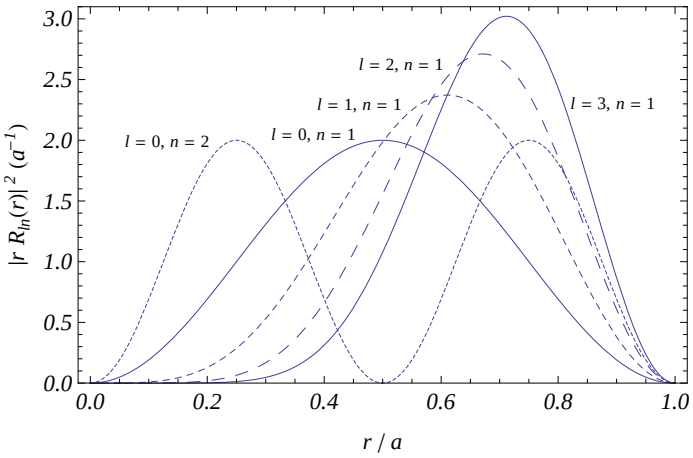
$$\begin{aligned} 1 &= \int |\psi_{lmn}(r,\theta,\phi)|^2 d^3r = \iiint |\psi_{lmn}(r,\theta,\phi)|^2 r^2 dr d\Omega, \\ &= |A|^2 \int_0^a \left|j_l\left(\alpha_{ln}\frac{r}{a}\right)\right|^2 r^2 dr \int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi} Y_{lm}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi, \end{aligned}$$

حيث التكامل على الزاوية الفراغية $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ في نظام الإحداثيات الكروية. بإستخدام علاقتي التعامد (A.45) و (A.109) نحصل على قيمة الثابت A كالتالي

$$A = \sqrt{\frac{2}{a^3}}\frac{1}{j_{l+1}(\alpha_{ln})}. \tag{7.109}$$

الدوال الموجية المميزة تصبح

$$\psi_{lmn}(r,\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2}{a^3}}\frac{1}{j_{l+1}(\alpha_{ln})}j_l\left(\alpha_{ln}\frac{r}{a}\right)Y_{lm}(\theta,\phi). \tag{7.110}$$



شكل (7.11): دالة التوزيع القطرية بوحدة a^{-1} كدالة لـ r/a للحالة الأرضية و حالات الإثارة الأربع الأولى لجسيم محصور داخل الجهد الكروي اللانهائي.

من الواضح أن هناك $2l+1$ حالة منحلة ناتجة عن القيم المختلفة و الممكنة للعدد الكمي الزاوي المغناطيسي m لنفس قيم l عند قيمة معينة للعدد الكمي n.

إن مواقع الجسيم القطرية بالنسبة لمركز الجهد، و الذي إعتبرناه نقطة الأصل، تُعْطى من دالة التوزيع القطرية $r^2|R_{ln}(r)|^2$. الشكل (7.11) يوضح دالة التوزيع القطرية بوحدة a^{-1} كدالة لـ r/a للحالة الأرضية و حالات الإثارة الأربع الأولى. القمم تعني إحتمالية أكبر للجسيم أن يتواجد عند المواقع التي تقابلها. هذه القمم تنزاح بعيداً عن المركز لدى إزدياد قيم الطاقات. لاحظ أن العدد الكمي n يعطى عدد البطون لدالة التوزيع القطرية. إن أماكن تواجد الجسيم حول نقطة لأصل تُعْطى بدالة التوزيع الزاوية $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$ و التي تُعْطى بالشكل (A.2). الدالة $r^2|\psi_{lmn}(r,\theta,\phi)|^2$ ستعطي أشكال التوزيعات القطرية و الزاوية للجسيم حول مركز الجهد.

للحالة الأرضية $n=1$، $l=0$، و $m=0$، نأخذ Y_{00} من الجدول (A.2)، و نحسب $j_0\left(\alpha_{ln}\frac{r}{a}\right)$ من العلاقة (A.99)، لنحصل على

$$\psi_{001}(r,\theta,\phi)=\sqrt{\frac{2}{a^3}}\frac{1}{j_1(\pi)}\frac{\sin\left(\pi\frac{r}{a}\right)}{\left(\pi\frac{r}{a}\right)}\frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

حيث أن $\alpha_{01}\approx\pi$. بما أن $j_1(\pi)=1/\pi$، مع التعويض و التبسيط نحصل على

$$\psi_{001}(r,\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin(\pi r/a)}{r}, \tag{7.111}$$

مقدار الطاقة المميزة (7.107) يصبح

$$E_{01}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \tag{7.112}$$

الحالة الأرضية، كما هو واضح، حالة فريدة unique state، أي لايوجد لها أي إنحلال.

سؤال (7.4): أوجد حل المعادلة القطرية (7.102) لجسيم محصور داخل الجهد (7.101) للحالة الأرضية فقط، و منها إستنتج الدالة الموجية الكلية و الطاقة للحالة الأرضية و أثبت أن النتائج تتفق مع العلاقات (7.111) و (7.112). ♢

7.6 الجسيم الحر في الإحداثيات الكروية The free particle in spherical coordinates

كما ذكرنا سابقاً في القسم (4.5)، نُعَرِّف دالة الجهد للجسيم الحر بأنها $V(r) = 0$ عند جميع نقاط الفضاء. لذلك فإن معادلته القطرية هي نفس المعادلة (7.102) لكن الفارق هو أن $\infty \geq r > 0$.

إذاً حل المعادلة القطرية بشكل عام لايزال هو نفسه المُعْطى في المعادلة (7.105)، لكن شرط المعايرة لدوال بسل سوف لن يُعْطى من العلاقة (A.109) بل ينبثق من علاقة الإنغلاق (A.78). إن مشكلة المعايرة هذه للجسيم الحر مشكلة مزمنة و واجهناها من قبل لدى الحديث عن معايرة الدوال المستوية للجسيم الحر في بعد واحد في علاقة المعايرة (4.42). المشكلة فيزيائياً أن الجسيم الحر يعيش في الفضاء كله و بكمية حركة ثابتة لكن غير محددة. هذا يولد مشكلة أيضاً في علاقة هايزنبرج لعدم اليقين.

لو أخذنا $\alpha = k$ في علاقة الإنغلاق (A.78)، حيث k تعطى من (7.103)، مع تحويل دوال بسل إلى دوال بسل الكروية عبر التعريف (A.92) فإننا نحصل على علاقة التعامد التالية لدوال بسل الكروية

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k'), \tag{7.113}$$

و التي تعني أن قيم k التي يحملها الجسيم طيفها مستمر.

في حالة أن $kr \gg 1$ يمكننا إستخدام العلاقة التقاربية لدوال بسل الكروية (A.107) لتمثيل إنتشار الجسيم في الفضاء، أي أن

$$j_l(kr) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \tag{7.114}$$

و هي عبارة عن موجات الكروية موقوفة. هذه الموجات لها عقد nodes عند قيم $kr - l\pi/2 = n\pi$ حيث أن $n = 1, 2, \ldots$. بالتالي نحصل على تعبير لأصفار دوال بسل في الحدود التقاربية عندما $kr \gg 1$ كالتالي

$$(\alpha_{ln})_{kr\gg 1} = n\pi + \frac{l\pi}{2}. \tag{7.115}$$

علاقة الأصفار (7.115) تحقق تماماً أصفار دوال بسل الكروية في الجدول (A.4) عندما $l = 0$ و عند أي قيمة لـ n، و تقريبياً عندما $l > 0$ للقيم الصغيرة لـ n، و بشكل أدق مرة اخرى عندما $l > 0$ عند القيم الكبيرة لـ n.

7.7 أسئلة و تمارين

سؤال (7.5): أعد صياغة العلاقات الإبدالية القانونية بين الموقع و كمية الحركة في ثلاث أبعاد. و منها أثبت أن $[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}$، حيث أن j و k المركبات الكارتيزية للموقع و كمية الحركة. كذلك إحسب الإبدال $[\mathbf{r}, \mathbf{p}]$. ♢

سؤال (7.6): عمم علاقات هايزنبرج لعدم اليقين إلى ثلاث أبعاد، و منها إحسب ناتج الضرب $\Delta\mathbf{r}\Delta\mathbf{p}$. ♢

سؤال (7.7): إستخدم فصل المتغيرات في الإحداثيات الكارتيزية لحل جهد البئر المكعب ضلعه a (جسيم محصور في صندوق) بحيث ان دالة الجهد

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & (x,y,z) \in [0,a], \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

إعتبر الدالة الموجية الكلية $\Psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ و الطاقات $E = E_x + E_y + E_z$. إحسب الدوال المميزة المعايرة و القيم المميزة لكل مركبة و منها إحسب الدالة الموجية المميزة للجسيم و الطاقة الكلية له. علق على الإنحلال degeneracy و وضح لماذا حصلنا على إنحلال في حالة النظام ثلاث أبعاد، بينما لم نحصل على إنحلال في بعد واحد. ♢

سؤال (7.8): إعتبر جهد الحركة التوافقية قي ثلاث أبعاد في المحاور الكارتيزية يُعْطى بالشكل

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2+y^2+z^2\right)$$

بإستخدام ما تعلمته من الحركة التوافقية البسيطة في بعد واحد، أوجد تعابير للدوال المميزة و الطاقة الكلية. ما هي طاقة الحركة الأرضية لهذا الجهد؟ هل يوجد إنحلالات degeneracies؟ و لماذا؟ عدد قيم أصغر 10 مستويات للطاقة بوحدة $\hbar\omega$ و أوجد الإنحلال المقابل لكل قيمة طاقة مميزة. ♢

سؤال (7.9): في السؤال (8) أعد صياغة المؤثرات الدرجية و علاقاتها الإبدالية بثلاث أبعاد. و عبر عن الهاميلتون بدلالتها. إحسب جميع علاقاتها الإبدالية مع بعضها و مع المؤثر الهاميلتوني. ♢

سؤال (7.10): جسيم كتلته m محصور تماماً داخل جهد إسطواني قائم (علبة) نصف قطرها R و إرتفاعها H. الجهد على أسطح الإسطوانة يساوي ∞ و داخل الإسطوانة صفر. أكتب معادلة شرودنجر للجسيم و بإستخدام الإحداثيات الإسطوانية و فصل المتغيرات مع تطبيق الشروط الحدية و المعاية أوجد جميع الحلول المعايرة. أثبت أن الطاقة المميزة تعطى بـ

$$E_{nmj} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\alpha_{mj}}{R}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{H}\right)^2\right],$$

حيث α_{mj} الصفر رقم j لدالة بسل J_m حيث m تظهر من الإعتماد السمتي azimuthal dependence. إحسب أيضاً طاقة الحالة الأرضية. ♢

سؤال (7.11): أعد بناء الجدول (7.2) بإستخدام العلاقة (7.81). ♢

سؤال (7.12): قارن بين الأطوال الموجية للإنتقال $2P \to 1S$ في (1) الهيدروجين، (2) الديوتيريوم deuterium (النواة ديوترون deuteron تتكون من بروتون و نيوترون)، (3) البوزيترينيوم positronium (حالة الإرتباط لإلكترون و بوزيترون). ♢

سؤال (7.13): إلكترون في الحالة الأرضية في التريتيوم tritium (نواتها التريتيون trition تتكون من بروتون و نيوترونين). إذا حدث للنواة تفاعل نووي حولها إلى النظير ^{3}He (بروتونين و نيوترون). إحسب إحتمال أن يبقى الإلكترون في الأرضية لـ ^{3}He. ♢

سؤال (7.14): لو عرفنا دالة الجهد المؤثرة effective potential function في العلاقة (7.31) كالتالي

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1),$$

و عرفنا الدالة القطرية $R(r) = u(r)/r$. أثبت أن المعادلة التفاضلية القطرية (7.31) تعطي نفس الصيغة الرياضية لمعادلة شرودنجر في بعد واحد. ♢

سؤال (7.15): المماثل النسبي relativistic analog لمعادلة شرودنجر لجسيم كتلته m و حركته المعزلية تساوي صفر spin 0 particle (بهذا لاتنطبق على الإلكترون) تُعْطى من علاقة الطاقة

$$(E - V)^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

و بالتالي

$$\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\frac{1}{r}\right)^2 \psi = -\nabla^2\psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2$$

أ) أوجد المعادلة القطرية.

ب) بملاحظة القرابة الكبيرة بين المعادلة القطرية في (أ) مع المعادلة القطرية لذرة الهيدروجين، إحسب طيف القيم المميزة. ♢

سؤال (7.16): إحسب مقدار $\langle 1/r\rangle_{nl}$ لذرة عشوائية شبيهة بالهيدروجين ($Z > 1$) و إستخدامها لإيجاد صيغة لـ

$$\langle K\rangle_{nl} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{nl}.$$

بين أيضاً أن $\langle K\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle$. هذه مثال خاص لنظرية المماثنة virial theorem. ♢

سؤال (7.17): إلكترون يتفاعل مع المجال الكولومي لبروتون توصف حالته بالدالة الموجية

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{6}\left[4\psi_{100}(\mathbf{r}) + 3\psi_{211}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\psi_{21-1}(\mathbf{r})\right].$$

أ- ماهي القيمة المتوقعة للطاقة؟

ب- ماهي القيمة المتوقعة $\mathbf{L^2}$ ؟

ج- ماهي القيمة المتوقعة L_z ؟ ♢

سؤال (7.18): إستخدم الطرق المشروحة من خلال الباب لمناقشة جسيم كتلته m محصور في جهد حركة توافقية كروي، يُعْطى الهاميلتون للنظام بـ

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2.$$

إستخدم الإحداثيات الكروية و فصل المتغيرات لإيجاد حلول النظام و مجموعة الدوال المميزة المعايرة و طيف القيم المميزة. لاحظ هنا ستظهر دوال لاجوير. ♢

سؤال (7.19): تأكد من أن الدالة المميزة (7.111) معايرة. ♢

سؤال (7.20): الديوترون نظير الهيدروجين يتركب من بروتون ($m_p = 938.272\,\mathrm{MeV}/c^2$) و نيوترون ($m_n = 939.565\,\mathrm{MeV}/c^2$) و يتميز بأن له حالة إرتباط واحدة و لايملك اي حالة إثارة. إن طاقة الترابط للديوترون منخفضة نسبياً (مقارنة مع الأنوية المستقرة) و قيمتها $2.224\,\mathrm{MeV}$ فقط. لو إعتبرنا أن النيوكلونين (البروتون و النيوترون) في الديوترون محصوران في جهد متناظر كروياً و هو جهد البئر المتناهي المربع، يعطى بـ

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R, \\ 0 & r > R, \end{cases}$$

حيث $R = 2.1\,\mathrm{fm}$. أكتب معادلة شرودنجر للديوترون للحالة الأرضية و أوجد حلها في الفضاء على إعتبار أن الحالة الأرضية لها $l = 0$. إحسب عمق الجهد النووي للديوترون. كذلك من شرط المعايرة إحسب قيم الثوابت الناتجة عن الحل. (إنتبه! ستحصل على معادلة متسامية transcendental equation، عليك أن تحلها لحساب عمق الجهد V_0.) ♢

8

التمثيلات المجردة لميكانيك الكم
Abstract representation of the quantum mechanics

تناولنا في الباب الثالث chapter 3 توصيف الحالات المميزة التي يشغلها الجسيم بدوال موجية تعتمد على المكان و الزمان و تحمل في كثير من الأحيان أعداداً كمية. هذه الدوال الموجية هي دوال مميزة لمؤثرات هيرميشية خطية تُعْطَى أطيافها بمجموعة من القيم المميزة. بنفس الوقت فإن مجموعة الدوال المميزة توصف بأنها أساسات basis لبناء فضاء المؤثر نفسه. بناء عليه، و من نظرية التحليل الطيفي، تعلمنا كيفية وصف الحالة الكلية الممكنة للنظام كمجموع خطي للحالات الجزئية المميزة بطريقة جبرية تشابه إلى حد كبير تمثيل أي متجه في الفضاء الإقليدي بمجموع خطي من وحدات المتجه المتعامدة $(\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}})$ و التي تعتبر اساسات الفضاء الإقليدي. من هذا المنطلق عرفنا الضرب الداخلي و التي يسقط الحالة الكلية على الحالة الجزئية بطريقة خاصة تعتمد على تكامل الدوال المركبة.

في واقع الأمر التمثيل الجبري في الباب الثالث تمثيل خاص. في المقابل يوجد تمثيلات أخرى بدلاً عن تمثيل الدوال، كتمثيل المصفوفات matrix representations و الذي عن طريقه نحصل على مرونة أكبر في التعامل مع صور أخرى من صور ميكانيكا الكم عدا صورة شرودنجر. من ضمن الصور الأخرى صورة هايزنبرج و صورة التفاعل. يوجد أيضاً تمثيلاً يوصف بأنه أكثر عمومية أو بالأحرى أكثر تجريداً more abstract representation يعتمد بشكل أساسي على الجبر الخطي في فضاء هيلبرت Hilbert space. في هذا التمثيل المجرد الحالة توصف بمتجه فضاء خطي linear vector space يتبع قواعد جبرية من جمع و ضرب تشبه إلى حد كبير القواعد الجبرية للمتجهات الإقليدية. الفرق الأساسي بين متجه الفضاء و المتجه الأقليدي أن الأول لايوجد له إتجاه حقيقي في الفضاء و مقدار يمثل الطول الهندسي! بمعنى آخر لايوجد مغزى هندسي للفضاء المتجه المجرد.

قد يكون هذا صعب الفهم في البداية لأننا هرمنا على مفهوم المتجه بأنه يتميز بمقدار و إتجاه هندسي و تشبعت فيه عقولنا. لكن أطمئن القاريء بأن التخلي عن فكرة الإتجاه و المقدار الهندسي للمتجه لن يؤدي إلى أي مصاعب، بل على العكس سنحصل على نظرية أعم و أكثر تجريداً يمكن أن نطبقها لتوصيف النظم الكمية بمرونة عالية و بنفس الوقت يمكن إسقاطها على الفضاء الإقليدي و الحصول على المتجهات الإقليدية المألوفة والتي تعلوا هاماتها الأسهم أو إسقاطها على فضاء الموقع و الزمن و الحصول على الدالة الموجية التي إعتدنا عليها من خلال الأبواب السابقة من هذا الكتاب.

8.1 الفضاءات المتجهة و أسس الجبر الخطي
Vector spaces and basic linear algebra

نعرف مجموعة الفضاء المتجه الخطي $\mathbb{V}$ بأنها مجموعة عناصرها $\{U, V, W, \dots\}$ عبارة عن كميات جبرية تسمى متجهات خطية في الفضاء المتجه $\mathbb{V}$، أو ببساطة متجهات الفضاء، بحيث تستوفي الشروط التالية:

1. لها قاعدة محددة للجمع تستوفي المسلمات axioms التالية:

- خاصية الإنغلاق closure property أي أن: $\forall V$ و U متجهي فضاء $U, V \in \mathbb{V}$ فإن الجمع يعطي متجه فضاء أي أن $U + V \in \mathbb{V}$.
- الخاصية الإبدالية commutative property أي أن: $U + V = V + U$.
- الخاصية التجميعية associative property أي أن: $U + (V + W) = (U + V) + W$.

2. لها قاعدة محددة للضرب بكميات قياسية $a, b, c, \ldots$ على الشكل aV بحيث خواص الضرب تستوفي:

- الضرب بالكميات القياسية يكون توزيعي distributive للمتجهات: $a(U + V) = aU + aV$.
- الضرب بالكميات القياسية يكون توزيعي على الكميات القياسية: $(a + b)V = aV + bV$.
- الضرب بالكميات القياسية يكون تجميعي associative للكميات القياسية: $a(bV) = abV$.

3. ضرب متجهات الفضاء تجميعي associative أي أن: $(UV)W = U(VW)$.

4. يوجد متجه صفري 0 فريد unique null vector بحيث أن: $V + 0 = 0 + V = V$.

5. لكل متجه $V \in \mathbb{V}$ يوجد متجه عكسي للجمع $-V \in \mathbb{V}$، بحيث أن: $V + (-V) = (-V) + V = 0$.

هذه هي الخواص الهامة لمتجهات الفضاء. لاحظ أن المتجهات الهندسية في الفضاء الإقليدي تستوفي الشروط أعلاه. بقي من المفاهيم الجبرية التالي: (1) المعيار أو النظيم norm، (2) الضرب الداخلي inner product، (3) الضرب الخارجي outer product.

المفاهيم أعلاه تعتمد على الفضاء المعرف عليه متجه الفضاء أصلاً. فمثلاً المعيار للمتجهات الهندسية في الفضاء الإقليدي ليس سوى الطول الهندسي له. بينما للدالة الموجية في فضاء هيلبرت ليس سوى المعايرة لكثافة الإحتمالية. لاحظ أننا تتطلبنا أن الدوال المميزة (و التي هي أساسات فضاء المؤثر) أن تكون معايرة، مماثل تماماً للشرط أن أساسات الفضاء الإقليدي هي عبارة عن متجهات وحدة.

الحال نفسه أيضاً للضرب الداخلي. في متجهات الفضاء الإقليدي الضرب الداخلي لمتجهين يعطي مسقط أحدهما على الآخر. بينما للدوال الموجية في فضاء هيلبرت الضرب الداخلي تعطي مسقط الحالة الكلية على الحالة الجزئية، و الذي يمثل سعة الحالة الجزئية. إذاً معنى المساقط هنا يتراوح ما بين الأطوال الهندسية لمركبة متجه على طول متجه آخر إلى الكمية الإحتمالية لحالة جزئية ضمن نطاق الحالة الكلية.

أما على صعيد الضرب الخارجي للمتجهات الإقليدية فإنه يعطي متجه إقليدي محوري axial vector أو ما يسمى متجه كاذب pseudovector. السبب يعود إلى أن هذا المتجه لاينعكس بالإنعكاسية و التي هي من خواص المتجهات الحقيقية. لكننا لم نتطرق إلى معنى الضرب الخارجي للدوال الموجية في فضاء هيلبرت. كما سنرى لاحقاً هذا الضرب سيعطي مؤثر.

8.2 أقواس ديراك Dirac's bra-ket notation

سوف نسوغ في هذا القسم الأساسيات الرياضية التي إقترحها و طورها ديراك P.A.M. Dirac. إن نظرية الفضاءات المتجهة الخطية كانت بالطبع معروفة للفيزيائيين و الرياضيين قبل مولد ميكانيكا الكم. لكن طريقة ديراك في إستخدام الفضاءات المتجهة لها فوائد جمة من وجهة النظر الفيزيائية.

8.2.1 فضاء الكِت Ket space

إقترح ديراك أن أي حالة فيزيائية عامة generic state معرفة بالحالة ψ أو أي حالة مميزة eigenstate معرفة بمجموعة الأعداد الكمية α، توصف تجريدياً بمتجه في الفضاء المركب، يستوفي نفس خواص الضرب و الجمع المذكورة آنفاً و أبعاده dimensionality تتحدد حسب طبيعة النظام الفيزيائي. و لإعطاء المتجه خصوصيه وصف حالات الأنظمة الفيزيائية رمز ديراك لمتجه الفضاء هذا بالقوس الحاد $\langle\ |$ و أطلق عليه إسم متجه الحالة state vector أو كِت ket. هذا الكِت يحوي جميع المعلومات المطلوبة عن الحالة الفيزيائية و إتجاهه يشير إلى الحالة الفيزيائية نفسها دون أن يحمل أي معنى هندسي كما إعتدنا في حالة المتجهات الإقليدية. لذلك نقول أن أي حالة فيزيائية عامة ψ توصف بالكِت $|\psi\rangle$ أو أي حالة فيزيائية مميزة و معرفة بمجموعة الأعداد الكمية α توصف بالكِت $|\alpha\rangle$.

يمكن أن نجمع إثنين من متجهات الكِت لنحصل على متجه كِت آخر، أي أن

$$|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\chi\rangle. \tag{8.1}$$

إذا ضربنا $|\psi\rangle$ بعدد مركب c الناتج $c|\psi\rangle$ أيضاً كِت. الثابت المركب c يمكن أن يكتب على يمين أو يسار الكِت أي أن

$$c|\psi\rangle = |\psi\rangle c. \tag{8.2}$$

في الحالة الخاصة أن $c = 0$ الكِت الناتج يسمى الكِت الصفري null ket.

أحد الفروض الفيزيائية هي أن $|\psi\rangle$ و $c|\psi\rangle$، حيث $c \neq 0$، تمثلان نفس الحالة. من خبرتنا في الهندسة الإقليدية نقول أن الإتجاه الذي يهم وليس المقدار!

المؤثر يؤثر على الكِت من اليسار أي أنه لأي مؤثر $\hat{A}$ يؤثر على الكِت $|\psi\rangle$ نكتب

$$\hat{A} \cdot (|\psi\rangle) = \hat{A}|\psi\rangle, \tag{8.3}$$

و التي تعطي أيضاً كِت آخر. بشكل عام حاصل الضرب $\hat{A}|\psi\rangle$ لا يعطي ثابت مضروب في $|\psi\rangle$. لكن هناك مجموعة متجهات كِت معينة $\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^{N}$ خاصة للمؤثر $\hat{Q}$ تستوفي علاقة الضرب التالي

$$\hat{Q}|\alpha_j\rangle = q_j|\alpha_j\rangle, \tag{8.4}$$

حيث q_j ثابت. هنا $j = 1, 2, 3, \cdots, N$ حيث N تمثل أبعاد المؤثر $\hat{Q}$. يطلق على هذه المجموعة من متجهات كِت إسم متجهات كِت المميزة eigenkets للمؤثر $\hat{Q}$ و مجموعة الثوابت الناتجة $\{q_j\}_{j=1}^{N}$ تسمى القيم المميزة eigenvalues أو طيف المؤثر $\hat{Q}$. الحالة الفيزيائية الذي يصفها متجه الكِت المميز يسمى الحالة المميزة eigenstate. نقول أن أي كمية فيزيائية رَصودة أو مُلاحظة observable تمثل بمؤثر خطي و هيرميشي $\hat{Q}$ له مجموعة كِت مميزة تحقق العلاقة المميزة (8.4). إذاً سيكون إصطلاحنا أيضاً أن $\hat{A}$ يمثل أي مؤثر عشوائي arbitrary operator بينما المؤثر $\hat{Q}$ تمثل الكميات الفيزيائية الرصودة observable quantities.

إن مجموعة متجهات كِت المميزة $\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^{N}$ تكون مستقلة خطياً، متعامدة، و كاملة. الإستقلال الخطي يعني أنه إذا كان $\sum_j c_j|\alpha_j\rangle = 0$ إذا و إذا فقط كانت $c_j = 0$ لجميع القيم الممكنة للمؤشر $j = 1, 2, \cdots, N$. و بالتالي فإن أي متجه كِت عشوائي $|\varphi\rangle$ يمكن أن يكتب بمعلومية المجموعة الكاملة من متجهات كِت، أي أن

$$|\varphi\rangle = \sum_j b_j|\alpha_j\rangle. \tag{8.5}$$

مجموعة المعاملات $\{b_j\}$ تتحدد من علاقات التعامد و التي نحتاج أولاً لتعريف الضرب الداخلي لتحديدها و منها أيضاً نحصل على علاقات التمام. لكن قبلاً نحتاج للتعرف على الفضاء المرافق لفضاء الكِت، و الذي يسمى فضاء البرا bra space. بقس أن نقول أن فضاء الكِت يُبنى spanned بمجموعة متجهات كِت المميزة $\{|\alpha_j\rangle\}$ لهذا نطلق على متجهات كِت المميزة إسم أساسات basis فضاء الكِت.

8.2.2 فضاء البرا و الضرب الداخلي Bra space and inner products

فضاء البرا يحوي على متجهات الفضاء المرافقة لمتجهات الكِت. نفترض أنه لأي متجه كِت $|\psi\rangle$ يوجد له مرافق يسمى متجه برا، يرمز له بالرمز $\langle\psi|$، و ينتمي للفضاء المرافق و هو فضاء البرا. كما هو الحال في فضاء الكِت، فإن فضاء البرا يُبْنى بمجوعة كاملة من متجهات برا المميزة eignebra $\{\langle\alpha_j|\}$. من الواضح أنه يوجد تقابل واحد-إلى-واحد one-to-one correspondence بين فضائي الكِت و البرا.

إن مرافق متجه الكِت $c|\psi\rangle$ هو متجه البرا $c^*\langle\psi|$. على سبيل المثال في حالة الجمع

$$c_1|\psi\rangle + c_2|\varphi\rangle \;\longleftrightarrow\; c_1^*\langle\psi| + c_2^*\langle\varphi|. \tag{8.6}$$
$$\underset{\text{ket space}}{} \qquad\qquad \underset{\text{bra spce}}{}$$

نعرف الآن الضرب الداخلي و الذي يكون دائماً بين متجهي برا و كِت. يكتب هذا الضرب رياضياً كمتجه برا على يسار متجه كِت، أي أن

$$(\langle\varphi|)\cdot(|\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle. \tag{8.7}$$

هذا الضرب بشكل عام يعطي رقم مركب complex number. سنسلم الآن أن هناك خاصيتين هامتين للضرب الداخلي:

أولاً: النواتج $\langle\psi|\varphi\rangle$ و $\langle\psi|\varphi\rangle$ مرافقان مركبين complex conjugates لبعضهما البعض. أي أن

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*. \tag{8.8}$$

هذا يعني أن الضرب الداخلي ليس إبدالي commutative إلا إذا كان الناتج $\langle\varphi|\psi\rangle$ حقيقياً. بالرغم من تشابه فكرة الضرب الداخلي (8.7) مع الضرب الداخلي للمتجهات الإقليدية، إلا إن إبدالية الضرب الداخلي للمتجهات الإقليدية $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \mathbf{b}\cdot\mathbf{a}$ ناتجة عن حقيقة أن الفضاء الإقليدي حقيقي و ليس مركباً كما هو الحال في فضاء البرا و الكِت.

ثانياً: لو أستبدلنا في (8.8) $|\psi\rangle \to \langle\varphi|$ فإننا نستنتج على الفور أن $\langle\psi|\psi\rangle$ رقم حقيقي. لذلك نفرض المسلمة التالية

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \tag{8.9}$$

حيث أن إشارة المساواة تحدث فقط إذا كان $|\psi\rangle$ متجه كِت صفري null kett. هذا يُعْرف بالمترية الموجبة المحددة positive definite metric. هذه المسلمة رئيسية من أجل التفسيرات الإحصائية للأنظمة الفيزيائية.

نقول أن متجهي الكِت $|\psi\rangle$ و $|\varphi\rangle$ متعامدين orthogonal إذا تحقق

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle = 0. \tag{8.10}$$

إن إبدالية الضرب الداخلي لمتجهات كِت المتعامدة يعود إلى المسلمة (8.8) و أن ناتج الضرب –الذي هو الصفر- حقيقي.

لأي متجه كِت $|\psi\rangle$ غير صفري، يمكن أن نحصل على متجه كِت معاير norlamized ket $|\tilde{\psi}\rangle$ بحيث نكتب

$$|\tilde{\psi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}|\psi\rangle, \tag{8.11}$$

و الذي له الخاصية

$$\langle\tilde{\psi}|\tilde{\psi}\rangle = 1. \tag{8.12}$$

عموماً فإن المقدار $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ يُعرف بأنه المعيار norm لـ $|\psi\rangle$ و الذي يقابله مقدار (طول) المتجه في الفضاء الإقليدي $|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}}$. الفرق أن المعيار لمتجه كِت ليس له المعنى الهندسي الذي يحمله المعيار للمتجه الإقليدي. بسبب أن $|\psi\rangle$ و $c|\psi\rangle$ يمثلان نفس الحالة الفيزيائية، سوف نتطلب إذاً أن المتجه كِت الذي يمثل الحالات الفيزيائية أن يكون معايراً و يحقق الشرط (8.12).

مثال (8.1): لديك متجهين في فضاء الكِت $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ يُعْطيان بـ

$$|\varphi_1\rangle = i|1\rangle + 2|2\rangle - i|3\rangle; \quad \text{and} \quad |\varphi_2\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle.$$

حيث $|1\rangle$، $|2\rangle$، و $|3\rangle$ أساسات أي أنها متعامدة و مستقلة و معايرة و هي كاملة في فضاء الثلاث أبعاد.

أ- أوجد متجهات البرا $\langle\varphi_1|$ و $\langle\varphi_2|$.

ب- عاير متجهي الفضاء $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ و إحسب $|\tilde{\varphi}_1\rangle$ و $|\tilde{\varphi}_2\rangle$.

ج- إحسب الضرب الداخلي $\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle$ و $\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle$ و أثبت أن $\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = (\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle)^*$.

الأساسات المستخدمة هنا لا تختلف عن أساسات الفضاء الإقليدي. ♠

حل مثال (8.1): سنحل المثال حسب الفقرات كالتالي

أ- من المعروف أن البرا المرافق المقابل للكِت. إذاً حسب العلاقة (8.6) فإن البرا يصبح

$$\langle\varphi_1| = -i\langle 1| + 2\langle 2| + i\langle 3|; \quad \text{and} \quad \langle\varphi_2| = -i\langle 1| + 2\langle 3|.$$

ب- لمعايرة متجهات الفضاء حسب العلاقة (8.12)، يلزمنا أولاً حساب $\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle$ و $\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle$. لنحصل على

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle &= (-i\langle 1| + 2\langle 2| + i\langle 3|)\cdot(i|1\rangle + 2|2\rangle - i|3\rangle)\,, \\
&= (-i)(i)\underbrace{\langle 1|1\rangle}_{=1} + (-i)(2)\underbrace{\langle 1|2\rangle}_{=0} + (-i)(-i)\underbrace{\langle 1|3\rangle}_{=0} + \\
&\quad (2)(i)\underbrace{\langle 2|1\rangle}_{=0} + (2)(2)\underbrace{\langle 2|2\rangle}_{=1} + (2)(-i)\underbrace{\langle 2|3\rangle}_{=0} + \\
&\quad (i)(i)\underbrace{\langle 3|1\rangle}_{=0} + (i)(2)\underbrace{\langle 3|2\rangle}_{=0} + (i)(-i)\underbrace{\langle 3|3\rangle}_{=1}, \\
&= 1 + 4 + 1 = 6.
\end{aligned}$$

و بالتالي نكتب

$$|\tilde{\varphi}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\varphi_1\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}|1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|2\rangle - \frac{i}{\sqrt{6}}|3\rangle.$$

بنفس الطريقة فإن

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle &= (-i\langle 1| + 2\langle 3|)\cdot(i|1\rangle + 2|3\rangle)\,, \\
&= (-i)(i)\langle 1|1\rangle + (2)(2)\langle 3|3\rangle + 0 + 0, \\
&= 1 + 4 = 5
\end{aligned}$$

لنحصل على

$$|\tilde{\varphi}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|\varphi_2\rangle = \frac{i}{\sqrt{5}}|1\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|3\rangle.$$

ج- نحسب الضرب الداخلي

$$\begin{aligned}\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle &= (-i\langle 1| + 2\langle 3|) \cdot (i|1\rangle + 2|2\rangle - i|3\rangle)\,,\\ &= (-i)(i)\langle 1|1\rangle + (-i)(2)\langle 1|2\rangle + (-i)(-i)\langle 1|3\rangle +\\ &\quad (2)(i)\langle 3|1\rangle + (2)(2)\langle 3|2\rangle + (2)(-i)\langle 3|3\rangle,\\ &= 1 - 2i.\end{aligned}$$

و الضرب الداخلي

$$\begin{aligned}\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle &= (-i\langle 1| + 2\langle 2| + i\langle 3|) \cdot (i|1\rangle + 2|3\rangle)\,,\\ &= (-i)(i)\langle 1|1\rangle + (-i)(2)\langle 1|3\rangle +\\ &\quad (2)(i)\langle 2|1\rangle + (2)(2)\langle 2|3\rangle +\\ &\quad (i)(i)\langle 3|1\rangle + (i)(2)\langle 3|3\rangle,\\ &= 1 + 2i.\end{aligned}$$

من نتيجة الضربين نجد أن

$$\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = 1 - 2i = (1 + 2i)^* = (\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle)^*\,,$$

لاحظ أن النتيجة في الفقرة (ج) تحقق العلاقة (8.8). ♣

8.2.3 المؤثرات و الضرب الخارجي Operators and outer products

كما ذكرنا سابقاً أن الكميات الفيزيائية الرصودة observables يُعبر عنها بمؤثرات هيرميشية و خطية[1] تؤثر على متجه الكِت. لأي مؤثر $\hat{A}$ يؤثر على متجه الكِت $|\psi\rangle$ من جهة اليسار، أي أن

$$\hat{A} \cdot (|\psi\rangle) = \hat{A}|\psi\rangle, \tag{8.13}$$

و ناتج هذا الضرب يُعْطي أيضاً متجه كِت. إن نسخ متجه كِت إلى متجه كِت آخر بفعل مؤثرٍ ما، ما هو إلا تحويل خطي و الذي هو من صميم الجبر الخطي. نقول أن المؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ متساويين إذا

$$\hat{A} = \hat{B}, \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A}|\varphi\rangle = \hat{B}|\varphi\rangle, \tag{8.14}$$

حيث $|\varphi\rangle$ أي متجه كِت عشوائي. نقول أن المؤثر $\hat{A}$ صفري null operator إذا تحقق

$$\hat{A}|\varphi\rangle = 0, \tag{8.15}$$

لأي متجه كِت عشوائي $|\varphi\rangle$.

جمع المؤثرات له خاصيتين هامتين:

1. إبدالي commutative أي أن

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}. \tag{8.16}$$

[1] جميع المؤثرات الفيزيائية خطية بإستثناء مؤثر يسمى إنعكاس الزمن time reversal و الذي يعتبر مؤثراً مضاداً للخطية anti-linear operator.

2. تجميعي associative أي أن

$$\hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C}. \tag{8.17}$$

كذلك نتطلب أن تكون المؤثرات خطية مثلما إشترطنا في العلاقة (3.51)، فإننا نكتب شرط الخطية ليصبح

$$\hat{A}\left(c_1|\psi\rangle + c_2|\varphi\rangle\right) = c_1\hat{A}|\psi\rangle + c_2\hat{A}|\varphi\rangle, \tag{8.18}$$

حيث أن c_1 و c_2 ثوابت مركبة عشوائية.

في فضاء البرا، فإن المؤثر يؤثر على متجه البرا من الجهة اليمنى، أي

$$(\langle\psi|) \cdot \hat{A} = \langle\psi|\hat{A}, \tag{8.19}$$

و ناتج هذا الضرب يُعْطي أيضاً متجه برا. نقول أنه لكل متجه كِت $\hat{A}|\psi\rangle$ متجه برا مرافق له يُعطى بـ $\langle\psi|\hat{A}^\dagger$، لذلك نلخص

$$\underset{\text{ket space}}{\hat{A}|\psi\rangle} \longleftrightarrow \underset{\text{bra spce}}{\langle\psi|\hat{A}^\dagger}. \tag{8.20}$$

نقول عن المؤثر $\hat{A}$ بأنه هيرميشي التجاور Hermitian adjoint أو ذاتي التجاور self-adjoint (أو فقط متجاور) إذا تحقق

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \tag{8.21}$$

سوف نثبت لاحقاً كيف يتفق الشرط (8.21) مع الشرط (3.49). إذا كان $\hat{A}$ هيرميشي فإن متجه الكِت $\hat{A}|\psi\rangle$ يقابله متجه البرا $\langle\psi|\hat{A}$.

نقول عن $\hat{U}$ بأنه مؤثر واحدي unitary operator إذا حقق العلاقة التالية

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}; \quad \Leftrightarrow \quad \hat{U}^\dagger\hat{U} = 1. \tag{8.22}$$

من أهم خصائص المؤثرات الواحدية أنها تحفظ الضرب الداخلي. فإذا وجد متجهات كِت $|\psi\rangle$ و $|\varphi\rangle$ تحت تأثير التحويل الخطي الواحدي unitary transformation التالي

$$U : \mathbb{H} \to \mathbb{H}' \quad |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle; \quad \text{and} \qquad |\varphi'\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle, \tag{8.23}$$

فإن الضرب الداخلي في الفضاء $\mathbb{H}'$ يُعْطى بـ

$$\langle\varphi'|\psi'\rangle = \left(\langle\varphi|\hat{U}^\dagger\right) \cdot \left(\hat{U}|\psi\rangle\right) = \langle\varphi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle, \tag{8.24}$$

و هو نفسه الضرب الداخلي في الفضاء $\mathbb{H}$. أي أن الضرب الداخلي محفوظ تحت التحويلات الواحدية.

هناك العديد من الطرق للتعبير عن المؤثر الواحدي $\hat{U}$ بمعلومية مؤثر هيرميشي. من أكثر هذه الطرق شيوعاً هو

$$\hat{U} = e^{i\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hat{A})^n}{n!}, \tag{8.25}$$

حيث $\hat{A}$ متجاور أو هيرميشي Hermitian، بحيث أن $\hat{U}^\dagger = e^{-i\hat{A}}$ كي يتحقق $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$. إن المفوك للأس مفيد في التقريبات الحسابية، أو للتناظرات المستمرة مثل حفظ الطاقة، حفظ الزخم، أو حفظ الزخم الزاوي. أيضاً من الصيغ المفيدة للمؤثر الواحدي $\hat{U}$ كتابته على الشكل

$$\hat{U} = \frac{1 + i\hat{B}}{1 - i\hat{B}}, \tag{8.26}$$

حيث $\hat{B}$ هيرميشية.

من العمليات الجبرية الهامة للمؤثرات الضرب. كما ذكرنا في القسم (3.6) فإن ضرب المتجهات بشكل عام غير إبدالي، مما يعني أن

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}, \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0. \tag{8.27}$$

لكن ضرب المؤثرات له الخاصيتين التجميعيتين التاليتين

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}, \tag{8.28}$$

و

$$\hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = (\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \quad \leftrightarrow \quad (\langle\psi|\hat{B}^\dagger)\hat{A}^\dagger = \langle\psi|(\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger) = \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \tag{8.29}$$

من الخاصية التجميعية في (8.29) فإن قرائة متجه الكت $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$ يعني أن المؤثر $\hat{B}$ يؤثر أولاً على الكت $|\psi\rangle$ ثم يليه المؤثر $\hat{A}$ الذي يؤثر على الكت $\hat{B}|\psi\rangle$. في المقابل، فإن المرافق $^*((\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle)$ سيعطي متجه البرا $\langle\psi|(\hat{A}\hat{B})^\dagger$. المفروض أن يبقى ترتيب التأثير دون أي تغيير. أي أن المؤثر $\hat{B}^\dagger$ يجب أن يؤثر على البرا $\langle\psi|$ أولاً، يليه المؤثر $\hat{A}^\dagger$ و الذي يؤثر على البرا $\langle\psi|\hat{B}^\dagger$. و بالتالي نستنتج أن

$$(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle\psi|(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger.$$

و بالتالي فإنه لدى توزيع التجاور على مؤثرين مضروبين نتبع التالي

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger, \tag{8.30}$$

لأن هذا يعود إلى طبيعة التقابل بين فضائي الكِت و البرا

$$\underset{\text{ket space}}{\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}\left(\hat{B}|\psi\rangle\right)} \longleftrightarrow \underset{\text{bra spce}}{\left(\langle\psi|\hat{B}^\dagger\right)\hat{A}^\dagger = \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger}.$$

سيكون البرهان الجبري لـ (8.30) أوضح لو إعتبرنا أن $\hat{B}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ في $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$ و أخذنا المرافق.

لحد الآن تعرضنا إلى عدة أنواع من الضرب: الضرب الداخلي $\langle\varphi|\psi\rangle$ في (8.7)، و الضرب بمؤثر على كِت $\hat{A}|\psi\rangle$ في (8.13)، و الضرب بمؤثر على برا $\langle\psi|\hat{A}$ في (8.19). بقي نوع آخر من الضرب يسمى بالضرب الخارجي و الذي ينتج عى ضرب (من اليسار إلى اليمين) كِت في برا، أي

$$(|\varphi\rangle) \cdot (\langle\psi|) = |\varphi\rangle\langle\psi|, \tag{8.31}$$

و الناتج عن هذا الضرب مؤثر، لهذا فهو مختلف تماماً عى الضرب الداخلي (8.7). لمعرفة كيف يؤثر مؤثر الضرب الخارجي (8.31) على متجهات الفضاء فإنا نستخدم مسلمة التجميع associative axiom رقم (3) في القسم (8.1)، لنجد أن تأثير الضرب الخارجي (8.31) على أي متجه كِت $|\chi\rangle$ يصبح

$$(|\varphi\rangle\langle\psi|) \cdot |\chi\rangle = |\varphi\rangle \cdot (\langle\psi|\chi\rangle) = (\langle\psi|\chi\rangle)|\varphi\rangle = c_{\psi\chi}|\varphi\rangle, \tag{8.32}$$

حيث $c_{\psi\chi} = \langle\psi|\chi\rangle$ ثابت مركب. هذا يعني أن المؤثر الناتج عن الضرب الخارجي (8.31) يُغَير أي متجه كِت إلى متجه الكِت $\langle\varphi|$. إن نسخ متجه فضاء إلى متجه فضاء آخر يتم بالدوران rotation لأننا إتفقنا أن متجهات الفضاء هي نفسها طالما لها نفس الإتجاه. لهذا فإن مؤثر الضرب الخارجي (8.31) هو مؤثر دوران. بنفس الطريقة مؤثر الضرب الخارجي (8.31) ينسخ أي متجه برا $\langle\chi|$ إلى متجه برا آخر $\langle\psi|$ كما يلي

$$\langle\chi| \cdot (|\varphi\rangle\langle\psi|) = (\langle\chi|\varphi\rangle) \cdot \langle\psi|. \tag{8.33}$$

نعرف إذاً مؤثر الدوران $\hat{\Lambda}_{\varphi\psi}$ كالتالي

$$\hat{\Lambda}_{\varphi\psi} \equiv |\varphi\rangle\langle\psi|, \tag{8.34}$$

و بالتالي فإن

$$\hat{\Lambda}^{\dagger}_{\varphi\psi} = (|\varphi\rangle\langle\psi|)^{\dagger} = (\langle\psi|)^{*}(|\varphi\rangle)^{*} = |\psi\rangle\langle\varphi| = \hat{\Lambda}_{\psi\varphi}. \tag{8.35}$$

الجدول (8.1) يحصر جميع أنواع الضرب القانونية للمتجهات في الفضاء المتجهة بنوعيها الكِت و البرا بالإضافة إلى المؤثرات. من أنواع الضرب غير القانونية، على سبيل المثال، مؤثر على يمين كِت $|\psi\rangle\hat{A}$ أو يسار برا $\hat{A}\langle\psi|$ حيث أن الناتج ليس بمتجه كِت أو متجه برا و لا حتى مؤثر. ببساطة ليس له أي معنى. كذلك الضرب على الشكل $|\psi\rangle|\varphi\rangle$ أو $\langle\psi|\langle\varphi|$ لايعطي متجه فضاء[2] قانوني.

جدول (8.1): أنواع الضرب القانوني للمؤثرات و للمتجهات في فضاءات الكِت ket و البرا bra مع تبيان معانيهم.

مسمى الضرب	الصيغة الرياضية	آلية العمل و المعنى الرياضي	ناتج الضرب	النظير في الفضاء المقابل
الضرب بعدد ثابت	$c\|\psi\rangle$ $c\langle\psi\|$	$c\|\psi\rangle = \|\psi\rangle c$ $c\langle\psi\| = \langle\psi\|c$	متجه كِت متجه برا	$c^*\langle\psi\|$ $c^*\|\psi\rangle$
الضرب الداخلي لمتجهي فضاء	$\langle\varphi\|\psi\rangle$	كمية الحالة ψ المحتواة في الحالة φ	رقم مركب	$\langle\psi\|\varphi\rangle = (\langle\varphi\|\psi\rangle)^*$
مؤثر على متجه كِت	$\hat{A}\|\psi\rangle$	يؤثر من اليسار إلى اليمين و ينسخ الكِت إلى كِت آخر	متجه كت	$\langle\psi\|\hat{A}^{\dagger}$
مؤثر على متجه برا	$\langle\psi\|\hat{A}$	يؤثر من اليمين إلى اليسار و ينسخ البرا إلى برا آخر	متجه برا	$\hat{A}^{\dagger}\|\psi\rangle$
ضرب المؤثرات	$\hat{A}\hat{B}$	قياس A بعد قياس B للكت قياس B بعد قياس A للبرا	مؤثر	$\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$
الضرب الخارجي لمتجهي فضاء	$\|\varphi\rangle\langle\psi\|$	يسبب دوران أي كِت إلى $\|\varphi\rangle$ و يسبب دوران أي برا إلى $\langle\psi\|$	مؤثر	$\|\psi\rangle\langle\varphi\| = (\|\varphi\rangle\langle\psi\|)^{\dagger}$

أيضاً من تطبيقات الخاصية التجميعية لضرب المؤثر في متجه فضاء، فإننا نلاحظ أن

$$(\underset{\text{bra}}{\langle\varphi|}) \cdot \Big(\hat{A}\underset{\text{ket}}{|\psi\rangle}\Big) = \Big(\underset{\text{bra}}{\langle\varphi|}\hat{A}\Big) \cdot (\underset{\text{ket}}{|\psi\rangle}) = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle. \tag{8.36}$$

[2] هناك ضرب على الشكل $|\varphi\rangle|\psi\rangle$ و يُكتب بشكل رسمي $|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle$ و يُمثل التفاعل بين متجهي كت من فضائين مختلفين. على سبيل المثال تفاعل العزم الزاوي المداري مع العزم الزاوي المعزلي ليعطي العزم الزاوي الكلي لجسيم ما حسب الجمع $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ يكتب متجه كِت له بالشكل $|j, m_j\rangle = |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$. كذلك الجمع للعزوم الزاوية المعزلية لجسيمين حسب الجمع المتجه $\mathbf{S} = \mathbf{S_1} + \mathbf{S_2}$ لنحصل على محصلة العزم الزاوي المعزلي، نكتب متجه كِت له على الشكل $|s, m_s\rangle = |s_1, m_{s_1}\rangle \otimes |s_2, m_{s_2}\rangle$.

بما أن $\langle\psi|\hat{A}^\dagger$ هو برا المصاحب لـ $\hat{A}|\psi\rangle$ فإن

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle &= \langle\varphi|\cdot\left(\hat{A}|\psi\rangle\right),\\ &= \left\{\left(\langle\psi|\hat{A}^\dagger\right)\cdot|\varphi\rangle\right\}^*,\\ &= \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle^*,\end{aligned} \tag{8.37}$$

حيث إستخدمنا خاصية التجميع و الخاصية الأساسية للضرب الداخلي المُعْطى في العلاقة (8.8). إذا كان المؤثر $\hat{A}$ هيرميشي أي يحقق (8.21) فإننا نحصل على

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle^*. \tag{8.38}$$

عندما $\psi = \varphi$، أي نفس الحالة، فإن الضرب الداخلي (8.38) حقيقي. أي مؤثر $\hat{A}$ يمكن أن يتحلل إلى مركباته الهيرميشية $\hat{A}_1$ و العكس هيرميشية anti-Hermitian $\hat{A}_2$ حسب العلاقة التالية

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{2}(\hat{A}+\hat{A}^\dagger), \quad \text{and} \quad \hat{A}_2 = \frac{1}{2}(\hat{A}-\hat{A}^\dagger). \tag{8.39}$$

لاحظ من خصائص المؤثرات عكس الهيرميشية هو أن $\hat{A}_2^\dagger = -\hat{A}_2$.

8.3 أساسات الفضاءات المتجهة و علاقات التمام
Base vector spaces and completeness relations

لنفترض كمية فيزيائية رصودة observable Q يُعبر عنها بمؤثر $\hat{Q}$ هيرميشي يحقق الشرط (8.21) و خطي يحقق الشرط (8.18) و له فضاء بأبعاد تعتمد على ماهية النظام الذي يمثله. إن فرض شرط الخطية هو لتحقيق مبدأ اساسي ألا وهو مبدأ التراكب الخطي linear superposition principle. في المقابل فإن شرط الهيرميشية Hermicity ضروري لضمان أن قيم طيف المؤثر حقيقية يمكن قياسها عملياً. سوف نثبت في هذا القسم أن جميع المؤثرات الهيرميشية لها قيم طيفية حقيقية.

لو فرضنا أن طيف المؤثر $\hat{Q}$ متقطع discrete spectrum و بُعْده هو N و كل حالة طيفية ممكنة توصف بالعدد الكمي α_j، حيث أن المؤشر $j = 1, 2, \cdots, N$ يسري على جميع الحالات الكمية. هنا α_j تمثل مجموعة الأعداد الكمية (و ليس عدد كمي واحد فقط) و التي تصف الحالة رقم j للنظام ذو الطيف المتقطع discrete spectrum system بحيث نكتب مجوعة الأعداد الكمية للنظام $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\}$. هنا α_1 تمثل أصغر قيم ممكنة للأعداد الكمية تليها α_2 حتى α_N. إذا كان فضاء المؤثر $\hat{Q}$ لانهائي، أي أن $N = \infty$ فإن قيم المؤشر $j = 1, 2, \cdots, \infty$ و الأعداد الكمية تتراوح من α_1 إلى α_∞.

على سبيل المثال لجسيم في بئر لانهائي في بعد واحد في القسم (4.1) فإن $\alpha_j = \{n, \Pi\}$ و بالتالي تُمَثل الحالات المميزة بالكت $|n, \Pi\rangle$. يمكن أن نقول أن $\alpha_1 = \{1, +\}$، $\alpha_2 = \{1, -\}$، ...، إلخ. مثال آخر لجسيم في صندوق الجهد ثلاثي البعد في القسم (7.1.1) فإن $\alpha_j = \{n_1, n_2, n_2\}$ و بالتالي تُمَثل الحالات بالكت $|n_1, n_2, n_3\rangle$. هنا $\alpha_1 = \{1, 1, 1\}$، $\alpha_2 = \{1, 2, 1\}$ و هكذا. لجسيم في جهد الحركة التوافقية البسيطة في بعد واحد فإن $\alpha_j = n$ و الحالات المميزة تُعْطى بالكت $|n\rangle$ حيث $\alpha_1 = 0$، $\alpha_2 = 1$. لنظام ذرة الهيدروجين فإن $\alpha_j = \{n, l, m\}$ و الحالات المميزة تُعْطى بالكت $|n, l, m\rangle$. عموماً سنصطلح على أن α_1 دائماً تمثل أصغر مجموعة أعداد كمية.

نقول أن للمؤثر $\hat{Q}$ مجموعة كاملة، مستقلة خطياً، و متعامدة من متجهات فضاء الكِت المميزة eigenkets تعطى بـ

$$\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^N = \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \ldots, |\alpha_N\rangle\}, \tag{8.40}$$

يقابلها مجموعة من القيم المميزة (الطيف)

$$\{q_j\}_{j=1}^N = \{q_1, q_2, \ldots, q_N\}, \tag{8.41}$$

بحيث تتحقق المعادلة المميزة

$$\hat{Q}|\alpha_j\rangle = q_j|\alpha_j\rangle; \qquad \forall j = 1, 2, \cdots, N. \tag{8.42}$$

نعبر رياضياً عن خصائص مجموعة متجهات فضاء الكِت المميزة eigenkets المُعطاة في (8.40) كالتالي

1. نقول أنها مستقلة خطياً لأن

$$\sum_{j=1}^{N} c_j|\alpha_j\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad c_j = 0; \qquad \forall j = 1, 2, \cdots, N. \tag{8.43}$$

2. نقول إنها متعامدة و معايرة orthonormal لأن الضرب الداخلي لها يُعطي بـ

$$\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}; \qquad \forall i, j = 1, 2, \cdots, N. \tag{8.44}$$

3. تُكوِّن مجموعة تامة أو كاملة complete set من متجهات الفضاء لأنها تحقق العلاقة

$$\sum_{j=1}^{\eta_N} |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = 1; \qquad \forall j = 1, 2, \cdots, N. \tag{8.45}$$

العلاقة (8.45) تسمى علاقة التمام completeness relation أو الإنغلاق closure و يمكن إثباتها مباشرةً من حقيقة أن المجموعة الكاملة تبني الفضاء. لذلك أي متجه عشوائي في الفضاء $|\varphi\rangle$ يمكن أن يكتب بمعلومية مجموعة متجهات فضاء الكِت المميزة eigenkets المُعطاة في (8.40) حسب العلاقة (8.5). لو ضربنا طرفي العلاقة (8.5) بـ البرا $\langle\alpha_i|$ مع تطبيق شرط التعامد (8.44) نحصل على

$$\langle\alpha_i|\varphi\rangle = \sum_j b_j\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \sum_j b_j\delta_{ij} = b_i.$$

و بالتالي فإن الثوابت المركبة b_j ليست سوى مسقط المتجه $|\varphi\rangle$ على الحالة المميزة $|\alpha_j\rangle$، أي أن

$$b_j = \langle\alpha_j|\varphi\rangle. \tag{8.46}$$

بتعويض قيم b_j في العلاقة (8.5) من العلاقة (8.46)، نحصل على

$$|\varphi\rangle = \sum_j \langle\alpha_j|\varphi\rangle|\alpha_j\rangle = \sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\varphi\rangle = \left(\sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\right)|\varphi\rangle. \tag{8.47}$$

بالمقارنة بين الطرفين، نستنتج أن الكمية بين القوسين في أقصى الطرف الأيمن تساوي الوحدة، مما يحقق علاقة التمام (8.45). هذا يماثل تمثيل المتجهات الإقليدية بمركبات و وحدات متجه (تعتبر أساسات كاملة، متعامدة، معايرة، و تبني الفضاء) لنحصل على

$$\vec{\mathbf{V}} = \sum_i V_{x_i}\hat{\mathbf{x}}_i = \sum_i (\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{V})\hat{\mathbf{x}}_i,$$

حيث مجموعة وحدات المتجه $\{\hat{\mathbf{x}}_i\}_{i=1}^{N}$ تتبع علاقة الضرب الداخلي $\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}_j = \delta_{ij}$.

سوف نثبت الآن أن مجموعة القيم المميزة $\{q_j\}_j$ للمؤثر الهيرميشي $\hat{Q}$ حقيقية (و هذا ينطبق لأي مؤثر هيرميشي). لو حسبنا الضرب الداخلي $\langle\alpha_i|\hat{Q}|\alpha_j\rangle$ مع إستخدام علاقة المعادلة المميزة (8.42) نحصل على

$$\langle\alpha_i|\hat{Q}|\alpha_j\rangle = q_j\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle. \tag{8.48}$$

إذا كان $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ فإن $\hat{Q}$ تحقق المعادلة (8.38)، مع إستخدام علاقة المعادلة المميزة (8.42) و تطبيق العلاقة (8.8) فإننا نكتب أيضاً الضرب الداخلي (8.48) بشكل آخر

$$\langle\alpha_i|\hat{Q}|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_j|\hat{Q}|\alpha_i\rangle^* = q_i^*\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle^* = q_i^*\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle. \tag{8.49}$$

بطرح (8.49) من (8.48) نحصل على

$$(q_j - q_i^*)\,\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = 0$$

في حالة أن $i \neq j$ فإن $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = 0$ مما يثبت شرط التعامد (8.44). في حالة أن $i = j$ فإن $q_j - q_j^* = 0$. نستنتج إذاً

$$\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger \quad \Rightarrow \quad q_j = q_j^*; \quad \forall j, \tag{8.50}$$

بمعنى أن القيم المميزة للمؤثرات الهيرميشية دائماً حقيقية. إذا هنا أثبتنا حقيقتين معاً، أولهما لأي مؤثر هيرميشي فإن متجهات كت المميزة المقابلة لقيمتين مميزتين مختلفتين تكونا متعامدتين. ثانيهما أن القيم المميزة للمؤثرات الهيرميشية دائماً حقيقية.

من المعروف في الجبر الخطي أن التعبير الجبري للمؤثر يمكن أن يستخدم لتحديد مجموعة متجهات فضاء البرا المميزة eigenkets و مجموعة القيم المميزة eigenvalue. السؤال الآن: هل يمكن بطريقة عكسية تحديد المؤثر بعلومية مجموعة متجهات فضاء البرا المميزة و مجموعة القيم المميزة؟ للإجابة على هذا التساؤل نعود إلى المعادلة المميزة (8.42) و التي يمكن كتابتها على الشكل

$$\hat{Q}|\alpha_j\rangle = q_j|\alpha_j\rangle = \sum_i q_i|\alpha_i\rangle\delta_{ij}.$$

نعبر عن دالة دلتا كرونكر $\delta_{ij} = \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle$ حسب علاقة التعامد (8.44)، مع إستخدام خاصية التجميع، لنحصل على

$$\hat{Q}|\alpha_j\rangle = \sum_i q_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \left(\sum_i q_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\right)|\alpha_j\rangle.$$

بمقارنة أقصى الطرف الأيمن مع أقصى الطرف الأيسر نصل إلى أن

$$\hat{Q} = \sum_j q_j|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = \sum_j q_j\hat{\Lambda}_{jj}, \tag{8.51}$$

حيث إستخدمنا تعريف مؤثر الدوران (8.34) لتعريف المؤثر الإسقاطي projection operator $\hat{\Lambda}_{jj}$ على إتجاه متجه الكِت الأساسي $|\alpha_j\rangle$، أي أن

$$\hat{\Lambda}_{jj} = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|. \tag{8.52}$$

المؤثر الإسقاطي $\hat{\Lambda}_{jj}$ في (8.52) هو تحويل خطي لمتجه فضاء إلى نفسه. لهذا فإن له الخواص التالية:

1. التأثير به مرة يكافئ التأثير مرتين أو أكثر. هذه الخاصية في المؤثرات الإسقاطية تسمى خاصية الرسوخ idempotent property و تعني فيزيائياً أن إسقاط النظام على حالة معينة بفعل أي مؤثرات خارجية أو قياس ما سيبقي النظام على تلك الحالة. رياضياً يمكن أن نثبت هذه الخاصية كالتالي

$$\hat{\Lambda}_{jj}^2 = \hat{\Lambda}_{jj}. \tag{8.53}$$

2. حسب علاقة التمام (8.45) فإن

$$\sum_j \hat{\Lambda}_{jj} = 1. \tag{8.54}$$

3. حسب العلاقة (8.35) فإن المؤثر الإسقاطي (8.52) هيرميشي، أي أن

$$\hat{\Lambda}_{jj}^{\dagger} = \hat{\Lambda}_{jj}. \tag{8.55}$$

حسب تعريف المؤثر $\hat{Q}$ في (8.51) فإنه يمكن أن نبين بشكل مباشر أنه إذا كانت $\hat{Q}$ هيرميشية فإن القيم المميزة للمؤثر حقيقية.

سؤال (8.1): أثبت الخاصية التناظرية (8.53) للمؤثرات الإسقاطية. $\diamondsuit$

سؤال (8.2): من تعريف المؤثر $\hat{Q}$ في (8.51) أثبت أنه إذا كان $\hat{Q}$ هيرميشي فإن هذا يقتضي أن مجموعة قيمه المميزة حقيقية. $\diamondsuit$

8.4 التحليل الطيفي للأطياف المتقطعة و نظرية القياس
Spectral decomposition and the measurement theory

لمؤثرنا الهيرميشي الخطي $\hat{Q}$، و الذي يمثل كمية فيزيائية رصودة Q، له مجموعة متجهات كِت مميزة (8.40) تقابلها قيم طيفية متقطعة تُعطى مجموعتها من (8.41). تُوصف حالة النظام system state بمتجه الكِت $|\Psi\rangle$ و الذي يكتب بمعلومية متجهات الكِت المميزة بالشكل

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^{N} A_j |\alpha_j\rangle, \tag{8.56}$$

حيث أن السعة A_j تمثل كمية الحالة الجزئية $|\alpha_j\rangle$ المُتَضمنة في الحالة الكلية $|\Psi\rangle$ و الذي يُعْطى رياضياً كمسقط $|\Psi\rangle$ على الحالة رقم j ممثلة بالكِت $|\alpha_j\rangle$ من خلال الضرب الداخلي

$$A_j = \langle \alpha_j | \Psi \rangle. \tag{8.57}$$

هذا مطابق تماماً لما وصلنا إليه في (8.46) و الذي لايختلف أيضاً عما وصلنا له سابقاً في (3.58). لكن هنا نريد أن نبحث في المعنى الفيزيائي للسعة (8.57). نحن نتطلب أن تكون $|\Psi\rangle$ معايرة، و منه نحصل على

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \Psi | \Psi \rangle = \left(\sum_j A_j^* \langle \alpha_j | \right) \cdot \left(\sum_i A_i |\alpha_i\rangle \right), \\ &= \sum_{ji} A_j^* A_i \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle = \sum_{ji} A_j^* A_i \delta_{ji}. = \sum_j |A_j|^2 \end{aligned}$$

أو نكتب

$$\sum_j |A_j|^2 = \sum_j |\langle \alpha_j | \Psi \rangle|^2 = 1, \tag{8.58}$$

تماماً كما توصلنا سابقاً في النتيجة (3.59).

سنقوم الآن بحساب القيمة المتوقعة للمتغير الديناميكي Q عن طريق علاقة الضرب (8.36) و لنحصل على

$$\begin{aligned}\langle Q\rangle &\equiv \langle\Psi|\hat{Q}|\Psi\rangle = \left(\sum_j A_j^*\langle\alpha_j|\right)\hat{Q}\left(\sum_i A_i|\alpha_i\rangle\right),\\ &= \sum_{ji} A_j^* A_i\langle\alpha_j|\hat{Q}|\alpha_i\rangle = \sum_{ji} A_j^* A_i q_i\delta_{ji},\end{aligned}$$

لنكتب مقدار القيمة المتوقعة بالصيغة

$$\langle Q\rangle \equiv \langle\Psi|\hat{Q}|\Psi\rangle = \sum_j |A_j|^2\, q_j. \tag{8.59}$$

أيضاً مطابق لما توصلنا إليه سابقاً في النتيجة (3.61). نلاحظ أيضاً من الصيغة (8.59) أن القيمة المتوقعة $\langle Q\rangle$ حقيقية لأن $\hat{Q}$ هيرميشي. يمكن إثبات ذلك بطريقتين: إما مباشرة من النتيجة في أقصى الطرف الأيمن من (3.61) على أساس أن القيم المميزة حقيقية كما أثبتنا في النتيجة (8.50)، أو من النتيجة المعطاة في الصيغة (8.38).

سؤال (8.3): أثبت أنه لأي مؤثر $\hat{A}$ هيرميشي (ذاتي التجاور) فإن قيمته المتوقعة تكون حقيقية. ♢

من النتائج في (8.58) و (8.59) نستنتج أن $|A_j|^2 = |\langle\alpha_j|\Psi\rangle|^2$ تمثل إحتمالية إجراء أي قياس للمتغير الديناميكي Q سيُعْطِي القيمة المميزة q_j. إن إحتمال الحصول على القيمة المميزة q_j تُعْطى بدالة الإحتمالية $P(q_j)$ و التي تُكتب على الشكل

$$P(q_j) = |A_j|^2 = |\langle\alpha_j|\Psi\rangle|^2. \tag{8.60}$$

النظام الكلي حسب (8.56) عبارة عن مجموع خطي (أو تراكب خطي إن صح التعبير) من الحالات الكمية الجزئية المسموحة (8.40). كل حالة لها إحتمالية ظهور معينة عند إجراء القياس حسب (8.60)، بحيث أن مجموع الإحتماليات الجزئية معاير كما توصلنا في (8.58). عند قياس الكمية الفيزيائية Q للنظام $|\Psi\rangle$ فإننا نحصل على قيمة مميزة واحدة من ضمن مجموعة القيم المسوحة (8.41)، و لتكن هذه القيمة المميزة، على سبيل المثال، q_5. عندئذٍ نقول أن النظام أُسْقِط على حالة الكِت المميزة $|\alpha_5\rangle$ للكمية الرصودة Q بفعل القياس. أي أن

$$|\Psi\rangle \xrightarrow[\text{قياس الكمية } Q]{} |\alpha_5\rangle. \tag{8.61}$$

نقول إذاً أن القياس يغير الحالة. هنا طبعاً إستثناء، ألا و هو أذا كانت الحالة الكلية تساوي إحدى الحالات المميزة الجزئية، فإن القياس لن يغير الحالة. هذا يعني أنه إذا أجرينا قياس ثاني على القياس الأول في (8.61)، فإن النتيجة بالتأكيد هي أيضاً حصولنا على q_5. أي أن

$$|\Psi\rangle \xrightarrow[\text{قياس الكمية } Q]{} |\alpha_5\rangle \xrightarrow[\text{قياس الكمية } Q]{} |\alpha_5\rangle. \tag{8.62}$$

السبب يعود إلى أن سقوط النظام الكلي بفعل القياس الأول (8.61) على الحالة المميزة $|\alpha_5\rangle$، فإن الإحتمالية $|A_5|^2 = 1$. مما يعني أن $A_j = 0$ لجميع قيم j الممكنة، ما عدا $j = 5$. و بالتالي فإن إجراء المزيد من القياسات المتعاقبة[3] سيعطي بالتأكيد القيمة المميزة q_5. إن عدم سقوط حالة كِت المميزة $|\alpha_5\rangle$ على أي حالة كِت مميزة أخرى $|\alpha_j\rangle$، بحيث أن $j \neq 5$، يعود إلى التعامد بين $|\alpha_5\rangle$ و $|\alpha_{j\neq 5}\rangle$ و الذي سيجعل السعة $\langle\alpha_{j\neq 5}|\alpha_5\rangle = 0$. من

[3] نعنى هنا بالقياسات المتعاقبة بالقياسات التي تُجْرَى مباشرة و بشكل متلاحق حتى لا نعطي فرصة للتطور الزمني أن يؤثر على النظام. بمعنى أن القياسات يجب أن تُجْرى بزمن أقل بكثير من زمن الإسترخاء relaxation time.

وجهة نظر نظرية القياس measurement theory فإن متجهات كِت المتعامدة تمثل بدائل يستبعد بعضها بعضا mutually exclusive alternatives.

بقي لنا أن نتسأل عن دور دالة الإحتمالية (8.60) طالما أن إجراء القياس سيعطي قيمة واحدة معينة من النتائج؟ الإجابة لاتتضح لدى نقاشنا عن نظام واحد فقط. عملياً يجب أن نعتبر عدد كبير من الأنظمة المتماثلة و المجهزة عند عند نفس الظروف لتكوِّن تجميع نقي pure ensemble. الصفة "نقي" أتت من حقيقة أن الأنظمة جميعها توصف بالحالة $|\Psi\rangle$. سنجد أنه بعد إجراء قياس المتغير الديناميكي Q للتجميع، فإن عدد المرات التي ستظهر فيها القيمة المييزة q_5 مقسوماً على عدد النظم في التجميع ستساوي[4] الكمية $|\langle\alpha_5|\Psi\rangle|^2$. في المقابل فإن متوسط Q تصبح عملياً

$$\langle Q\rangle = \frac{\text{عدد مرات ظهور } q_1}{\text{عدد النظم في التجميع}} \times q_1 + \frac{\text{عدد مرات ظهور } q_2}{\text{عدد النظم في التجميع}} \times q_2 + \cdots + \frac{\text{عدد مرات ظهور } q_N}{\text{عدد النظم في التجميع}} \times q_N,$$

و هي تقابل القيمة المتوقعة نظرياً و المعطاة في العلاقة (8.59).

و أخيراً، هناك نوع آخر من القياسات تسمى القياسات الإنتقائية selective measurments أو الترشيح filteration. خلال عملية القياس يقوم جهاز بإنتقاء متجه كِت مميز eigenket لـ Q، و لنقل أنه $|\alpha_i\rangle$، و حجب و رفض جميع متجهات كِت الأخرى كما هو موضح في الشكل (8.1). نتيجة القياس هنا ستعطي القيمة المميزة q_i.

عملياً نحصل على هذا النوع من القياس بإستخدام مؤثرات. على سبيل المثال إذا أردنا نحصل على شعاع مستقطب الحركة المغزلية (أي له حركة مغزلية بإتجاه معين) فإننا نسلط مجالاً مغناطيسياً غير متجانس عمودي على إتجاه الشعاع المتعادل فيتحلل الشعاع إلى عدة شعاعات حسب المساقط المغناطيسية للعزم الزاوي المغزلي، كما هو الحال في تجربة شتيرن-جيرلاخ في الشكل (1.25). ثم نقوم بوضح حاجز يمرر فقط الشعاع ذو الإتجاه المرغوب. مثال آخر فيما يسمى جهاز إنتقاء السرعات للأشعة الجسيمية المشحونة. حيث نسلط هذه المرة مجالاً مغناطيسياً متجانساً عمودي على إتجاه الشعاع (عمودي على سرعة الجسيميات) فتتولد قوة مغناطيسية عمودية على متجه السرعات تحرف الجسيمات المشحونة بمسارات دائرية بأنصاف أقطار مختلفة، كل نصف قطر يعتمد على نسبة الشحنة إلى الكتلة و على السرعة. بوضع حاجز يمكن تمرير شعاع بنسبة شحنة إلى كتلة معينة و بسرعة معينة و حجب الباقي.

رياضياً، نصل إلى القياسات الإنتقائية من خلال تطبيق المؤثر الإسقاطي المعطى في (8.52) على $|\Psi\rangle$. أي أن

$$\hat{\Lambda}_{ii}|\Psi\rangle = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\Psi\rangle = \langle\alpha_i|\Psi\rangle|\alpha_i\rangle = A_i|\alpha_i\rangle. \tag{8.63}$$

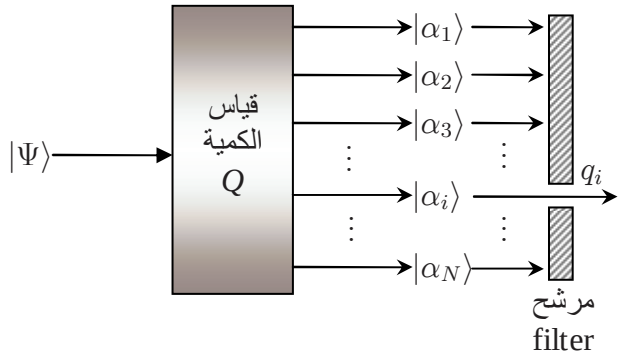
لقد قام العالم جوليان شوينجر J. Schwinger بإستخدام المؤثرات الإسقاطية (8.52) و مؤثرات الدوران (8.34) لصياغة نظرية الكم من خلال القياسات الإنتقائية و إدخال رمز القياس measurement symbol الذي يعتمد على المؤثرات القياسية. و قام بمقارنة نتائج حساباته مع القياسات العملية من عدة تجارب، شبيهة بتجربة شتيرن-جيرلاخ. هذا أدى إلى تحفيز كامل لرياضيات متجهات فضاء الكِت و البرا و المؤثرات.

8.5 الأطياف المستمرة Continous spectra

لقد تعاملنا لحد الآن مع كميات فيزيائية رصودة ذات أطياف متقطعة من القيم المميزة. أبعاد فضائاتها متناهية أو غير متناهية. في المقابل، يوجد كميات رصودة لها أطياف مستمرة من القيم المميزة، على سبيل المثال، الموقع position و الزخم الخطي (كمية الحركة) momentum. كما رأينا في الباب الرابع أن كمية الحركة تمثل بمؤثر هيرميشي و خطي تعطى معادلتها المميزة من العلاقة (4.34) حيث علاقة التعامد للدوال المميزة، و التي تعطى في (4.37)، تستخدم دالة دلتا لديراك للتعبير عن الأطياف المستمرة. ما نريد أن نقوله هو أن أي كمية فيزيائية رصودة مستمرة الطيف لها متجه كِت مميز، لكن أبعاد هذا الفضاء سيكون بالتأكيد لانهائي.

---

[4] بشرط أن مجموعة متجهات كِت المميزة (8.40) معايرة.



شكل (8.1): القياس الإنتقائي selective measurement حيث يقوم جهاز بقياس كمية فيزيائية Q للحالة $|\Psi\rangle$ و مرشح filter يسمح لحالة كِت مميزة واحدة فقط $|\alpha_i\rangle$ و يرفض باقي الحالات الأخرى.

8.5.1 الموقع Position

لنعتبر فضاء الموقع في بعد واحد x و الذي يمثل كمية رصودة لها مؤثر هيرميشي و خطي $\hat{x}$ له مجموعة كاملة من متجهات كِت المميزة $\{|x\rangle\}$ و التي تحقق المعادلة المميزة

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle. \tag{8.64}$$

من غير الهام معرفة كيف ننشيء المؤثر $\hat{x}$. رأينا من نظرية المفكوك الطيفي للأطياف المتقطعة، أن أي متجه كِت عشوائي $|\varphi\rangle = \sum_j b_j|\alpha_j\rangle$ (8.5) يُكتب بمعلومية مجموعة الأساسات الكاملة $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ حسب العلاقة (8.5). بنفس الطريقة أي متجه كِت عشوائي $|\psi\rangle$ يُكتب بمعلومية مجموعة الأساسات الكاملة $\{|x\rangle\}$ حسب علاقة المفكوك الطيفي للأطياف المستمرة

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, b(x)|x\rangle, \tag{8.65}$$

حيث إستبدلنا المعامل b_j و المجموع $\sum_j$ للأطياف المتقطعة بالدالة $b(x)$ و التكامل $\int_{-\infty}^{\infty} dx$ للأطياف المستمرة، على الترتيب. بما أن x كمية مستمرة التغير، فإن العلاقة العيارية التعامدية للحالات المميزة $\{|x\rangle\}$ تكتب على الصورة

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x), \tag{8.66}$$

حيث إستخدمنا دالة ديراك دلتا لتمثيل الطيف المستمر للمتغير x عوضاً عن دالة كرونكر دلتا للأطياف المتقطعة، كما هو الحال في علاقة التعامد العيارية (8.44) للأطياف المتقطعة. الآن نستطيع حساب الدالة $b(x)$ بضرب (8.65) بالبرا $\langle x'|$ من اليسار لنحصل على

$$\begin{aligned} \langle x'|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, b(x)\langle x'|x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, b(x)\delta(x' - x), \\ &= b(x'). \end{aligned}$$

ننتهي إلى أن

$$b(x) = \langle x|\psi\rangle. \tag{8.67}$$

العلاقة (8.67) لها دلائل هامة. أولها، لو عوضنا عن قيمة $b(x)$ من (8.67) في (8.65) نحصل على

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x|\psi\rangle = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x|\right)|\psi\rangle,$$

و التي نستنتج منها مباشرة علاقة التمام

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|x\rangle\langle x| \equiv 1, \tag{8.68}$$

و التي تشابه علاقة التمام للأطياف المتقطعة (8.45)، بتبديل المجموع إلى تكامل.

الدلالة الثانية للعلاقة (8.67) أن $|b(x)|^2 = |\langle x|\psi\rangle|^2$ تمثل إحتمالية الحصول على القيمة x لدى إجراء قياس لموقع الحالة $|\psi\rangle$. لكن هذا في الواقع من صفات كثافة الإحتمالية $|\psi(x)|^2$! للتأكد أكثر نتحقق من أن $|b(x)|^2$ تحقق شرط المعايرة، على أساس أن الكِت $|\psi\rangle$ معاير، أي أن

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx|b(x)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx|\langle x|\psi\rangle|^2,\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle,\\ &= \langle\psi|\psi\rangle = 1,\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا علاقة التمام (8.68). نجد إذاً أن $|b(x)|^2$ معايرة على الفضاء، مما نفهم أن $b(x) = \psi(x)$ أو يمكننا القول أن

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \tag{8.69}$$

هذا تعميم لمعنى الدالة الموجية $\psi(x)$ بإعتبارها مسقط الحالة $|\psi\rangle$ على فضاء $|x\rangle$. الضرب الداخلي $\langle\varphi|\psi\rangle$ يمكن أن يحسب ببساطة بالشكل

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|1|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\langle\varphi|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\varphi^*(x)\psi(x), \tag{8.70}$$

تماماً كما صغنا المفاهيم الإبتدائية للدالة الموجية في الباب الثالث و بالتحديد في الأقسام (3.4) و (3.9).

الأمر لايختلف كثيراً في ثلاث أبعاد. سيتعين علينا إستخدام مجموعة متجهات كِت الكاملة لمتجه الموقع $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ و التي تعرف بـ

$$|\mathbf{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle, \tag{8.71}$$

بحيث تتحقق المعادلات المميزة التالية

$$\hat{x}|\mathbf{r}\rangle = x|\mathbf{r}\rangle; \qquad \hat{y}|\mathbf{r}\rangle = y|\mathbf{r}\rangle; \qquad \hat{z}|\mathbf{r}\rangle = z|\mathbf{r}\rangle. \tag{8.72}$$

هذا يعني أن متجه كِت $|\mathbf{r}\rangle$ متزامن simultaneous للكميات الرصودة $\hat{x}$، $\hat{y}$، و $\hat{z}$. نحن إذاً ضمنياً إعتبرنا أن المركبات الثلاث لمتجه الموقع يمكن قياسها بنفس الوقت إلى أي دقة عشوائية، مما يعني أن العلاقات التبديل التالية تنطبق

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{y}, \hat{z}] = [\hat{z}, \hat{x}] = 0. \tag{8.73}$$

نقول إذاً أي متجه كِت عشوائي معاير $|\psi\rangle$ يكتب بمعلومية متجهات كِت الكاملة لمتجه الموقع $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ من خلال العلاقة

$$|\psi\rangle = 1|\psi\rangle = \int d^3r|\mathbf{r}\,\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3r\,\psi(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle, \tag{8.74}$$

حيث إستخدمنا علاقة التمام في ثلاثة أبعاد

$$\int d^3r\,|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \equiv 1. \tag{8.75}$$

نجد إذاً أن التمثيلات المجردة لفضاء الموقع يمكن إستخدامها لإسقاط تمثيلات الكِت و البرا على فضاء الموقع للحصول على تمثيلات الدوال كما في الباب الثالث. فعلى سبيل المثال علاقة التعامد (8.44) للأساسات $\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^{N}$ يمكن أن تسقط على فضاء الموقع كما يلي

$$\begin{aligned}\delta_{ji} &= \langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = \langle\alpha_j|1|\alpha_i\rangle,\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\langle\alpha_j|x\rangle\langle x|\alpha_i\rangle.\end{aligned}$$

الكمية $\psi_{\alpha_i}(x) = \langle x|\alpha_i\rangle$ و الكمية $\psi^*_{\alpha_j}(x) = \langle \alpha_j|x\rangle$ و بالتالي نحصل على

$$\langle \alpha_j|\alpha_i\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*_{\alpha_j}(x)\psi_{\alpha_i}(x) = \delta_{ji}; \qquad \forall i,j = 1,2,\ldots,N, \tag{8.76}$$

مماثلة تماماً لعلاقة التعامد العيارية (3.54). من العلاقات الهامة أيضاً و التي إستنبطناها في الباب الثالث علاقة الإنغلاق (3.60) و التي يمكن إرجاعها إلى علاقة التعامد في فضاء الموقع (8.66) كما يلي

$$\begin{aligned}
\delta(x'-x) &= \sum_j \psi_{\alpha_j}(x')\psi^*_{\alpha_j}(x), \\
&= \sum_j \langle x'|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|x\rangle = \langle x'|\left(\sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\right)|x\rangle, \\
&= \langle x'|x\rangle.
\end{aligned}$$

8.5.2 الزخم الخطي Momentum

نفس النقاش للموقع ينطبق تماماً على الزخم الخطي (أو كمية الحركة). لنعتبر فضاء الزخم في بعد واحد p و الذي يمثل كمية رصودة لها مؤثر هيرميشي و خطي $\hat{p}$ له مجموعة كاملة من متجهات كِت المميزة $\{|p\rangle\}$ و التي تحقق المعادلة المميزة

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle. \tag{8.77}$$

أي متجه كِت عشوائي $|\phi\rangle$ يُكتب بمعلومية مجموعة الأساسات الكاملة $\{|p\rangle\}$ حسب علاقة المفكوك الطيفي للأطياف المستمرة

$$|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, b(p)|p\rangle, \tag{8.78}$$

بما أن p كمية مستمرة التغير، فإن العلاقة العيارية التعامدية للحالات المميزة $\{|p\rangle\}$ تكتب على الصورة

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p'-p), \tag{8.79}$$

حيث إستخدمنا دالة ديراك دلتا لتمثيل الطيف المستمر للمتغير p عوضاً عن دالة كرونكر دلتا للأطياف المتقطعة. الآن بحساب الدالة $b(p)$ بضرب (8.78) بالبرا $\langle p'|$ من اليسار ننتهي إلى أن

$$b(p) = \langle p|\phi\rangle. \tag{8.80}$$

و التي منها نفهم أن $|b(p)|^2 = |\langle p|\phi\rangle|^2$ تمثل إحتمالية الحصول على القيمة p لدى إجراء قياس لزخم الحالة $|\phi\rangle$. لكن هذا أيضاً من صفات كثافة الإحتمالية $|\phi(p)|^2$ كما راينا في القسم (3.5). للتأكد أكثر نتحقق من أن $|b(p)|^2$ تحقق شرط المعايرة (3.38)، على أساس أن الكِت $|\phi\rangle$ معاير، أي أن

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dp|b(p)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dp|\langle p|\phi\rangle|^2, \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\langle\phi|p\rangle\langle p|\phi\rangle, \\
&= \langle\phi|\phi\rangle = 1,
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا علاقة التمام التالية

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp|p\rangle\langle p| \equiv 1, \tag{8.81}$$

نجد إذاً أن $|b(p)|^2$ معايرة على الفضاء، مما نفهم أن $b(p) = \phi(p)$ أو يمكننا القول أن

$$\phi(p) = \langle p|\phi\rangle. \tag{8.82}$$

هذا تعميم لمعنى الدالة الموجية $\phi(p)$ بإعتبارها مسقط الحالة $|\phi\rangle$ على فضاء $|p\rangle$. الضرب الداخلي $\langle\varphi|\phi\rangle$ يمكن أن يحسب ببساطة بالشكل

$$\langle\varphi|\phi\rangle = \langle\varphi|1|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \langle\varphi|p\rangle\langle p|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \varphi^*(p)\phi(p), \tag{8.83}$$

تماماً كما صغنا المفاهيم الإبتدائية للدالة الموجية في الباب الثالث.

في ثلاث أبعاد، سيتعين علينا إستخدام مجموعة متجهات كِت الكاملة لمتجه الزخم $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ و التي تعرف بـ

$$|\mathbf{p}\rangle \equiv |p_x, p_y, p_z\rangle, \tag{8.84}$$

بحيث تتحقق المعادلات المميزة التالية

$$\hat{p}_x|\mathbf{p}\rangle = p_x|\mathbf{p}\rangle; \qquad \hat{p}_y|\mathbf{p}\rangle = p_y|\mathbf{p}\rangle; \qquad \hat{p}_z|\mathbf{p}\rangle = p_z|\mathbf{p}\rangle. \tag{8.85}$$

هذا يعني أن متجه كِت $|\mathbf{p}\rangle$ متزامن simultaneous للكميات الرصودة $\hat{p}_x$، $\hat{p}_y$، و $\hat{p}_z$. نحن إذاً ضمنياً إعتبرنا أن المركبات الثلاث لمتجه الزخم يمكن قياسها بنفس الوقت إلى أي دقة عشوائية، مما يعني أن العلاقات التبديل التالية تنطبق

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0. \tag{8.86}$$

نقول إذاً أي متجه كِت عشوائي معاير $|\phi\rangle$ يكتب بمعلومية متجهات كِت الكاملة لمتجه الزخم $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ من خلال العلاقة

$$|\phi\rangle = 1|\phi\rangle = \int d^3p\, |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\phi\rangle = \int d^3p\, \phi(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle, \tag{8.87}$$

حيث إستخدمنا علاقة التمام في ثلاثة أبعاد

$$\int d^3p\, |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| \equiv 1. \tag{8.88}$$

نجد إذاً أن التمثيلات المجردة لفضاء الموقع يمكن إستخدامها لإسقاط تمثيلات الكِت و البرا على فضاء الزخم الخطي للحصول على تمثيلات الدوال كما في الباب الثالث.

لنفترض التالي

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \langle x|\psi\rangle = \langle x|1|\psi\rangle, \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle, \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \langle x|p\rangle\phi(p),
\end{aligned}$$

حيث إعتبرنا أن $\phi(p) = \langle p|\psi\rangle$، على أساس أن $|\psi\rangle$ أي حالة كِت عشوائية. لو قارنا مع العلاقة (3.35)

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp,$$

نحصل على

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \tag{8.89}$$

يمكن تعريف دالة ديراك دلتا من العلاقة (8.66) لنحصل على

$$\begin{aligned}\delta(x-x') &= \langle x|x'\rangle = \langle x|1|x'\rangle, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle,\end{aligned}$$

بإستخدام (8.89) نحصل على

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{ip(x-x')/\hbar}. \tag{8.90}$$

في ثلاث أبعاد العلاقة (8.89) تصبح

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \tag{8.91}$$

حيث ان دالة ديراك في ثلاث أبعاد تصبح

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p\, e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}. \tag{8.92}$$

الجدول (8.2) يلخص جميع العمليات الواحدية unitary operations للمؤثرات و لمتجهات الفضاء مع توضيح المعاني الفيزيائية المرتبطة لكل عملية و أهم تطبيقاتها.

8.6 علاقة عدم اليقين المعممة Generalized uncertainty relation

لو إعتبرنا مؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يمثلان كميات فيزيائية رصودة، لهما خطأ (أو حيود) بالقياس $\Delta\hat{A}$ و $\Delta\hat{B}$، على الترتيب، فإن حاصل ضرب $\Delta\hat{A}$ في $\Delta\hat{B}$ يحقق المتراجحة التالية

$$\left\langle (\Delta A)^2\right\rangle \left\langle (\Delta B)^2\right\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\left\langle \left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|^2. \tag{8.93}$$

المتراجحة (8.93) تُعْرف بعلاقة عدم اليقين المعممة. إن الحيود بقياس $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يعطى بالعلاقة

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A\rangle; \qquad \text{and} \qquad \Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B\rangle. \tag{8.94}$$

من السهل إثبات أن

$$\left\langle (\Delta A)^2\right\rangle = \left\langle A^2\right\rangle - \langle A\rangle^2,$$

كل ما هنالك هو تربيع العلاقة (8.94) و أخذ القيمة المتوقعة لها $\langle\ \rangle$. من الواضح أن كلاً من $\Delta\hat{A}$ و $\Delta\hat{B}$ مؤثرات هيرميشية و ذلك بسبب إرتباطهما بـ $\hat{A}$ و $\hat{B}$، حسبما تقترح العلاقة (8.94). ما نريد أن نفعله الآن هو شيئين، أولاً إثبات المتراجحة (8.93) إثباتاً رياضياً صلباً. ثم تطبيقها للبعض المؤثرات الشهيرة، كمؤثر الموقع و الزخم، لنرى ما إذا كانت تحقق مبدأ هايزنبرج.

لإثبات المتراجحة (8.93)، نتذكر من التحليل المركب أنه لأي عدد مركب z فإن

$$|z|^2 = (\mathrm{Re}\, z)^2 + (\mathrm{Im}\, z)^2 \geq (\mathrm{Im}\, z)^2.$$

حيث أن المساواة تتحقق فقط إذا كان z عدد تخيلي نقي pure imaginary number. أيضاً من التحليل المركب نكتب الجزء التخيلي $\mathrm{Im}\, z$ كالتالي

$$\mathrm{Im}\, z = \frac{1}{2i}(z - z^*).$$

جدول (8.2): أنواع و أصل علاقات القيم الواحدية للمؤثرات و لمتجهات البرا و الكِت و تطبيقاتها.

إسم العلاقة الواحدية	الصيغة الرياضية	أصل العلاقة	تطبيقاتها
علاقة التمام أو الإنغلاق	$\sum_\alpha \|\alpha\rangle\langle\alpha\| = 1$	حقيقة أن $\{\|\alpha\rangle\}$ مجموعة كاملة من الدوال المتعامدة و المعايرة.	أي متجه عشوائي $\|\varphi\rangle$ يكتب كمفكوك خطي$\{\|\alpha\rangle\}$. $\|\varphi\rangle = 1\|\varphi\rangle = \sum_\alpha \|\alpha\rangle\langle\alpha\|\varphi\rangle$
المؤثرات الواحدية	$\hat{U}^\dagger\hat{U} \equiv 1$	بالتعريف كي نحصل على علاقة تحفظ الضرب الداخلي	تحويلات خطية من فضاء إلى فضاء آخر بحيث ينحفظ الضرب الداخلي. الحصول على مصفوفة قطرية بالتحويل التشابهي.
المعايرة	$\langle\Psi\|\Psi\rangle \equiv 1$	بالتعريف، حتى نطبق المفهوم الإحصائي لمتجهات الفضاء	نظرية القياس و التحليل الطيفي. حساب القيم المتوقعة للمتغيرات الديناميكية.
معايرة معاملات التفكك لـ $\|\Psi\rangle$	$\sum_\alpha \|A_\alpha\|^2 = 1$ $\sum_\alpha \|\langle\alpha\|\Psi\rangle\|^2 = 1$	حقيقة أن كِت الحالة الكلية $\|\Psi\rangle$ معايرة $1 = \langle\Psi\|\Psi\rangle = \langle\Psi\|1\|\Psi\rangle$ $= \langle\Psi\|(\sum_\alpha \|\alpha\rangle\langle\alpha\|)\|\Psi\rangle$ $= \sum_\alpha \|\langle\alpha\|\Psi\rangle\|^2$	نظرية القياس و التحليل الطيفي. حساب القيم المتوقعة للمتغيرات الديناميكية.
علاقة التمام للأطياف المستمرة	$\int \|x\rangle\langle x\|dx = 1$ $\int \|p\rangle\langle p\|dp = 1$	حقيقة أن $\{\|x\rangle\}$ أو $\{\|p\rangle\}$ مجموعة كاملة من الدوال المتعامدة و المعيارة.	الحزم الموجية، الجسيم الحر، حساب علاقات التعامد العيارية للدوال الموجية.

بما أن $\mathrm{Im}\, z$ حقيقية فإن

$$(\mathrm{Im}\, z)^2 = |\mathrm{Im}\, z|^2 = \left|\frac{1}{2i}(z - z^*)\right|^2 = \frac{1}{4}|z - z^*|^2 .$$

و عليه فإن

$$|z|^2 \geq \frac{1}{4}|z - z^*|^2 .$$

لو أخذنا $z = \langle\psi|\phi\rangle$، فإننا نستنتج أن

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi|\phi\rangle - \langle\phi|\psi\rangle|^2 , \tag{8.95}$$

حيث أن المساواة تحدث إذا كان ناتج الضرب الداخلي $\langle\psi|\phi\rangle$ تخيلياً.

يهمنا أن نتذكر متراجحة كوشي-شوارتز Cauchy–Schwarz inequality و التي تنص على أن مربع القيمة المطلقة للضرب الداخلي لأي متجهين عشوائيين أصغر من أو يساوي حاصل ضرب مقداريهما. المساواة تتحقق إذا كان المتجهان متوازيين، كما هو في المفهوم الهندسي. لمتجهات فضاء الكِت، نقول لأي متجهين عشوائيين $\langle\psi|$ و $\langle\phi|$، فإنه حسب متراجحة كوشي-شوارتز Cauchy–Schwarz inequality ، يحققان

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq |\langle\psi|\phi\rangle|^2 . \tag{8.96}$$

المساواة هنا تحدث إذا كان $|\psi\rangle$ و $|\phi\rangle$ يمثلان نفس الحالة الفيزيائية، على أساس إعتبرنا الحالة الفيزيائية لمتجهات الكِت تقابل الإتجاه الهندسي للمتجهات الإقليدية. بدمج المتراجحة (8.95) مع متراجحة كوشي-شوارتز (8.96) نصل إلى المتراجحة الهامة

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\langle\psi|\phi\rangle - \langle\phi|\psi\rangle\right|^2. \tag{8.97}$$

بما أن $|\psi\rangle$ و $|\phi\rangle$ متجهات عشوائية، يمكن تعريفها بمعلومية الحالة الكلية للنظام $|\Psi\rangle$ كالتالي

$$|\psi\rangle = \Delta\hat{A}|\Psi\rangle; \quad \text{and} \quad |\phi\rangle = \Delta\hat{B}|\Psi\rangle. \tag{8.98}$$

و عليه فإن الضرب الداخلي

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\Psi|\Delta\hat{A}^\dagger\Delta\hat{A}|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\Delta\hat{A})^2|\Psi\rangle = \langle(\Delta A)^2\rangle. \tag{8.99}$$

بنفس الطريقة نجد أن

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle(\Delta B)^2\rangle. \tag{8.100}$$

في المقابل نجد أن الضرب الداخلي

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\phi\rangle &= \langle\Psi|(\Delta\hat{A})^\dagger(\Delta\hat{B})|\Psi\rangle, \\
&= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)^\dagger(\hat{B} - \langle B\rangle)|\Psi\rangle, \\
&= \langle\Psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B\rangle - \langle A\rangle\hat{B} + \langle A\rangle\langle B\rangle)|\Psi\rangle, \\
&= \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle,
\end{aligned}$$

لنصل إلى أن

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle. \tag{8.101}$$

بنفس الطريقة، نجد أن

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle BA\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle. \tag{8.102}$$

نعوض (8.99)، (8.100)، (8.101)، و (8.102) في (8.97) نحصل على

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle &\geq \frac{1}{4}\left|(\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle) - (\langle BA\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle)\right|^2 \\
&\geq \frac{1}{4}\left|\langle AB\rangle - \langle BA\rangle\right|^2, \\
&\geq \frac{1}{4}\left|\langle AB - BA\rangle\right|^2, \\
&\geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^2.
\end{aligned}$$

و الذي يحقق المتراجحة (8.93). نجد إذاً مبدأ عدم اليقين جزء من بنية الجبر الخطي لفضاء هلبرت المركب، إقتضتها علاقة الضرب الداخلي في متراجحة كوشي-شوارتز.

أول إختبار لهذه العلاقة هو تحقيق مبدأ هايزنبرج في الخطأ بقياس الموقع و الزخم كما في (2.28)، بالتعويض المباشر بعلاقة التبديل (3.43) في (8.93). نجد أن مبدأ هايزنبرج يتحقق مباشرة.

8.7 الديناميكا الكمية Quantum dynamics

في هذا القسم سنعنى بدراسة ديناميكية الأنظمة الفيزيائية من وجهة نظر كمية. سنتعامل مع التطور الزمني للنظام (متجهات فضاء و/أو مؤثرات)، الطاقة، الحركة الإنتقالية، و الدورانية. كل هذه الأمور ستُعَالج رياضياً حسب قوانين ميكانيكا الكم.

8.7.1 التطور الزمني و معادلة الحركة
Time evolution and equation of motion

يمكننا إعادة صياغة معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن (3.12) بالشكل المجرد لتعطى بالصيغة

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle. \tag{8.103}$$

متجه الكِت المعتمد على الزمن time dependent ket state vector يشير إلى الحالة الفيزيائية المعتمدة على الزمن. من خطية الصيغة (8.103) يمكن فصل المتغيرات و إجراء التكامل من على الزمن الإبتدائي، و الذي سنعتبره 0، إلى أي زمن t، أي أن

$$-i(\hat{H}/\hbar)dt = d|\psi(t)\rangle/|\psi(t)\rangle; \quad \Rightarrow \quad -i(\hat{H}/\hbar)\int_0^t dt' = \int_{|\psi(0)\rangle}^{|\psi(t)\rangle} d|\psi(t')\rangle/|\psi(t')\rangle,$$

لنصل إلى حل المعادلة المعتمدة على الزمن (8.103) و التي تصف التطور الزمني للنظام يعطى بـ

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle, \tag{8.104}$$

حيث $|\psi(0)\rangle$ هو الحل الإبتدائي للنظام عند $t = 0$. هذا يتفق مع الخطوات المتبعة في القسم (3.3) لدى فصل المتغيرات الزمانية و المكانية و بالأخص عند الحصول على الحل الكلي لمعادلة شرودنجر (3.21).

إن مؤثر التطور الزمني $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ يمكن أن يحلل بإستخدام مفكوك ماكلورين Maclaurin series لنحصل على

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{H}t/\hbar)^n}{n!}. \tag{8.105}$$

لأي مؤثر $\hat{A}$ لايعتمد صراحة على الزمن، فإنه الآن بإمكاننا تحديد الإعتماد الزمني لقيمته المتوقعة بإستخدام حل معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن و المعطى في متجه الحالة (8.104)، أي أن

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle(t) &= \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle, \\
&= \langle\psi(0)|e^{i\hat{H}^\dagger t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle, \\
&= \langle\psi(0)|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle, \\
&= \langle\psi(0)|\hat{A}(t)|\psi(0)\rangle,
\end{aligned}$$

حيث عرفنا المؤثر المعتمد على الزمن $\hat{A}(t)$ كالتالي

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \tag{8.106}$$

الخطوات السابقة التي إتبعناها لإثبات (8.106) تنص على أن القيمة المتوقعة للمؤثر $\hat{A}$ المستقل زمنياً و المقاسة (ضمير يعود إلى القيمة المتوقعة) في حالة معتمدة على الزمن $|\psi(t)\rangle$، يكافيء القيمة المتوقعة للمؤثر $\hat{A}(t)$ المعتمد على الزمن و المقاسة في حالة مستقلة زمنياً $|\psi(0)\rangle$.

هذا التكافؤ في المعالجة الرسمية لميكانيكا الكم ذو فائدة كبيرة حيث أنه من المناسب أن نجهز مجموعة من المتجهات المميزة كأساسات متعامدة و معايرة في الفضاء المجرد لمرة واحدة و بشكل نهائي دون الإكتراث بكيفية تغير هذه الأساسات مع الزمن. لدى تطبيقنا لهذا النهج من المعالجة الجبرية نكون طبقنا ما يسمى بتصور هايزنبرج Heisenberg picture. في المقابل إبقاء $\hat{A}$ مستقلة عن الزمن و إعتبار التطور الزمني للأساسات تعني تطبيق تصور شرودنجر Schrödinger picture. النتيجة النهائية هي نفسها لكلا التصورين. هذا مماثل لتوصيف دوران جسم بالنسبة لنظام من المحاور الإسنادية الثابتة أو توصيف جسم في حالة السكون بالنسبة لنظام من المحاور الإسنادية الدورانية. إن إختيارنا لأي من التصورين ما هو إلا قضية ملائمة.

إن معدل تغير المؤثر $\hat{A}(t)$ مع الزمن يحسب كالتالي

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{A}(t) &= \frac{d}{dt}\left(e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right),\\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\hat{H}e^{-i\hat{H}t/\hbar},\\ &= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar} - e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{H}\right),\\ &= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}(t) - \hat{A}(t)\hat{H}\right),\end{aligned}$$

لننتهي إلى أن

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{A}(t)\right]. \tag{8.107}$$

و التي تطابق العلاقة (4.32) و التي أستنتجناها في الباب الرابع لدى حسابنا لثوابت الحركة.

مثال (8.2): من التطبيقات الهامة للعلاقة (8.107) في الحركة التوافقية البسيطة هو تمثيل المؤثرات ككميات معتمدة على الزمن، كما هو الحال في تصور هايزنبرج. مثل المؤثر الهاميلتوني، الموقع، و الزخم كمؤثرات معتمدة على الزمن. و ضح كيف تتطابق هذه الصورة مع تصور شرودنجر. ♠

حل مثال (8.2): في الباب السادس مثلنا المؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$ حسب العلاقة (6.24)،

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega.$$

حيث أن $\hat{a}^+$ مؤثر الرفع الدرجي و $\hat{a}^-$ مؤثر الخفض الدرجي معرفان في (6.22) و (6.23)، على الترتيب، و يعتبران المؤثرات القاعدية و التي عن طريقهما نبني أي مؤثر في نظام الحركة التوافقية البسيطة. المؤثران $\hat{a}^+$ و $\hat{a}^-$ يتبعان علاقة التبديل (6.28) $[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1$. سنعتبر أن $\hat{a}^+(t)$ و $\hat{a}^-(t)$ معتمدتان على الزمن. بإستخدام النتيجة (8.107) و إستخدام علاقات التبديل (6.29) و (6.30)، على الترتيب، نستنتج المعادلات التفاضلية الزمنية

$$\frac{d}{dt}\hat{a}^+(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{a}^+(t)] = i\omega\hat{a}^+(t),$$

و

$$\frac{d}{dt}\hat{a}^-(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{a}^-(t)] = -i\omega\hat{a}^-(t).$$

حل هاتين المعادلتين التفاضليتين، بعد تطبيق الشروط الإبتدائية، يصبح

$$\hat{a}^+(t) = e^{i\omega t}\,\hat{a}^+(0); \qquad \text{and} \qquad \hat{a}^-(t) = e^{-i\omega t}\,\hat{a}^-(0).$$

عبرنا عن مؤثر الموقع في الصيغة (6.40) حيث نحصل على

$$\begin{aligned}\hat{x}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\hat{a}^+(t) + \hat{a}^-(t)\right],\\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\hat{a}^+(0)e^{i\omega t} + \hat{a}^-(0)e^{-i\omega t}\right].\end{aligned}$$

بنفس الطريقة يمكن كتابة مؤثر الزخم من (6.42) لنحصل على

$$\hat{p}(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left[\hat{a}^+(0)e^{i\omega t} - \hat{a}^-(0)e^{-i\omega t}\right].$$

يمكن التأكد بسهولة من أن $\hat{H}(t) = \hat{H}(0)$ لأن $\hat{a}^+(t)\hat{a}^-(t) = \hat{a}^+(0)\hat{a}^-(0)$ و الذي يعني أن النظام محافظ. أيضاً يمكن كتابة معادلة الحركة لمؤثر الموقع و الزخم مباشرة من (8.107)، حيث نحصل على

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{x}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}(t)\right], \\
&= \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}^2(t)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \hat{x}(t)\right] = \frac{i}{2m\hbar}\left[\hat{p}^2(t), \hat{x}(t)\right], \\
&= \frac{i}{2m\hbar}\left\{\hat{p}^2(t)\hat{x}(t) - \hat{x}(t)\hat{p}^2(t) + \hat{p}(t)\hat{x}(t)\hat{p}(t) - \hat{p}(t)\hat{x}(t)\hat{p}(t)\right\}, \\
&= \frac{i}{2m\hbar}\left\{\hat{p}(t)\left[\hat{p}(t), \hat{x}(t)\right] + \left[\hat{p}(t), \hat{x}(t)\right]\hat{p}(t)\right\}, \\
&= \frac{i}{2m\hbar}\left\{\hat{p}(t)(-i\hbar) + (-i\hbar)\hat{p}(t)\right\} = \frac{\hat{p}(t)}{m}.
\end{aligned}$$

نأخذ المشتقة الزمنية الثانية للموقع نحصل على

$$\frac{d^2\hat{x}(t)}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\hat{p}(t)}{dt}.$$

الآن نعوض عن $d\hat{p}(t)/dt$ مباشرة من (8.107)،

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{p}(t)\right] = -m\omega^2\hat{x}(t),$$

لنحصل على أن

$$\frac{d^2\hat{x}(t)}{dt^2} = -\omega^2\hat{x}(t),$$

و هي نفس معادلة الحركة الكلاسيكية. حلها هو

$$\hat{x}(t) = \hat{A}\cos\omega t + \hat{B}\sin\omega t.$$

هو نفس الحل الكلاسيكي مع إختلاف أن الثوابت ليست سوى مؤثرات غير معتمدة على الزمن. نطبق الشروط الإبتدائية على $\hat{x}(t)$ و $d\hat{x}(t)/dt$ لتحديد المؤثرات الثابتة كالتالي

$$\hat{x}(0) = \hat{A} \qquad \text{and} \qquad \left.\frac{d\hat{x}(t)}{dt}\right|_{t=0} = \frac{\hat{p}(0)}{m} = \omega\hat{B},$$

لننتهي إلى

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0)\cos\omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega}\sin\omega t.$$

بنفس الطريقة تماماً يمكن أن نكتب مؤثر الزخم المعتمد على الزمن على الصيغة

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0)\cos\omega t - m\omega\hat{x}(0)\sin\omega t.$$

يمكن للقاريء التأكد من تحقيق هذين التمثيلين للموقع و الزخم لعلاقة التبديل

$$[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = [\hat{x}(0), \hat{p}(0)] = i\hbar.$$

. كذلك إتفاقها مع التمثيلات بالمؤثرات الدرجية و تقابلها مع الميكانيكا الكلاسيكية. لاحظ على سبيل المثال أن $d\hat{p}(t)/dt = -m\omega^2\hat{x}(t)$ ليست سوى الصيغة (3.14) و التي تعتبر قانون نيوتن الثاني بصيغته الكلاسيكية، حسبما نصت نظرية إيرنفست Ehrenfest theorem. ♣

لاحظ أن المؤثر $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ واحدي، يرمز له بالرمز $\hat{U}_t$ و يسمى مؤثر التطور الزمني. إذاً

$$\hat{U}_t = e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \qquad \text{and} \qquad \hat{U}_t^\dagger = \hat{U}_t^{-1} = e^{i\hat{H}t/\hbar}. \tag{8.108}$$

أثره على متجه الكت عموماً

$$\hat{U}_t|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0+t)\rangle, \tag{8.109}$$

و على أي مؤثر $\hat{A}$ حسب علاقة التحويل التشابهي الواحدي

$$\hat{A}(t) = \hat{U}_t^\dagger \hat{A}\hat{U}_t = \hat{U}_t^{-1}\hat{A}\hat{U}_t. \tag{8.110}$$

سنرى أن هذه التحويلات تجري أيضاً على ديناميكية أخرى كالإنتقال المكاني و تبادل الزخم، و الدوران.

8.7.2 علاقة التبديل القانونية Canonical commutation relation

لنتكلم عن نظام في فضاء إقليدي ذو البعد الواحد. نتذكر علاقة التبديل (3.43) الطيبة الذكر بين مؤثري الموقع و الزخم $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$. هذه العلاقة تعتبر من أساسيات العلاقات التبديلية و التي تربط بين الكميات المترافقة قانونياً canonical conjugate quantities. نقصد بالكميات المترافقة قانونياً بالثنائيات التي ترتبط مع بعضها من خلال تحويلات فوريير Fourier transform duals of one another. كما رأينا في الباب الثالث، هذا ينطبق على الموقع و الزخم. كذلك على الزمن و الطاقة (التردد)، الإزاحة الزاوية و الزخم الزاوي، و الأمثلة كثيرة لكن هذا ما يهمنا في هذا المجال. من الجدير بالملاحظة أن مؤثرات هذه الثنائيات غير متزامنة و ترتبط كل ثنائية بعلاقة عدم يقين.

إن سبب تسمية العلاقة (3.43) بالقانونية يعود إلى الميكانيكا الكلاسيكية. إن علاقات التبديل الكمية ليست بالجديدة، بل يوجد ما يقابلها في الميكانيكا الكلاسيكية، فيما يعرف بأقواس بواسو Poisson bracket و التي لها أهمية كبيرة في الميكانيكا الهاميلوتونية Hamiltonian mechanics القائمة على الفضاء الطوري phase space. نقصد بالفضاء الطوري الفضاء المعرف على الموقع، الزخم، و الزمن. إن أقواس بواسو تستخدم للحصول على معادلات الحركة بطريقة مشابهة للعلاقة (8.107) و كذلك تُحَدِّد فئة الإحداثيات المستخدمة ما إذا كانت قانونية أم لا بطريقة مشابهة لعلاقة التبديل (3.43). إن أقواس بواسو تؤول إلى علاقات التبديل الكمية لو ضربناها فقط بالثابت $i\hbar$. فالعلاقة (3.43) كلاسيكياً تساوي الوحدة. السبب في الإختلاف بالثابت $i\hbar$ بين التبديلات الكلاسيكية و الكمية يعود إلى إكتشافنا الميكانيكا الأخص (الكلاسيكية) قبل الميكانيكا الأعم (الكمية). لو حدث أن إكتشفنا العالم المجهري أولاً و وضعنا أسس ميكانيكا الكم قبل الميكانيكا الكلاسيكية لكانت هذه الثوابت تساوي الوحدة.

لو قمنا بإعادة تدوير لقاعدة التبديل (3.43) نحصل على

$$[\hat{x},\hat{p}^n] = in\hbar\hat{p}^{n-1}; \qquad \text{and} \qquad [\hat{x}^n,\hat{p}] = in\hbar\hat{x}^{n-1}. \tag{8.111}$$

يمكن إثبات هاتين التبديلتين بطريقتين، إما بإستخدام علاقة التبديل (3.43) مع قاعدة التبديل

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}], \tag{8.112}$$

بشكل متكرر لـ n مرة، أو ببساطة التعويض $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ للعلاقة (8.111) في اليمين (أو $\hat{x} = i\hbar d/dp$ للعلاقة نفسها على اليسار)[5]. بغض النظر عن المعامل الثابت $i\hbar$ في الطرف الأيمن، فإن هذا الطرف يحوي مشتقات

[5] نتذكر أن علاقة التبديل $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ تعطى في العلاقة (3.43) تم إثباتها في الباب الثالث بإعتبار $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ أو $\hat{x} = i\hbar d/dp$. لكن هنا ننظر إلى العلاقة من وجهة نظر تناظرية بحتة و ليست جبرية.

تفاضلية لـ $\hat{p}^n$ و $\hat{x}^n$. مدفوعين من هذه الملاحظة، يمكن إعتبار أي دالة $G(\hat{p})$ و $F(\hat{x})$ تتكون من مفكوك من متسلسلة قوى لـ $\hat{p}$ و $\hat{x}$، على الترتيب. يمكن أن نعمم العلاقة (8.111) لنحصل على

$$[\hat{x}, G(\hat{p})] = i\hbar \frac{dG(\hat{p})}{d\hat{p}}; \qquad \text{and} \qquad [F(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{dF(\hat{x})}{d\hat{x}}. \tag{8.113}$$

علاقات التباديل (8.111) هي ناتج مباشر للعلاقة (3.43) و التي تؤسس لما يسمى بالتبديلات القانونية canonical commutators، و المؤدية إلى إستنتاج نعرفه تماماً ألا و هو أن أطياف $\hat{x}$ و $\hat{p}$ مستمرة. لكن كما هو ملاحظ فقد قيدنا أنفسنا في هذه العلاقات في بعد واحد. في الفضاءات المتعددة الأبعاد فإن الموقع و الزخم يصبح له مركبات مستقلة، و عليه نعمم علاقات التبديل القانونية لتصبح

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl} \quad [\hat{x}_k, \hat{x}_l] = 0 \quad \text{and} \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0, \tag{8.114}$$

و الذي تقتضي أن المركبة k لمؤثر الزخم في فضاء الإحداثيات يعطى بالصيغة

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{8.115}$$

لاحظ أن المؤشرات k و l يجريان على جميع المركبات الممكنة. على سبيل المثال لجسيم يتحرك في الفضاء الإقليدي ثلاثي البعد فإن $k, l = x, y, z$.

8.7.3 الإنتقال المكاني Spatial translations

لنقترح مؤثر الإنتقال المتناهي في الصغر infinitesimal translation $\hat{T}(dx)$ و الذي يحقق التالي

1. يعمل على نقل متجه كِت الموقع حسب القاعدة

$$\hat{T}(dx)|x\rangle = |x + dx\rangle, \tag{8.116}$$

حيث أهملنا قيمة الطور في المساواة أعلاه. واضح أن $|x\rangle$ ليست كِت مميز لـ $\hat{T}(dx)$.

2. إذا إعتبرنا أن الأساس $|\alpha\rangle$ معاير، فمن المنطقي أن الكِت $\hat{T}(dx)|\alpha\rangle$ تكون معايرة و هذا لايتحقق إلا إذا كان

$$\langle\alpha|\hat{T}^\dagger(dx)\hat{T}(dx)|\alpha\rangle = 1 = \langle\alpha|\alpha\rangle,$$

بمعنى أن $\hat{T}(dx)$ واحدية من أجل حفظ الضرب الداخلي للأساسات، و بالتالي حفظ الإحتمالية. إذاً

$$\hat{T}^\dagger(dx)\hat{T}(dx) = 1. \tag{8.117}$$

3. التأثير المتعاقب لـ $\hat{T}(dx_1)$ ثم $\hat{T}(dx_2)$ يعني الإنتقال بـ $dx_1 + dx_2$، حتى لو لم تكن dx_1 بنفس إتجاه dx_2. و عليه نقول أن

$$\hat{T}(dx_1)\hat{T}(dx_2) = \hat{T}(dx_1 + dx_2). \tag{8.118}$$

4. من المتوقع أن الإنتقال عكس الإتجاه يكافيء مقلوب الإنتقال الأصلي، أي أن

$$\hat{T}(-dx) = \hat{T}^{-1}(dx). \tag{8.119}$$

5. نتطلب أنه عندما $dx \to 0$ فإن الإنتقال يعطي مؤثر الوحدة، أي أن

$$\lim_{dx\to 0} \hat{T}(dx) = 1. \tag{8.120}$$

مما يعني أن $\hat{T}(dx)$ يجب أن يحوي dx من الرتبة الأولى، حيث أن $O(dx^2) \simeq 0$.

وعليه يمكن كتابة مؤثر الإنتقال المتناهي في الصغر، كالتالي

$$\hat{T}(dx) = 1 - i\hat{K}dx, \tag{8.121}$$

حيث $\hat{K}$ مؤثر هيرميشي. الصيغة (8.121) تحقق جميع الخواص المدرجة أعلاه. خاصية الواحدية تتحقق كالتالي

$$\begin{aligned}
\hat{T}^\dagger(dx)\hat{T}(dx) &= (1 + i\hat{K}^\dagger dx)(1 - i\hat{K}dx), \\
&= 1 - i(\hat{K} - \hat{K}^\dagger)dx + O(dx^2), \\
&\simeq 1.
\end{aligned}$$

بسبب تناهي dx في الصغر و هيرميشية $\hat{K}$ تحقق شرط الواحدية. الخاصية الثالثة تتحقق بنفس الطريقة أيضاً

$$\begin{aligned}
\hat{T}(dx_1)\hat{T}(dx_2) &= (1 - i\hat{K}dx_1)(1 - i\hat{K}dx_2), \\
&= 1 - i\hat{K}(dx_1 + dx_2) + O(dx^2) \\
&\simeq 1 - i\hat{K}(dx_1 + dx_2), \\
&\simeq \hat{T}(dx_1 + dx_2).
\end{aligned}$$

أيضاً الخاصية الرابعة تتحقق أيضاً

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{-1}(dx) &= (1 - i\hat{K}dx)^{-1}, \\
&= 1 + i\hat{K}dx + O(dx^2), \\
&\simeq 1 - i\hat{K}(-dx), \\
&\simeq \hat{T}(-dx).
\end{aligned}$$

لاحظ أيضاً من أعلاه، يمكن بسهولة إثبات حقيقة $\hat{T}^{-1}(dx) = \hat{T}^\dagger(dx)$. الخاصية الخامسة متحققة مباشرة من الفرضية (8.121).

نسلم بالعلاقة (8.121)، نتجه الآن لإيجاد علاقة أساسية بين المؤثرين $\hat{x}$ و $\hat{K}$. لو حسبنا

$$\hat{x}\hat{T}(dx)|x\rangle = \hat{x}|x + dx\rangle = x + dx|x + dx\rangle,$$

و

$$\hat{T}(dx)\hat{x}|x\rangle = x\hat{T}(dx)|x\rangle = x|x + dx\rangle.$$

بطرح العلاقتين نحصل على

$$\left(\hat{x}\hat{T}(dx) - \hat{T}(dx)\hat{x}\right)|x\rangle = dx|x + dx\rangle \simeq dx|x\rangle,$$

حيث عوضنا عن $|x + dx\rangle$ بإستخدام تعريف التفاضل للكِت $d|x\rangle/dx$ كالتالي

$$|x + dx\rangle = |x\rangle + \left(\frac{d|x\rangle}{dx}\right) dx,$$

و أهملنا الرتب العليا من dx في القيمة $dx|x+dx\rangle$. هذه النتيجة أيضاً يمكن الحصول عليها من (8.121)

$$dx|x+dx\rangle = dx\hat{T}(dx)|x\rangle = dx(1-i\hat{K}dx)|x\rangle \simeq dx|x\rangle.$$

لنستنتج على الفور أن

$$[\hat{x},\hat{T}(dx)] = dx, \tag{8.122}$$

بتعويض $\hat{T}(dx)$ من (8.121) في (8.122) نحصل على

$$dx = [\hat{x}, 1-i\hat{K}dx] = [\hat{x},1] - idx[\hat{x},\hat{K}] = -idx[\hat{x},\hat{K}],$$

لننتهي إلى علاقة التبديل

$$[\hat{x},\hat{K}] = i. \tag{8.123}$$

المؤثر $\hat{K}$ يطلق عليه مولد الإنتقال المتناهي في الصغر generator of the infinitesimal translation و كل ما نتطلبه فيه أن يكون هيرميشي و يحقق علاقة التبديل (8.123). لكننا نعلم بالفعل مؤثراً له هذه الصفات، ألا وهو $\hat{p}/\hbar$. لإضفاء صبغة رياضية لإستنتاجنا هذا، فإن الطرف الأيمن من علاقة التبديل (8.123) ليس سوى $i\hbar d\hat{K}/d\hat{p}$ حسب علاقة التبديل القانونية (8.113). نحصل إذاً على المعادلة التفاضلية

$$\frac{d\hat{K}}{d\hat{p}} = \frac{1}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \hat{K} = \frac{\hat{p}}{\hbar},$$

حيث مرة أخرى أهملنا الطور الناتج عن التكامل. هذا يعني أن مؤثر الزخم هو مولد الإنتقال المتناهي في الصغر. و بهذا يصبح مؤثر الإنتقال المتناهي في الصغر هو

$$\hat{T}(dx) = 1 - i\hat{p}dx/\hbar. \tag{8.124}$$

في ثلاث أبعاد يمكن أن نكتب مؤثر الإنتقال المتناهي في الصغر بالصورة

$$\hat{T}(d\mathbf{r}) = 1 - i\hat{\mathbf{p}}\cdot d\mathbf{r}/\hbar. \tag{8.125}$$

لحد الآن حددنا نقاشنا على الإنتقال المتناهي في الصغر. يمكننا الحصول على الإنتقال المتناهي finite translation بتراكب عدد كبير من الإنتقالات المتناهية في الصغر و المتعاقبة. لنعتبر الإنتقال المتناهي في بعد واحد بالمقدار Δx حسب قاعدة التأثير

$$\hat{T}(\Delta x)|x\rangle = |x+\Delta x\rangle. \tag{8.126}$$

بتراكب N إنتقال متناهي في الصغر بحيث نعتبر أن كل إنتقال $dx = \lim_{N\to\infty}\Delta x/N$ لنحصل على

$$\begin{aligned}\hat{T}(\Delta x) &= \lim_{N\to\infty}\left(\hat{T}(dx)\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left(1-i\hat{p}\,dx/\hbar\right)^N,\\ &= \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{i\hat{p}\Delta x/\hbar}{N}\right)^N,\end{aligned}$$

من حقيقة أن

$$e^X = \lim_{N\to\infty}\left(1+\frac{X}{N}\right)^N,$$

فإننا ننتهي إلى أن

$$\hat{T}(\Delta x) = e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar}. \tag{8.127}$$

في ثلاث أبعاد، فإن الإنتقال المتناهي

$$\hat{T}(\Delta \mathbf{r}) = e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\Delta\mathbf{r}/\hbar}. \tag{8.128}$$

لاحظ أن الإنتقال المتناهي بين نقطتين لاتعتمد على ترتيب المسار. هذا يعد من الخصائص الأساسية للإنتقال، الإنتقالات المتعاقبة بإتجهات مختلفة إبدالية.

كما برهنا سابقاً، فإن مؤثر الإنتقال المتناهي يؤثر على أي مؤثر $\hat{A}$ من خلال التحويلات الواحدية التشابهية

$$\hat{T}^{\dagger}(\Delta x)\hat{A}\hat{T}(\Delta x) = e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar}. \tag{8.129}$$

مؤثر الموقع $\hat{x}$ يتحول تحت تأثير الإنتقال المتناهي إلى

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{\dagger}(\Delta x)\hat{x}\hat{T}(\Delta x) &= e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\ \hat{x}\ e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar}, \\
&= e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\ \hat{x}\ \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{p}\Delta x/\hbar)^n}{n!}, \\
&= e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hbar)^n}{n!}\hat{x}\hat{p}^n(\Delta x)^n,
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا مفكوك تايلور للدالة الأسية. نستخدم العلاقة التبديلية (8.111) و المنبثقة من علاقة التبديل القانونية لنحصل على

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{\dagger}(\Delta x)\hat{x}\hat{T}(\Delta x) &= e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i/\hbar)^n}{n!}(\hat{p}^n\hat{x} + in\hbar\hat{p}^{n-1})(\Delta x)^n, \\
&= e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i/\hbar\hat{p}\Delta x)^n}{n!}\hat{x} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i/\hbar)^n}{n!}in\hbar\hat{p}^{n-1}(\Delta x)^n\right), \\
&= \hat{x} + e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i/\hbar)^{n-1}}{(n-1)!}\hat{p}^{n-1}(\Delta x)^n, \\
&= \hat{x} + e^{i\hat{p}\Delta x/\hbar}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{p}\Delta x/\hbar)^{n-1}}{(n-1)!}\right)\Delta x.
\end{aligned}$$

في الخطوة الأخيرة، و بالخصوص المجموع في الحد الثاني داخل ( ) في الطرف الأيمن، نجد أن الحد الأول من المجموع $n = 0$ يعطي في المقام $-1!$ و من المعروف أن مضروب العدد السالب يعطي مالانهاية $\pm\infty$ مما يعني أن حد المجموع الأول يعطي صفر. لذلك يبدأ المجموع من $n = 1$ و بالتالي يصبح المجموع بين ( ) كالتالي

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{p}\Delta x/\hbar)^{n-1}}{(n-1)!} &= \frac{(-i\hat{p}\Delta x/\hbar)^{-1}}{(-1)!} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-i\hat{p}\Delta x/\hbar)^{n-1}}{(n-1)!}, \\
&= 0 + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{p}\Delta x/\hbar)^n}{n!} = e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar},
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا حقيقة أن $\sum_{n=1}^{\infty} f(n-1) = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)$. ننتهي إلى أن تحويل مؤثر الموقع بإستخدام مؤثر الإنتقال

$$\hat{T}^{\dagger}(\Delta x)\hat{x}\hat{T}(\Delta x) = \hat{x} + \Delta x. \tag{8.130}$$

يمكن تعميم علاقة التحويل لتصبح

$$\hat{T}^{\dagger}(\Delta x)f(\hat{x})\hat{T}(\Delta x) = f(\hat{x} + \Delta x), \tag{8.131}$$

حيث $f(\hat{x})$ دالة لمؤثر الموقع. هذا مكافيء تماماً للتحويل من خلال مؤثر التطور الزمني (8.110). الأمر نفسه ينطبق على جميع التحويلات التناظرية الواحدية في ميكانيكا الكم، كالدوران على سبيل المثال. سوف لن نخوض في تحويلات الدوران قبل دراسة الزخم الزاوي لأن مؤثر الزخم الزاوي هو مولد الدوران.

8.8 أسئلة و تمارين

سؤال (8.4): بإستخدام المفاهيم الأساسية لتمثيلات ديراك، أجب عن مايلي:

(أ) أثبت أن مجموعة القيم المميزة $\{a_j\}_j$ لمؤثر هيرميشي $\hat{A}$ حقيقية.

(ب) أثبت أن $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

إعتبر مجموعة الأساسات $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ بحيث يتحقق $\hat{A}|\alpha_j\rangle = a_j|\alpha_j\rangle$. ♢

سؤال (8.5): المؤثرات العكس هيرميشية anti-hermitian أو skew-hermitian تعرف كالتالي

$$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}.$$

(أ) أثبت أن مجموعة القيم المميزة $\{a_j\}_j$ للمؤثر $\hat{A}$ تخيلية.

(ب) بين أن التبديل لمؤثرين هيرميشيين يعطي مؤثر عكس هيرميشي. ماذا عن التبديل لمؤثرين عكس هيرميشيين؟

إعتبر مجموعة الأساسات $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ بحيث يتحقق $\hat{A}|\alpha_j\rangle = a_j|\alpha_j\rangle$. الفقرة (أ) تقتضي أن القيمة المتوقعة للمؤثرات عكس هيرميشية تخيلية. ♢

سؤال (8.6): من تعريف $\phi(p)$ في (8.82) أثبت أنه يمكن كتابتها على الشكل

$$\phi(p) = \int dx \langle p|x\rangle \psi(x),$$

و بمقارنتها مع معادلة الحزم الموجية، أوجد صيغة لـ $\langle p|x\rangle$. ♢

سؤال (8.7): من تعريف مؤثر الحيود $\Delta\hat{A}$ في العلاقة (8.94) و بإعتبار أن المؤثر $\hat{A}$ هيرميشي، أثبت أن مؤثر الحيود $\Delta\hat{A}$ هيرميشي. ♢

سؤال (8.8): لديك المؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ معرفان كالتالي

$$\hat{A} = a\frac{d}{dx}; \qquad \text{and} \qquad \hat{B} = e^{bx},$$

حيث a و b ثوابت مركبة. أجب على مايلي

(أ) إحسب علاقة التبديل $[\hat{A}, \hat{B}]$ و أوجد علاقة عدم اليقين في قياس المؤثرين.

(ب) إذا كانت $|k\rangle$ كِت مميز لـ$\hat{A}$، بحيث أن $\hat{A}|k\rangle = k|k\rangle$. أثبت أن الكِت $\hat{B}|k\rangle$ أيضاً كِت مميز لـ$\hat{A}$ و إحسب قيمته المميزة.

(ج) ناقش أنه يمكن كتابة $\hat{B}|k\rangle = c|k+ab\rangle$ و إحسب قيمة c إذا علمت أن مجموعة الكِت $|k\rangle$ معيرة و متعامدة.

لاحظ أن $\hat{A}$ يشابه مؤثر الزخم في فضاء الموقع لذلك من أمثلة الدوال المميزة $\exp(\pm ikx)$. كذلك لاحظ أن علاقة التبديل $[\hat{A}, \hat{B}]$ تشبه علاقة التبديل لمؤثرات الرفع و الخفض مع المؤثر الهاميلتوني في الحركة التوافقية البسيطة في بعد واحد. ♢

سؤال (8.9): أثبت أنه إذا كان $f(\hat{a}^+)$ دالة كثيرة حدود لـمؤثر الرفع $\hat{a}^+$، فإن

$$\hat{a}^- f(\hat{a}^+)|0\rangle = \frac{df(\hat{a}^+)}{d\hat{a}^+}|0\rangle.$$

تذكر أن

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle.$$

حيث أن $|n\rangle$ مجموعة الأساسات للمتذبذب التوافقي البسيط. (مساعدة: يمكن كتابة $f(\hat{a}^+)$ بالمفكوك $f(\hat{a}^+) = \sum_n c_n(\hat{a}^+)^n$ و تحتاج إثبات علاقة التبديل $[\hat{a}^-, (\hat{a}^+)^n] = n(\hat{a}^+)^{n-1}$.) ♢

سؤال (8.10): إستخدم نتيجة السؤال (9) لإثبات أن

$$e^{\lambda\hat{a}^-} f(\hat{a}^+)|0\rangle = f(\hat{a}^+ + \lambda)|0\rangle.$$

إستخدم حقيقة أن $f(x+c) = \sum_n \frac{c^n}{n!} f^{(n)}(x)$ لحل السؤال. ♢

سؤال (8.11): إستخدم نتيجة السؤال (10) لإثبات علاقة المؤثر

$$e^{\lambda\hat{a}^-} f(\hat{a}^+) e^{-\lambda\hat{a}^-} = f(\hat{a}^+ + \lambda).$$

لاحظ أن علاقة المؤثر أعلاه تنطبق لدى تأثيرها على أي حالة كِت عشوائية. ♢

سؤال (8.12): في الحركة التوافقية البسيطة نعلم أن علاقة عدم اليقين تُعْطى في (6.46) وأقل قيمة لها عند الحالة الأرضية. لكن توجد حالة من الجمع الخطي linear combination state تُعْرف بحالات الترابط coherent states تكون علاقة عدم اليقين عندها قيمة صغرى. هذه الحالة المترابطة، كما وجد، حالة مميزة لمؤثر الخفض $\hat{a}^-$، أي

$$\hat{a}^-|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle.$$

حيث أن λ أي رقم مركب.

(أ) إحسب $\langle\varphi|\hat{a}^+\hat{a}^-|\varphi\rangle$ و التي تعطي عدد الكمات في حالة الترابط.

(ب) إحسب $\langle x\rangle$، $\langle x^2\rangle$، $\langle p\rangle$، و $\langle p^2\rangle$ للحالة $|\varphi\rangle$. إستخدم العلاقات (6.40) إلى (6.43).

(ج) إحسب Δx و Δp و تحقق من أن $\Delta x\Delta p = \hbar/2$.

(د) كأي متجه كِت، فإن $|\varphi\rangle$ يمكن أن يكتب حسب علاقة المفكوك الطيفي

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle,$$

أثبت أن المعاملات

$$c_n = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} c_0.$$

(هـ) إحسب قيمة c_0 من المعايرة لـ $|\varphi\rangle$ و أثبت أنها تساوي $e^{-|\lambda|^2/2}$.

(و) بإستخدام السؤال (9) أثبت أنه يمكن أيضاً أن نكتب

$$|\varphi\rangle = c_0 e^{\lambda \hat{a}^+} |0\rangle.$$

(ز) في الحالة المعتمدة على الزمن

$$|n\rangle_t = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle,$$

أثبت أن $|\varphi(t)\rangle$ تبقى حالة مميزة لـ $\hat{a}^-$ لكن القيم المميزة تتطور مع الزمن

$$\lambda(t) = e^{-i\omega t} \lambda.$$

هذا يعني أن حالة الترابط تستمر ليبقى عدم اليقين قيمة صغرى ♢

سؤال (8.13): إستخدم معادلة الحركة العامة للمؤثرات (8.107) لإيجاد صيغة لمؤثر الموقع المعتمد على الزمن $\hat{x}(t)$، بحيث أن

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2(t)}{2m} + mg\hat{x}(t).$$

النظام يمثل جسم كتلته m يتحرك تحت تأثير الثقالة. ♢

سؤال (8.14): إفترض معادلة هاميلتون تصف متذبذب توافقي بسيط في بعد واحد تحت تأثير مجال كهربائي خارجي $\mathcal{E}$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2(t)}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2(t) - e\mathcal{E}\hat{x}(t).$$

إحسب معادلات الحركة للمؤثرات $\hat{x}(t)$ و $\hat{p}(t)$ بإستخدام العلاقة العامة (8.107) و علاقة التبديل القانونية $[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar$. تحقق ما إذا كانت معادلة الحركة ليست سوى المعادلة الكلاسيكية. إوجد صيغة لـ $\hat{x}(t)$ و $\hat{p}(t)$ بمعلومية $\hat{x}(0)$ و $\hat{p}(0)$. أثبت أيضاً أن

$$[\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)] \neq 0, \qquad \text{for } t_1 \neq t_2.$$

هذا يعني أن المؤثرات الإبدالية عند نفس الزمن لايجب أن تكون كذلك عند أزمنة مختلفة. ♢

سؤال (8.15): إثبت علاقة الإنتقال الواحدية التشابهية (8.130) لمؤثر الموقع بطريقة مختلفة و فقط بإستخدام علاقات التبديل (8.113). ♢

9

تمثيل المصفوفات Matrix representation

الإكتشاف الأصلي لميكانيك الكم كان على يد العالم وارنر هايزنبرج W. Heisenberg. لقد قام هايزنبرج بربط الكميات الفيزيائية كالموقع x و الزخم p بترتيبات مربعة square arrays من الأرقام و أقترح لها قاعدة ضرب للحصول على كميات مثل x^2. ماكس بورن Max Born إستنتج على الفور هذه الترتيبات ليست سوى مصفوفات matrices و قام هو و العالم P. Jordan بوضع الصيغ الأساسية لميكانيكا الكم مع هايزنبرج. إن إكتشاف معادلة شرودنجر أتت لاحقاً، تبعها مباشرة صيغ رياضية أكثر تجريداً في الفضاءات المتجهة و المؤثرات على يد ديراك، و التي درسناها في الباب الثامن. إذاً في هذا الكتاب، و لأسباب تعليمية محضة، لم نلتزم بالترتيب الزمني لتطور ميكانيكا الكم. حيث درسنا بداية تصور شرودنجر، ثم أعدنا صياغة الكم حسب تمثيلات ديراك المجردة، و في هذا الباب سنعيد تمثيل ميكانيكا الكم في الفضاء المتجه، متجهات و مؤثرات، على شكل مصفوفات، كما إقترح هايزنبرج.

إن تمثيل المصفوفات ذو فائدة كبيرة لأنه يسمح لنا التعامل مع كميات فيزيائية ليس لها ما يقابلها في الميكانيكا التقليدية، كالحركة المعزلية للجسيمات، على سبيل المثال. بالإضافة إلى ذلك، فإن تمثيل المصفوفات ينقل ميكانيكا الكم من صورتها الرمزية إلى صورتها الرقمية. بالتالي تصبح لنا مقدرة للحصول على القيم الرقمية للحالات الفيزيائية و القيم المتوقعة بإستخدام قواعد الضرب و الجمع للمصفوفات.

9.1 تمثيل المصفوفات العام بإستخدام الأساسات
General matrix representation using basis

بمعرفة أي مجموعة أساسات من متجهات فضاء الكِت، يمكن أن نمثل أي مؤثر $\hat{A}$ بمصفوفة مربعة و ذلك بإستخدام علاقة التمام (8.45)، حيث نكتب $\hat{A}$ على الشكل

$$\begin{aligned}\hat{A} &= 1\hat{A}1 = \left(\sum_{i=1}^{N}|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\right)\hat{A}\left(\sum_{j=1}^{N}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\right), \\ &= \sum_{i,j=1}^{N}|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|,\end{aligned}$$

هنا المؤشران i و j تسري على N قيمة ممكنة خلال جميع الأعداد الكمية الممكنة للنظام. مما يعني أنه لدينا N^2 قيمة ممكنة للعدد $\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle$ و الذي سنطلق عليه إسم عنصر المصفوفة matrix element و نكتبه على الشكل

$$A_{ij} \equiv \langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle, \tag{9.1}$$

و بالتالي نكتب المؤثر $\hat{A}$ بالصيغة

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{N} A_{ij}|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|. \tag{9.2}$$

نؤكد مرة ثانية أن النقاش ينطبق على أي مؤثر $\hat{A}$ و أن مجموعة الأساسات من متجهات الكِت ليست كِت مميزة لـ $\hat{A}$ و إلا لأعطى التعريف (9.1) القيم المميزة.

يمكن ترتيب عنصر المصفوفة $\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle$ بمصفوفة مربعة أبعادها $N \times N$ بحيث أن المؤشر i يعطي ترتيب الصفوف raw order و المؤشر j يعطي ترتيب الأعمدة column order. أي أن

$$\hat{A} \to \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_N\rangle \\ \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_N\rangle \end{bmatrix}. \tag{9.3}$$

إن الرمز $\hat{A} \to \mathbf{A}$ يعني أننا مثلنا المؤثر $\hat{A}$ بمصفوفة $\mathbf{A}$. كثيراً من الكتب تكتب تمثيل الصيغة الرياضية بأي صورة جبرية ممكنة بالعلامة $\doteq$ و الذي تعني "التمثيل بـ" أو represented by. لذلك يمكن أن نكتب $\hat{A} \doteq \mathbf{A}$.

من العلاقة (8.37) نستطيع أن نكتب

$$\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_j|\hat{A}^\dagger|\alpha_i\rangle^*.$$

في حالة أن $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$، أي هيرميشية، نكتب

$$\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\rangle^* \quad \Rightarrow \quad A_{ij} = A^*_{ji}, \tag{9.4}$$

هذا يعني أن المصفوفة الهيرميشية هي التي تحقق عناصرها الشرط (9.4) أي أن المرافق المركب complex conjugate لمنقول transpose عنصر المصفوفة يساوي عنصر المصفوفة نفسه. نقول إذاً

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}^{\intercal *} = \mathbf{A}, \tag{9.5}$$

حيث أن $\mathbf{A}^\intercal$ منقول transpose المصفوفة $\mathbf{A}$. منقول المصفوفة يعني تبديل الصفوف بالأعمدة.

لو تحدثنا عن ضرب مؤثرين $\hat{A} = \hat{B}\hat{C}$ فإنه حسب العلاقة (9.1) يمثل الضرب بعنصر المصفوفة على الشكل

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_i|\hat{B}\hat{C}|\alpha_j\rangle = \sum_k \langle\alpha_i|\hat{B}|\alpha_k\rangle\langle\alpha_k|\hat{C}|\alpha_j\rangle, \\ &= \sum_k \hat{B}_{ik}\hat{C}_{kj}. \end{aligned}$$

كل ما فعلناه هو إدخال مؤثر الوحدة، حسب علاقة التمام (8.45)، بين $\hat{B}$ و $\hat{C}$. واضح جداً أن عنصر المصفوفة A_{ij} ينتج عن ضرب الصف الذي ترتيبه i في $\hat{B}$ بالعمود الذي ترتيبه j في $\hat{C}$. وعليه نكتب ضرب المؤثرات هو نفسه ضرب المصفوفات، أي

$$\hat{A} = \hat{B}\hat{C} \quad \to \quad \mathbf{A} = \mathbf{BC}. \tag{9.6}$$

بالطريقة نفسها، نستطيع تمثيل أي متجه فضاء كِت بمصفوفة. هذه المرة المصفوفة عمودية. للتوضيح، قلنا أنه أي متجه كِت يكتب بدلالة أي مجموعة أساسات من متجهات فضاء الكِت حسب العلاقة (8.5)، حيث أن المعاملات

b_j تُعْطى من العلاقة (8.46)، لنحصل في النهاية على العلاقة (8.47). لذلك فإن عناصر مصفوفة متجه الكِت $|\varphi\rangle$ ليست سوى المعاملات $b_j = \langle\alpha_j|\varphi\rangle$. لدينا N عنصر من هذه المعاملات، تترتب في عمود واحد على الشكل

$$|\varphi\rangle \rightarrow \boldsymbol{\varphi} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle\alpha_N|\varphi\rangle \end{bmatrix}. \tag{9.7}$$

لو إعتبرنا متجه الكِت $|\chi\rangle$ ناتج عن التحويل الخطي $\hat{A}|\varphi\rangle$، فإننا نكتبه بشكل رسمي على الشكل

$$|\chi\rangle = \hat{A}|\varphi\rangle \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\chi} = \mathbf{A}\boldsymbol{\varphi}. \tag{9.8}$$

حسب تمثيل المصفوفات نكتب

$$\begin{aligned} |\chi\rangle \rightarrow \boldsymbol{\chi} &= \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_N\rangle \\ \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_N\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle\alpha_N|\varphi\rangle \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|\varphi\rangle + \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\varphi\rangle + \cdots \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_N\rangle\langle\alpha_N|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|\varphi\rangle + \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\varphi\rangle + \cdots \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_N\rangle\langle\alpha_N|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|\varphi\rangle + \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\varphi\rangle + \cdots \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_N\rangle\langle\alpha_N|\varphi\rangle \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{N}\langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\varphi\rangle \\ \sum_{j=1}^{N}\langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{N}\langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\varphi\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\hat{A}|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle\alpha_N|\hat{A}|\varphi\rangle \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

و الذي يعطي متجه الكِت $|\chi\rangle$ على شكل مصفوفة عمودية $\boldsymbol{\chi}$.

لو أردنا تمثيل متجه البرا $\langle\chi|$ بالمصفوفات، فإننا يجب علينا أولاً التذكر أن متجه البرا هذا ناتج عن التحويل الخطي $\langle\varphi|\hat{A}^\dagger = \langle\chi|$. حسب العلاقة (9.5) فإن $\hat{A}^\dagger$ يقابله في المصفوفات $\mathbf{A}^{\intercal *}$. هذا يجعلنا نستنتج مباشرة أن تمثيل التحويل الخطي (9.8) في ما يقابله في فضاء البرا يصبح

$$\langle\chi| = \langle\varphi|\hat{A}^\dagger \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\chi}^{\intercal *} = \boldsymbol{\varphi}^{\intercal *}\mathbf{A}^{\intercal *} = (\mathbf{A}\boldsymbol{\varphi})^{\intercal *}. \tag{9.9}$$

لاحظ أن ترتيب الضرب للمصفوفات تغير للحصول على مصفوفة أفقية $\boldsymbol{\chi}^{\intercal *}$ لتمثل متجه البرا $\langle\chi|$. هذا يتضح بشكل كبير إذا اردنا تمثيل أي متجه برا $\langle\varphi|$ فإننا نستخدم علاقة التقابل (8.6) في العلاقة (8.47)، لنحصل على

$$\langle\varphi| = \sum_j \left(\langle\alpha_j|\varphi\rangle\right)^* \langle\alpha_j| = \sum_j \left(\langle\varphi|\alpha_j\rangle\right) \langle\alpha_j|. \tag{9.10}$$

لذلك فإن عناصر مصفوفة متجه البرا $\langle\varphi|$ ليست سوى المعاملات $\langle\varphi|\alpha_j\rangle = \langle\alpha_j|\varphi\rangle^*$. إذاً لدينا N عنصر من هذه المعاملات، تترتب في صف واحد على الشكل

$$\langle\varphi| \rightarrow \boldsymbol{\varphi}^{\intercal *} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle^* & \langle\alpha_2|\varphi\rangle^* & \cdots & \langle\alpha_N|\varphi\rangle^* \end{bmatrix}, \tag{9.11}$$

$$= \begin{bmatrix} \langle\varphi|\alpha_1\rangle & \langle\varphi|\alpha_2\rangle & \cdots & \langle\varphi|\alpha_N\rangle \end{bmatrix}. \tag{9.12}$$

لهذا فإن الضرب الداخلي $\langle\chi|\varphi\rangle$ يمكن أن يكتب على الشكل

$$\begin{aligned}
\langle\chi|\varphi\rangle &= \langle\chi|1|\varphi\rangle = \langle\chi|\left(\sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\right)|\varphi\rangle, \\
&= \sum_j \langle\chi|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\varphi\rangle = \sum_j \left(\langle\alpha_j|\chi\rangle^*\right)\langle\alpha_j|\varphi\rangle, \\
&= \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\chi\rangle^* & \langle\alpha_2|\chi\rangle^* & \cdots & \langle\alpha_N|\chi\rangle^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle\alpha_N|\varphi\rangle \end{bmatrix}, \\
&= \boldsymbol{\chi}^{\intercal *}\varphi.
\end{aligned}$$

لاحظ إننا ساوينا الضرب الداخلي لمتجهات الفضاء بالضرب الداخلي للمصفوفات، و لم نستعمل السهم $\rightarrow$ أو $\doteq$ لتمثيل العملية الجبرية. هذا صحيح لأن الضرب الداخلي في كلا التمثيليين يعطي نفس النتيجة، وهي قيمة قياسية لاتتغير بالتحويلات الخطية. عموماً، الضرب الداخلي يمثل بالمصفوفات على الشكل

$$\langle\chi|\varphi\rangle \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\chi}^{\intercal *}\,\varphi. \tag{9.13}$$

بالمقابل فإن تمثيل الضرب الخارجي بالمصفوفات يصبح من السهل التنبأ به ليكون

$$|\varphi\rangle\langle\chi| \quad \rightarrow \quad \varphi\,\boldsymbol{\chi}^{\intercal *}. \tag{9.14}$$

إن الضرب الخارجي يعطي مؤثر، حسب تمثيل المصفوفات المؤثر مصفوفة أبعادها $N \times N$، ناتج عن ضرب مصفوفة عمودية بأخرى أفقية حسب التالي

$$\begin{aligned}
|\varphi\rangle\langle\chi| &\rightarrow \varphi\,\boldsymbol{\chi}^{\intercal *}, \\
&= \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle\alpha_N|\varphi\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\chi\rangle^* & \langle\alpha_2|\chi\rangle^* & \cdots & \langle\alpha_N|\chi\rangle^* \end{bmatrix}, \\
&= \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle\langle\alpha_1|\chi\rangle^* & \langle\alpha_1|\varphi\rangle\langle\alpha_2|\chi\rangle^* & \cdots & \langle\alpha_1|\varphi\rangle\langle\alpha_N|\chi\rangle^* \\ \langle\alpha_2|\varphi\rangle\langle\alpha_1|\chi\rangle^* & \langle\alpha_2|\varphi\rangle\langle\alpha_2|\chi\rangle^* & \cdots & \langle\alpha_2|\varphi\rangle\langle\alpha_N|\chi\rangle^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle\alpha_N|\varphi\rangle\langle\alpha_1|\chi\rangle^* & \langle\alpha_N|\varphi\rangle\langle\alpha_2|\chi\rangle^* & \cdots & \langle\alpha_N|\varphi\rangle\langle\alpha_N|\chi\rangle^* \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

بقي أن نذكر حالتين خاصتين من نقاشنا أعلاه:

أولاً: إذا أردنا تمثيل مؤثر كمية رصودة $\hat{Q}$ بمصفوفة و ذلك بإستخدام مجموعة كِت المميزة لها فإن عنصر المصفوفة Q_{ij} يصبح، حسب (9.1)، كالتالي

$$Q_{ij} = \langle\alpha_i|\hat{Q}|\alpha_j\rangle = q_j\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = q_j\,\delta_{ij}, \tag{9.15}$$

حيث إستخدمنا علاقة المعادلة المميزة (8.42) و علاقة التعامد العيارية (8.44). و بالتالي فإن الصيغة (9.2) ستؤول إلى (8.51). إن عنصر المصفوفة $Q_{\alpha\beta}$ في العلاقة (9.15) يساوي صفر إلا إذا كان $\alpha = \beta$. اي

أننا نحصل على مصفوفة قطرية diagonal matrix عناصرها عبارة عن القيم المميزة. أي أن

$$\hat{Q} \to \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & q_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & q_N \end{bmatrix}. \tag{9.16}$$

بنفس الوقت فإن أساسات الكِت تمثل بمصفوفة عمودية عناصرها أصفاراً، ما عدا الصف الذي يمثل ترتيب الحالة الكمية للكِت، و الذي يساوي الوحدة. هذا يتضح من العلاقة (9.7)، بإستبدال الكِت $|\varphi\rangle$ بأحد الأساسات، فإننا نجد أن

$$|\alpha_1\rangle \to \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, |\alpha_2\rangle \to \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \ldots, |\alpha_N\rangle \to \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{9.17}$$

يمكن التحقق بسهولة أن تمثيل الأساسات (9.17) معاير و متعامد و يحقق علاقة التعامد العيارية (8.44)، و يحقق كذلك العلاقة المميزة (8.42) مع المؤثر $\hat{Q}$ الذي يُعْطى في العلاقة (9.16).

ثانياً: إذا كانت أبعاد أساسات الكِت لانهائية infinite dimension ket basis، أي أن $N \to \infty$، فإن مصفوفة المؤثر (9.3) تصبح لانهائية الأبعاد

$$\hat{A} \to \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots \\ \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

كذلك الحال لمصفوفة متجه فضاء الكِت (9.7) تصبح أيضاً لانهائية الأبعاد

$$|\varphi\rangle \to \boldsymbol{\varphi} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\varphi\rangle \\ \langle\alpha_2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{bmatrix}.$$

إن هذا لايغير أي شيء في العمليات الجبرية للضرب الداخلي و الخارجي عن المصفوفات المتناهية. من أشهر الأساسات الغير نهائية، والتي تستعمل بكثرة من أجل تمثيل المؤثرات و الحالات الفيزيائية على شكل مصفوفات، أساسات الحركة التوافقية البسيطة. إن لانهائية أبعاد أساسات الحركة التوافقية البسيطة يعود إلى إمتداد الجهد إلى ملانهاية. من الأساسات اللانهائية أيضاً مجموعة الدوال المميزة للمؤثر الهاميلتوني لجهد البئر اللانهائي. مرة أخرى إمتداد الجهد إلى مالانهاية أدى إلى الحصول على الأبعاد الغير متناهية للأساسات.

مثال (9.1): لديك مجموعة الأساسات التالية $\{|1\rangle, |2\rangle\}$، و المؤثر $\hat{D}$، بحيث قاعدة تأثيره على الأساسات كالتالي

$$\hat{D}|1\rangle = -i|2\rangle; \quad \text{and} \quad \hat{D}|2\rangle = i|1\rangle.$$

أوجد تمثيل $\hat{D}$ على شكل مصفوفة و أثبت انه هيرميشي. ♠

حل مثال (9.1): واضح أن الأساسات $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ ليست متجهات كِت مميزة لـ $\hat{D}$، لأن قاعدة تأثيره على

الأساسات لاتتبع العلاقة المميزة (8.42). بما أنه لدينا إثنين من الأساسات فإن $\hat{D}$ ستمثل بمصفوفة مربعة متناهية أبعادها 2×2. من العلاقة (9.3) فإننا نكتب $\hat{D}$ على الشكل

$$\begin{aligned}\hat{D} \to \mathbf{D} &= \begin{bmatrix} \langle 1|\hat{D}|1\rangle & \langle 1|\hat{D}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{D}|1\rangle & \langle 2|\hat{D}|2\rangle \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} -i\langle 1|2\rangle & i\langle 1|1\rangle \\ -i\langle 2|2\rangle & i\langle 2|1\rangle \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

للتحقق ما إذا كانت $\hat{D}$ هيرميشية أم لا، نستخدم العلاقة (9.5)، أي

$$\mathbf{D}^{\intercal *} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix} = \mathbf{D}.$$

إذاً $\mathbf{D}^{\intercal *} = \mathbf{D}$ مما يعني أن $\hat{D} = \hat{D}^\dagger$ و بالتالي $\hat{D}$ هيرميشي. ♣

مثال (9.2): بإستخدام الأساسات المناسبة في فضاء المتذبذب التوافقي البسيط، مثل مؤثر الرفع $\hat{a}^+$ و المعرف في (6.22) بمصفوفة حسب قاعدة تأثيره المعطاة في (6.31). مثل أول 4×4 من المصفوفة. ♠

حل مثال (9.2): سنعتبر مجموعة متجهات كِت المميزة في فضاء المتذبذب التوافقي البسيط تعطى بـ $\{|n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$، و هي مجموعة غير منتهية. هذا يعني أن $\hat{a}^+$ سيمثل بمصفوفة لانهائية الأبعاد. حسب العلاقة (6.31) فإن قاعدة تأثير $\hat{a}^+$ تعطى بـ

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

عنصر المصفوفة $a^+_{mn} = \langle m|\hat{a}^+|n\rangle$ سيعطى بـ

$$a^+_{mn} = \langle m|\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}.$$

هذا يعني أن جميع عناصر المصفوفة أصفار ما عدا العناصر التي تزيد رتبة الصف فيها عن رتبة العمود بواحد. اي العناصر $a^+_{21} = \sqrt{1}$، $a^+_{32} = \sqrt{2}$، $a^+_{43} = \sqrt{3}$، ... إلخ. و بذلك يعطى مؤثر الرفع كمصفوفة بـ

$$\mathbf{a}^+ = \begin{bmatrix} a^+_{11} & a^+_{12} & a^+_{13} & a^+_{14} & \cdots \\ a^+_{21} & a^+_{22} & a^+_{23} & a^+_{24} & \cdots \\ a^+_{31} & a^+_{32} & a^+_{33} & a^+_{34} & \cdots \\ a^+_{41} & a^+_{42} & a^+_{43} & a^+_{44} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

يُمْكِن أن نحقق تأثير المصفوفة $\mathbf{a}^+$ على الحالة $|2\rangle$ ، أي

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} = \sqrt{3} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix},$$

أي أن مصفوفة مؤثر الرفع $\mathbf{a}^+$ تزيد من رتبة الأساس $|2\rangle$ من الصف الثالث $(n=2)$ إلى الصف الرابع $(n=3)$ لنحصل على الأساس $|3\rangle$ مضروباً بـ $\sqrt{3}$ ، و الذي يتفق مع قاعدة تأثير $\hat{a}^+$. ♣

9.2 تمثيل المصفوفات بإستخدام متجهات حالة عامة
Matrix representation using generic state vectors

في المثالين السابقين رأينا حالة بناء مصفوفات لمؤثرات بإستخدام متجهات كت المميزة و التي تطيع المعادلة المميزة و تعتبر أساسات في الفضاء. لو عممنا لأي مؤثر $\hat{A}$ له مجموعة متجهات كت مميزة لكنها غير أساسات $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{N}$ بحيث يحقق المعادلة المميزة

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle, \tag{9.18}$$

حيث أن $\{a_n\}_{n=1}^{N}$ تمثل مجموعة القيم المميزة التي تقابل مجموعة المتجهات المميزة $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{N}$. لقد إخترنا المؤشر n ليدل على ترتيب متجه الكت المميز و القيمة المميزة و له قيم تتراوح من 1 إلى N متوافقاً مع أبعاد الأساسات $\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^{N}$ و التي تستخدم لبناء عناصر المصفوفة لـ $\hat{A}$ حسب العلاقة (9.1). مجموعة المتجهات المميزة $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{N}$ ترتبط مع الأساسات $\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^{N}$ من خلال العلاقة المعروفة

$$|\psi_n\rangle = \sum_j b_{jn}|\alpha_j\rangle. \tag{9.19}$$

حيث أن b_{jn} وحدة بناء عناصر المصفوفة العمودية لمتجه الكت المميز $|\psi_n\rangle$ و التي تُعْطى من العلاقة

$$b_{jn} \equiv \langle\alpha_j|\psi_n\rangle, \tag{9.20}$$

و التي لها خاصية الترافق التالية

$$b_{jn}^{*} = \langle\alpha_j|\psi_n\rangle^{*} = \langle\psi_n|\alpha_j\rangle = b_{nj}. \tag{9.21}$$

يمكن إضافة علاقة التمام (8.45) إلى الطرف الأيسر من المعادلة المميزة (9.18) لتصبح بالصيغة

$$\sum_j \hat{A}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle,$$

ومن ثم ضرب الطرفين بالبرا $\langle\alpha_i|$ لنكتب المعادلة المميزة (9.18) بصيغة الموترات (عناصر المصفوفة) على الشكل

$$\sum_j A_{ij}b_{jn} = a_n b_{in}. \tag{9.22}$$

نبسط العلاقة أكثر خلال الخطوات التالية

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_j A_{ij}b_{jn} - a_n b_{in}, \\ &= \sum_j A_{ij}b_{jn} - \sum_j a_n b_{jn}\delta ij, \\ &= \sum_j \left(A_{ij} - a_n\delta_{ij}\right) b_{jn}. \end{aligned}$$

الخطوة الأخيرة تكافيء في تمثيل المصفوفات التالي

$$\begin{bmatrix} A_{11}-a_n & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{11}-a_n & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN}-a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1n} \\ b_{2n} \\ \vdots \\ b_{Nn} \end{bmatrix} = 0.$$

و هي تمثل معادلة خطية متجانسة لمجموعة عناصر المصفوفة العمودية لمتجهات الكت المميزة $\{b_{jn}\}$ و معاملاتها coefficients هي $(A_{ij} - a_n\delta_{ij})$. كي نحصل على حل غير صفري nontrivial solution لعلاقة المصفوفة أعلاه لابد أن تتحقق علاقة المحدد التالية

$$\det|A_{ij} - a_n\delta_{ij}| = 0. \tag{9.23}$$

العلاقة (9.23) تكتب بالمصفوفات على الصيغة

$$\det|\mathbf{A} - a\mathbf{I}| = 0, \tag{9.24}$$

حيث أن $\mathbf{I}$ هي مصفوفة الوحدة. هذه من أنجع الطرق الرياضية لحساب القيم المميزة و المتجهات المميزة للمؤثرات المُمَثّلة بالمصفوفات المتناهية. ينتج عن حل المعادلة (9.24) كثيرة حدود صفرية لـ a_n من الدرجة N جذورها تعطي مجموعة القيم المميزة $\{a_n\}_{n=1}^{N}$ و التي تُعطى في العلاقة المميزة (9.18). للمصفوفات غير المتناهية هذه الطريقة تصبح صعبة التطبيق و تكافيء حل معادلة شرودنجر.

بإعتبار المؤثرات الهيرميشية، أي أن $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$، فإن قيم المؤثر المميزة $\{a_n\}$ حقيقية و مجموعة متجهات كت المميزة له $\{|\psi_n\rangle\}_n$ متعامدة و معايرة، أي تحقق

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}. \tag{9.25}$$

بإدخال الواحد من علاقة التمام (8.45) بين البرا و الكِت في (9.25) و إستخدام التعريف (9.20)، يمكن تمثيل علاقة التعامد و المعايرة (9.25) بصيغة الموترات (عناصر المصفوفة) على الشكل

$$\sum_j b^*_{jn}\, b_{jm} = \sum_j b_{nj}\, b_{jm} = \delta_{nm}. \tag{9.26}$$

سنستفيد من علاقة التعامد الأخيرة في بناء المصفوفات الواحدية و التي تمنحنا طريقة إضافية للحصول على مصفوفة قطرية من مصفوفة غير قطرية، و بالتالي تحديد القيم المميزة و مجموعة المتجهات المميزة.

مثال (9.3): في المثال (9.1) أوجد مجموعة الكِت المميزة و مجموعة القيم المميزة للمؤثر $\hat{D}$ و بين أنه يمكن كتابته على شكل مصفوفة قطرية مكافئة له. كذلك أثبت أن المؤثر $\hat{D}$ مع متجهاته و قيمه المميزة يحقق العلاقة (8.51). ♠

حل مثال (9.3): نحسب القيم المميزة لـ $\mathbf{D}$ بحل معادلة كثيرة الحدود الخاصة characteristic polynomial و التي تستنتج من المعادلة المميزة. للتوضيح، دعنا نرمز إلى مجموعة المتجهات المميزة eigen vectors بـ $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2\}$ يقابلها مجموعة القيم المميزة $\{q_1, q_2\}$، بحيث تتحقق المعادلة المميزة

$$\mathbf{D}\,\mathbf{d}_i = q_i\,\mathbf{d}_i; \quad \forall i = 1, 2.$$

ينتج عن هذه المعادلة المميزة معادلة كثيرة الحدود الخاصة، و التي تكتب بـ

$$\det(\mathbf{D} - q\mathbf{I}) = 0,$$

حيث أن $\mathbf{I}$ هي مصفوفة الوحدة.

$$\left|\begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} q & 0 \\ 0 & q \end{bmatrix}\right| = \begin{vmatrix} -q & i \\ -i & -q \end{vmatrix} = q^2 - 1 = 0,$$

و الذي يعطي القيم المميزة الممكنة و التي تحقق معادلة كثيرة الحدود الخاصة $q = \pm 1$. و عليه فإن مجموعة القيم المميزة $\{1, -1\}$. لاحظ أن القيم المميزة حقيقية، هذا يعود إلى أن المؤثر $\mathbf{D} \to \hat{D}$ هيرميشي. لنعتبر أن

$$\mathbf{d}_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}; \quad \text{and} \quad \mathbf{d}_2 = \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}.$$

من العلاقة المميزة $\mathbf{D}\mathbf{d}_1 = q_1\mathbf{d}_1 = \mathbf{d}_1$ نحصل على

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix},\\ \begin{bmatrix} iy_1 \\ -ix_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

و الذي نستنتج منه أن $y_1 = -ix_1$. إذاً نكتب $\mathbf{d}_1$ لتصبح

$$\mathbf{d}_1 = x_1\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}.$$

لنعاير $\mathbf{d}_1$ لتحديد قيمة x_1. شرط المعايرة هو

$$\begin{aligned}1 &= \mathbf{d}_1^{\intercal *}\mathbf{d}_1 = x_1^*\begin{bmatrix} 1 & i \end{bmatrix}x_1\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix},\\ &= |x_1|^2(1\times 1 + i\times(-i)),\\ &= 2|x_1|^2.\end{aligned}$$

أو نكتب

$$|x_1|^2 = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad x_1 = \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}}.$$

حيث δ_1 هو قيمة الطور و الذي لم نهمله هنا. و عليه تصبح $\mathbf{d}_1$ كالتالي

$$\mathbf{d}_1 = \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}.$$

بنفس الخطوات و من العلاقة المميزة $\mathbf{D}\mathbf{d}_2 = q_2\mathbf{d}_2 = -\mathbf{d}_2$ نحصل على

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} &= -\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix},\\ \begin{bmatrix} iy_2 \\ -ix_2 \end{bmatrix} &= -\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

و الذي نستنتج منه أن $y_2 = ix_2$. إذاً نكتب $\mathbf{d}_2$ لتصبح

$$\mathbf{d}_2 = x_2\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}.$$

لنعاير $\mathbf{d}_2$ لتحديد قيمة x_2. شرط المعايرة هو

$$\begin{aligned}1 &= \mathbf{d}_2^{\intercal *}\mathbf{d}_2 = x_2^*\begin{bmatrix} 1 & -i \end{bmatrix}x_2\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix},\\ &= |x_2|^2(1\times 1 + (-i)\times i),\\ &= 2|x_2|^2.\end{aligned}$$

أو نكتب

$$|x_2|^2 = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad x_2 = \frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}}.$$

حيث δ_2 هو قيمة الطور و الذي لم نهمله هنا. و عليه تصبح $\mathbf{d}_2$ كالتالي

$$\mathbf{d}_2 = \frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}.$$

يمكن التحقق من أن $\mathbf{d}_1$ و $\mathbf{d}_2$ متعامداتين حيث أن الضرب الداخلي يعطي صفراً دائماً، أي

$$\mathbf{d}_1^{\intercal *} \mathbf{d}_2 = \mathbf{d}_2^{\intercal *} \mathbf{d}_1 = 0,$$

و ذلك لأي قيم عشوائية للطور δ_1 و δ_2. لاحظ أن قيم الطور لاتؤثر على المعايرة و التعامد. إن أهمية الطور تنبع لدى وصف حالة فيزيائية ما كحالة خلط (جمع خطي) للحالتين الجزئيتين $|d_1\rangle$ و $|d_2\rangle$. حيث أن فرق الطور $|\delta_1 - \delta_2|$ تلعب دوراً هاماً في التداخل الحاصل بين الحالتين الجزئيتين لدى حساب دالة توزيع الإحتمالية. مصفوفة المؤثر $\hat{D}$، و التي تعطى بـ$\mathbf{D}$ تكتب على شكل مصفوفة قطرية كالتالي

$$\begin{aligned} \hat{D} \to \mathbf{D} &= \begin{bmatrix} \langle d_1|\hat{D}|d_1\rangle & \langle d_1|\hat{D}|d_2\rangle \\ \langle d_2|\hat{D}|d_1\rangle & \langle d_2|\hat{D}|d_2\rangle \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} \langle d_1|d_1\rangle & -\langle d_1|d_2\rangle \\ \langle d_2|d_1\rangle & -\langle d_2|d_2\rangle \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

يمكن التحقق أيضاً أن المؤثر $\hat{D}$ مع متجهاته و قيمه المميزة يحقق العلاقة (8.51)، كالتالي

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= q_1 \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_1^{\intercal *} + q_2 \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_2^{\intercal *}, \\ &= +1 \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} \frac{e^{-i\delta_1}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & i \end{bmatrix} + (-1) \frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}} \frac{e^{-i\delta_2}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -i \end{bmatrix}, \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

حصلنا على نفس المصفوفة $\mathbf{D}$ بتطبيق علاقة متجهات الفضاء و المؤثرات (8.51) لكن بإستخدام ما يقابلها من تمثيل المصفوفات. ♣

9.3 المصفوفات الواحدية و التحويلات التشابهية
Unitary matrices and the similarity transformation

تحدثنا سابقاً عن المؤثرات الواحدية و عرفناها في العلاقة (8.22) و بينا أن من خواص تحويلاتها للأساسات أنها لاتغير الضرب الداخلي، كما في (8.24). بالإضافة إلى ذلك عُبِّر عن هذه المؤثرات رياضياً بالصيغ (8.25) و (8.26). سنرى في هذا القسم كيف نمثل المؤثرات الواحدية بمصفوفات، و سنقوم بدراسة خصائصها الجبرية و فوائدها تطبيقاتها في التحويلات الواحدية التشابهية unitary similarity transformation.

9.3.1 بناء المصفوفات الواحدية The construction of unitary matrices

لنعتبر مصفوفة $\mathbf{U}$ و التي عناصرها تعطى بالعلاقة

$$U_{jn} = b_{jn}, \tag{9.27}$$

حيث أن b_{jn} تُعْطى بالعلاقة (9.20). ينتج عن هذا أن

$$(U_{jn})^\dagger = U^*_{nj} = b^*_{jn}. \tag{9.28}$$

يمكن أن التعبير عن عنصر المصفوفة لحاصل الضرب $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}$ كالتالي

$$\begin{aligned}
\left(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}\right)_{nm} &= \sum_{ij} U^*_{ni} A_{ij} U_{jm} = \sum_i b^*_{in} \sum_j A_{ij} b_{jm}, \\
&= \sum_i b^*_{in} \underbrace{\sum_j \langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle \langle \alpha_j | \psi_m \rangle}_{\langle \alpha_i | \hat{A} | \psi_m \rangle = a_m \langle \alpha_i | \psi_m \rangle} = a_m \underbrace{\sum_i b^*_{in}\, b_{im}}_{\delta_{nm}}, \\
&= a_m \delta_{nm}.
\end{aligned}$$

حيث عوضنا عن U_{jm} و U^*_{ni} من العلاقتين (9.27) و (9.28)، على الترتيب. كذلك إستخدمنا علاقة الموترات (9.22) و علاقة الموترات للتعامد (9.26). إن المصفوفة الناتجة عن $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}$ عناصرها هي $a_m\delta_{nm}$ أي أنها مصفوفة قطرية، عناصر القطر فيها ليست سوى القيم المميزة. إذاً هذا الضرب يحول المصفوفة $\mathbf{A}$ إلى مصفوفة قطرية $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}$ تعطى بـ

$$\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} \to \mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_N \end{bmatrix}. \tag{9.29}$$

من خصائص المصفوفة $\mathbf{U}$ أنها واحدية unitary أي تحقق العلاقة (8.22)، حيث أن

$$\begin{aligned}
\left(\hat{U}^\dagger \hat{U}\right)_{nm} &= \sum_j U^*_{nj} U_{jm} = \sum_j b^*_{jn}\, b_{jm}, \\
&= \delta_{nm}, \qquad (9.30)
\end{aligned}$$

حيث أن عنصر المصفوفة δ_{nm} يعني مصفوفة الوحدة. لهذا فإن

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}.$$

أي تحقق العلاقة (8.22). وبالتالي يمكن تمثيل المصفوفة الواحدية و التي تحول المؤثر $\hat{A}$ إلى مصفوفة قطرية بإستخدام متجهات كت المميزة له $b^{(j)}_\alpha = \langle \alpha | \psi_j \rangle$ حسب الصيغة

$$\hat{U} \to \mathbf{U} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1N} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{N1} & b_{N2} & \cdots & b_{NN} \end{bmatrix}. \tag{9.31}$$

أو بشكل أكثر صراحة نكتب المصفوفة الواحدية على الشكل

$$\hat{U} \to \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\psi_1\rangle & \langle\alpha_1|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_1|\psi_N\rangle \\ \langle\alpha_2|\psi_1\rangle & \langle\alpha_2|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_2|\psi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\alpha_N|\psi_1\rangle & \langle\alpha_N|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\alpha_N|\psi_N\rangle \end{bmatrix}. \tag{9.32}$$

إن التحويل $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{U}$ يسمى التحويل التشابهي similarity transformation. المصفوفات المتشابهه لها نفس الرتبة rank، المحدد determinant، الأثر أو النزرة trace، القيم المميزة eigenvalues، كثيرة الحدود المميزة الناتجة عن (9.25) characteristic polynomial، كثيرة الحدود الدنيا minimal polynomial، و المقسومات الأولية elementary divisors.

9.3.2 الخصائص الجبرية للتحويلات الواحدية
Algebraic characteristics of unitary transformation

من حقيقة علاقة المحدد

$$\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B}),$$

فإننا نجد أن

$$\det(\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger) = \det(\mathbf{U})\det(\mathbf{U}^\dagger) = \det(\mathbf{I}) = 1.$$

لكن نعلم من تمثيلاتنا للمصفوفة الواحدية

$$\det(\mathbf{U}^\dagger) = \det(\mathbf{U})^*; \qquad \Rightarrow \qquad \det(\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger) = |\det(\mathbf{U})|^2 = 1,$$

و يالتالي نستنتج أن

$$|\det(\mathbf{U})|^2 = 1. \tag{9.33}$$

و عليه للتحويل $\mathbf{D} = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}$ فإننا نجد أن

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{D}) &= \det(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}) = \det(\mathbf{U})\det(\mathbf{U})^*\det(\mathbf{A}), \\ &= |\det(\mathbf{U})|^2\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{A}), \end{aligned}$$

أي أن التحويل الواحدي لايغير المحدد. هذا ينطبق أيضاً على الأثر trace حيث أنه من حقيقة أن

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{AB}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{BA}),$$

فإن

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}(\mathbf{D}) &= \mathrm{Tr}(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger), \\ &= \mathrm{Tr}(\mathbf{A}). \end{aligned}$$

أي أن الأثر لايتغير تحت التحويلات الواحدية.

من الفوائد الجمة للتحويل الواحدي و الحصول على مصفوفة قطرية هو تطبيقها في العمليات الجيرية للمصفوفات و التي تتضمن رفع المصفوفة إلى قوة ما. لو أخذنا مؤثر $\hat{A}$ يُمَثَّل بمصفوفة غير قطرية $\mathbf{A}$، فإن حساب $\hat{A}^n$ من خلال ضرب المصفوفة $\mathbf{A}$ بنفسها n سيكون معقداً جداً، خصوصاً إذا كانت المصفوفة ذات أبعاد كبيرة أو غير نهائية. في المقابل رفع المصفوفة القطرية لأي قوة يتضمن فقط رفع العناصر القطرية إلى إلى تلك القوة. لو وجدنا

مصفوفة واحدية $\mathbf{U}$ تحول $\mathbf{A}$ إلى مصفوفة قطرية $\mathbf{D}$ من خلال التحويل الواحدي $\mathbf{D} = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}$، فإننا يمكن كتابة $\mathbf{A}$ بمعلومية $\mathbf{D}$ كالتالي

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger$$

و بالتالي فإن $\mathbf{A}^n$ تصبح

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^n &= \underbrace{\left(\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\right)\left(\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\right)\left(\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\right)\cdots\left(\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\right)}_{n\text{مرة}}, \\
&= \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger\cdots\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\dagger, \\
&= \mathbf{U}\mathbf{D}^n\mathbf{U}^\dagger.
\end{aligned}$$

أو على الشكل

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{U}\begin{pmatrix} d_1^n & 0 & 0 \\ 0 & d_2^n & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}\mathbf{U}^\dagger,$$

حيث أن d_1 ، d_2 ، ...إلخ هي العناصر القطرية و التي تمثل القيم المميزة للمصفوفة القطرية $\mathbf{D}$. من أهم التطبيقات تأتي على سبيل المثال، لا الحصر، في معامل التطور الزمني $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ يمكن حساب مفكوك ماكلورين له حسب العلاقة (8.105) لنحصل على

$$\begin{aligned}
e^{-i\hat{H}t/\hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{H}t/\hbar)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it/\hbar)^n}{n!}\left(\hat{H}\right)^n, \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it/\hbar)^n}{n!}U\left(\hat{H}'\right)^n U^\dagger, \\
&= U\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\hat{H}'t/\hbar)^n}{n!}\right]U^\dagger, \\
&= U\begin{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-iE_1t/\hbar)^n}{n!} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-iE_2t/\hbar)^n}{n!} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-iE_3t/\hbar)^n}{n!} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}U^\dagger,
\end{aligned}$$

حيث أن $\hat{H}' = \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}$ هاميلتون قطري بقيم مميزة E_1، E_2، ... إلخ. هذا النقاش ينطبق أيضاً على معاملات التطور الأخرى، كمعامل التطور المكاني $e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar}$، الذي يؤدي إلى إنتقال الحالة بإزاحة Δx، أو معامل التطور الدوراني $e^{-i\hat{L}\Delta\theta/\hbar}$ و الذي يؤدي إلى دوران الحالة بإزاحة زاوية $\Delta\theta$.

9.3.3 تبديل الأساسات Change of basis

من التطبيقات الهامة للمؤثرات الواحدية هي التحويلات الخطية المعطاة في العلاقة (8.23) و التي ينتج عنها تحويل مجموعة الأساسات الكاملة المتعامدة $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ إلى مجموعة أساسات أخرى في فضاء آخر. هذا التحويل يطلق عليه إسم تغيير الأساسات change of basis أو تغيير التمثيل change of representation. بما أن التحويل (8.23) يحفظ الضرب الداخلي، كما أثبتنا في (8.24)، فمن السهل إثبات أن الأساسات الجديدة كاملة و متعامدة و معايرة. لنعتبر أن مؤثر $\hat{U}$، بحقق شرط الواحدية $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$, و يحول مجموعة الأساسات $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ إلى الأساسات $\{|\beta_j\rangle\}_j$، حسب المعادلة التالية

$$|\beta_j\rangle = \hat{U}|\alpha_j\rangle. \tag{9.34}$$

الأساسات الجديدة $\{|\beta_j\rangle\}_j$ كاملة، متعامدة، و معايرة تحت التحويل الخطي الواحدي. في المقابل، من الممكن بناء المؤثر الواحدي $\hat{U}$ بمعلومية مجموعة الأساسات الأصلية $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ و مجموعة الأساسات الجديدة $\{|\beta_j\rangle\}_j$ حسب العلاقة

$$\hat{U} = \sum_j |\beta_j\rangle\langle\alpha_j|, \tag{9.35}$$

و التي يمكننا إثباتها مباشرة مع علاقة التمام (8.45). يمكننا التحقق من التحويل (9.34) بدراسة تأثير $\hat{U}$ على متجه الكِت $|\alpha_i\rangle$ كالتالي

$$\begin{aligned}\hat{U}|\alpha_i\rangle &= \sum_j |\beta_j\rangle\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = \sum_j |\beta_j\rangle\delta_{ji},\\ &= |\beta_i\rangle,\end{aligned}$$

أي أنه يحقق التحويل (9.34). يمكن التحقق من شرط الواحدية للمؤثر في (9.35) كالتالي

$$\begin{aligned}\hat{U}^\dagger\hat{U} &= \left(\sum_i |\beta_i\rangle\langle\alpha_i|\right)^\dagger \sum_j |\beta_j\rangle\langle\alpha_j|,\\ &= \sum_{ij} |\alpha_i\rangle\langle\beta_i|\beta_j\rangle\langle\alpha_j| = \sum_{ij} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|\delta_{ij},\\ &= \sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = 1.\end{aligned}$$

تحققت الواحدية بشرط تحقق خاصية التعامد لـ $\{|\beta_j\rangle\}_j$ و التمام لـ $\{|\alpha_j\rangle\}_j$. لاحظ أن الضرب $\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$ يتحقق بإستخدام تعامد $\{|\alpha_j\rangle\}_j$ و تمام $\{|\beta_j\rangle\}_j$.

مثال (9.4): في المثالين (9.1) و (9.3) إحسب المصفوفة الواحدية و تحقق من الشرط (8.22)، و تحقق من أن المصفوفة الواحدية تحول $\mathbf{D}$ إلى مصفوفة قطرية أقطارها هي القيم المميزة كما في (9.29). ♠

حل مثال (9.4): في هذه الحالة نقول أنه توجد مصفوفة واحدية $\mathbf{U}$ تحقق $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\,\mathbf{U} = \mathbf{D}'$، حيث أن $\mathbf{D}'$ مصفوفة قطرية تشبه مصفوفة المؤثرات الرصودة في (9.16). إن عناصر الأقطار تمثل القيم المميزة. نبني المصفوفة الواحدية من (9.31) أو (9.32) و نستخدم المتجهات المميزة $\mathbf{d}_1$ و $\mathbf{d}_2$ كأعمدة لـ $\mathbf{U}$، حيث أن $\mathbf{d}_1 = \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-i\end{bmatrix}$ و $\mathbf{d}_2 = \frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix}$. و بذلك تصبح $\mathbf{U}$ كالتالي

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix}\frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} & \frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}}\\ -i\frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} & i\frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}e^{i\delta_1} & e^{i\delta_2}\\ -ie^{i\delta_1} & ie^{i\delta_2}\end{bmatrix}.$$

نتحقق من الشرط (8.22) كالتالي

$$\begin{aligned}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}e^{-i\delta_1} & ie^{-i\delta_1}\\ e^{-i\delta_2} & -ie^{-i\delta_2}\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}e^{i\delta_1} & e^{i\delta_2}\\ -ie^{i\delta_1} & ie^{i\delta_2}\end{bmatrix},\\ &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\left(e^{-i\delta_1}\right)\left(e^{i\delta_1}\right)+\left(ie^{-i\delta_1}\right)\left(-ie^{i\delta_1}\right) & \left(e^{-i\delta_1}\right)\left(e^{i\delta_2}\right)+\left(ie^{-i\delta_1}\right)\left(ie^{i\delta_2}\right)\\ \left(e^{-i\delta_2}\right)\left(e^{i\delta_1}\right)+\left(-ie^{-i\delta_2}\right)\left(-ie^{i\delta_1}\right) & \left(e^{-i\delta_2}\right)\left(e^{i\delta_2}\right)+\left(-ie^{-i\delta_2}\right)\left(ie^{i\delta_2}\right)\end{bmatrix},\\ &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+1 & e^{i(\delta_2-\delta_1)}-e^{i(\delta_2-\delta_1)}\\ e^{-i(\delta_2-\delta_1)}-e^{-i(\delta_2-\delta_1)} & 1+1\end{bmatrix},\\ &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}.\end{aligned}$$

إذاً نستنتج أن $\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}^{-1}$. سنحسب الآن التحويل التشابهي $\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{D}\,\mathbf{U}$، كي نحصل على المصفوفة قطرية كالتالي

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{D}\mathbf{U} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} e^{-i\delta_1} & ie^{-i\delta_1} \\ e^{-i\delta_2} & -ie^{-i\delta_2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} e^{i\delta_1} & e^{i\delta_2} \\ -ie^{i\delta_1} & ie^{i\delta_2} \end{bmatrix}, \\
&= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} e^{-i\delta_1} & ie^{-i\delta_1} \\ e^{-i\delta_2} & -ie^{-i\delta_2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{i\delta_1} & -e^{i\delta_2} \\ -ie^{i\delta_1} & -ie^{i\delta_2} \end{bmatrix}, \\
&= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

أي حصلنا على مصفوفة قطرية عناصرها القيم المميزة 1 و -1. ♣

9.4 ملخص Summary

نلخص الخصائص الهامة للمؤثرات الهيرميشية المُمَثّلة بمصفوفة متناهية كالتالي:

1. أي مؤثر يمكن أن يمثل بمصفوفة بإستخدام مجموعة أساسات. أبعاد هذه المصفوفة تعتمد على أبعاد الأساسات.

2. أي مصفوفة هيرميشية $\hat{A}$ يمكن أن تتقطرن diagonalized بإستخدام التحويلات الواحدية. عناصر المصفوفة القطرية الناتجة أعداد حقيقية على طول القطر تمثل مجموعة القيم المميزة، و الباقي أصفار.

3. إن مجموعة القيم المميزة الحقيقية تسمى بطيف المؤثر و نحتاج أن تكون مختلفة كي نتحاشى قضية الإنحلال degeneracy.

4. إن القيم المميزة هي جذور للمعادلة العامة secular equation (9.24). إن رتبة المعادلة تساوي أبعاد المصفوفة للمؤثر $\hat{A}$.

5. إذا إعتبرنا المجموعة $\{\hat{A}_i\}_{i=1}^{N}$ عبارة عن مجموعة من N مصفوفة هيرميشية إبدالية، فإن لهذه المجموعة مجموعة مشتركة من الأساسات و التي يمكن أن تستخدم لقطرنة هذه المصفوفات بنفس الوقت simultaneously diagonalized. في هذه الحالة المتجهات المميزة تُعَرَّف بمعلومية القيم المميزة المتزامنة. أي متجهين مميزين يتعامدان إذا إختلفت قيمهم المميزة.

6. أي زوج غير إبدالي من المصفوفات الهيرميشية لا يمكن قطرنتهما بنفس الوقت.

7. أخيراً، سنسرد هذه النظرية دون التطرق لبرهانها الرياضي، لكنها ستكون مرجع هام في الأبواب اللاحقة. إذا كانت $|a\rangle$ كِت مميز للمؤثر $\hat{A}$ بقيمة مميزة a ، و $\hat{B}$ أي مؤثر (بشكل عام غير هيرميشي)، بحيث يحقق علاقة التبديل $[\hat{A}, \hat{B}] = b\hat{B}$، حيث b ثابت، فإن $\hat{B}|a\rangle \propto |a + b\rangle$.

يمكن ملاحظة المادة الأخيرة في الحركة التوافقية البسيطة و بالإخص على المؤثرات الدرجية و التي لها علاقة تبديل مشابهة مع الهاميلتون. بقي أن نقول أن ما ذكر ينطبق على فضاء هيلبرت الغير نهائي خاصة إذا الفضاء تمدد spanned بأساسات مستمرة و غير متناهية nondenumerable مثل أساسات الموقع و الزخم ذات الأطياف المستمرة. قد يحدث بعض الخصوصية لبعض التفاعلات و التي تكون عندها المواد المسرودة أعلاه غير صالحة للتطبيق. عندئذٍ يجب أن نبتكر صياغة رياضية خاصة لهذا التفاعل.

9.5 أسئلة و تمارين

سؤال (9.1): أوجد تمثيل المصفوفات لـ x و x^2 للمتذبذب التوافقي البسيط. تحتاج إلى العلاقات (6.40) و (6.41) و تمثيل المؤثرات الدرجية كمصفوفات. إحتفظ فقط بالركن المربع الذي يحوي العناصر الأولى لمصفوفة 4×4. ♢

سؤال (9.2): أوجد تمثيل المصفوفات لـ $\hat{p}$ و $\hat{p}^2$ للمتذبذب التوافقي البسيط. تحتاج إلى العلاقات (6.42) و (6.43). إستخدم تمثيل المؤثرات الدرجية $\hat{a}^+$ و $\hat{a}^-$ كمصفوفات في السؤال السابق. إحتفظ فقط بالركن المربع الذي يحوي العناصر الأولى لمصفوفة 4×4. ♢

سؤال (9.3): لديك الحالة الأرضية للحركة التوافقية البسيطة $|0\rangle$ تعطى بالمصفوفة العمودية

$$|0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

إحسب الحالات $|1\rangle$، $|2\rangle$، $|3\rangle$. تحتاج لحساب مؤثر الرفع $\hat{a}^+$ إلى عدة قوى. بما أن $\hat{a}^+$ مصفوفة لانهائية، إحتفظ فقط بالركن المربع الذي يحوي العناصر الأولى لمصفوفة 4×4. ♢

سؤال (9.4): إذا أعطيت متجه الحالة للحركة التوافقية البسيطة، ممثل بالمصفوفة العمودية

$$|\Psi\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

إحسب الكميات التالية:

(أ) $\langle H \rangle$ لهذه الحالة.

(ب) $\langle x \rangle$، $\langle x^2 \rangle$، $\langle p \rangle$، $\langle p^2 \rangle$، لهذه الحالة.

(ج) إحسب الخطأ $(\Delta x)^2$ و $(\Delta p)^2$.

إستخدم النتائج في الفقرة (ب) لحساب المطلوب في الفقرة (ج). ♢

سؤال (9.5): لديك المصفوفة التالية

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -3 & \sqrt{\frac{19}{4}} e^{i\pi/3} \\ \sqrt{\frac{19}{4}} e^{-i\pi/3} & 6 \end{pmatrix}.$$

(أ) أثبت أن **A** هيرميشية.

(ب) إحسب القيم المميزة لـ **A**.

(ج) إحسب المتجهات المميزة لـ **A**.

(د) أوجد المصفوفة الواحدية **U** و الذي تحول **A** إلى مصفوفة قطرية.

لتحديد المصفوفة الواحدية تأكد من أن المتجهات المميزة أساسات أم لا. ♢

سؤال (9.6): لديك المصفوفة التالية

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

إحسب القيم المميزة و المتجهات المميزة لها. ♢

سؤال (9.7): إفترض مصفوفة عشوائية هيرميشية **A**. أثبت أن

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{N} A_{ii},$$

ليس سوى مجموع القيم المميزة لـ **A**. (مساعدة: إستخدم حقيقة أن $\mathrm{Tr}(\mathbf{ABC}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{CAB}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{BCA})$). ♢

سؤال (9.8): إفترض مصفوفتين هيرميشيتين **A** و **B** إبداليتين، أي أن $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. لتكن **U** مصفوفة واحدية تحول **A** إلى مصفوفة قطرية. بين أنه إذا كانت القيم المميزة لـ**A** جميعها مختلفة، فإن نفس **U** تحول أيضا **B** إلى مصفوفة قطرية. (أبسط طريقة للبرهان إخذ مصفوفة متناهية، لنقل مصفوفة 4×4 و القيام بالإثبات بشكل صريح). ♢

سؤال (9.9): إعتبر نظام له ثلاث حالات معينة three-level system يُعْطى الهاميلتون له بالتمثيل المصفوفي

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix},$$

حيث a، b، و c أرقام حقيقية (إعتبر $a - c \neq \pm b$).

(أ) إذا بدأ النظام من الحالة

$$|\alpha_2(0)\rangle \to \boldsymbol{\alpha}_2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

فما هو $|\alpha_2(t)\rangle$؟

(ب) إذا بدأ النظام من الحالة

$$|\alpha_3(0)\rangle \rightarrow \boldsymbol{\alpha}_3(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

فما هو $|\alpha_3(t)\rangle$؟

تحتاج إلى حساب معامل التطور الزمني. ♢

سؤال (9.10): إعتبر نظام ذو ثلاث حالات three-level system يُعْطى الهاميلتون له بالتمثيل المصفوفي

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

يوجد مؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ رصودان، و يمثلان بالمصفوفتين التاليتين

$$\mathbf{A} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{B} = \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

حيث ω، λ، و μ أرقام حقيقية و موجبة.

(أ) أوجد القيم المميزة و المتجهات المميزة المعايرة لـ **H**، **A**، و **B**.

(ب) إفترض النظام إبتدأ من الحالة المختلطة

$$|\psi(0)\rangle \rightarrow \boldsymbol{\psi}(0) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix},$$

حيث $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$. إحسب القيم المتوقعة (عند $t = 0$) لـ$\hat{H}$، $\hat{A}$ و $\hat{B}$.

(ج) ما هو $|\psi(t)\rangle$؟ إذا قست الطاقة لهذه الحالة (عند زمن t)، ماهي القيم التي يمكن أن نحصل عليها، مع الإحتمالية لكل قيمة؟ أجب عن هذا السؤال أيضاً لـ $\hat{A}$ و $\hat{B}$.

تحتاج إلى حساب معامل التطور الزمني. ♢

10

The orbital angular momentum الزخم الزاوي المداري

الزخم الزاوي بشكل عام من الكميات الهامة في الفيزياء الكلاسيكية و الذي لا يقل أهمية أيضاً في الفيزياء الكمية. لقد رأينا في الباب السابع أهمية الزخم الزاوي المداري لدى دراسة ديناميكا الأنظمة تحت تأثير الجهود المركزية، حيث وجدنا أن الزخم الزاوي لهذه الأنظمة محفوظ. إن فكرة تكمية الزخم الزاوي المداري ظهرت مع نموذج بوهر لذرة الهيدروجين كما رأينا في القسم (1.8)، و التي تم إثباتها لاحقاً في تجربة شتيرن-جيرلاخ كما في الشكل (1.25). بالإضافة إلى ذلك فإن تكمية الزخم الزاوي تلعب دوراً هاماً في وصف دوران الجزيئات، حركة الإلكترونات في الذرات، و حركة النيوكلونات في الأنوية. لهذا السبب، فإن نظرية الكم للزخم الزاوي متطلب رئيس لدراسة الأنظمة الجزيئية، الذرية، و النووية.

سنقوم في هذا الباب بدراسة الصيغة العامة للزخم الزاوي المداري بإختبار عدة خصائص لمؤثرات الزخم و معرفة تناظراتها و أساسيات الجبر التي تحكمها، و التي منها يمكننا معرفة القيم و الحالات المميزة. إن نقاشنا فيما يتعلق بميكانيكا كم الزخم الزاوي المداري كمؤثرات و متجهات مميزة يمكن أن يمتد ليشمل الزخم الزاوي العام general angular momentum، العزم الزاوي المغزلي spin angular momentum، بل و نظير الحركة المغزلية isospin و أي تناظرات تتبع المجموعة الواحدية الخاصة special unitary group الذي يرمز لها بالرمز $SU(2)$، كما هو الحال في تحويلات المقياس gauge transformation للقوة الضعيفة.

يبقى أن الزخم الزاوي المداري له ديناميكا معروفة تماماً كلاسيكياً بخلاف العزم الزاوي المغزلي و نظير الحركة المغزلية، مما يجعل الإنتقال من الحالة الكلاسيكية إلى الحالة الكمية أوضح و اسلس بإستخدام طرق رياضية مختلفة لكنها تؤدي إلى نفس النتائج. هذه النتائج أمكن التحقق منها عملياً.

10.1 مؤثرات الزخم الزاوي المداري Operators of the orbital angular momentum

خلافاً للزخم الخطي الذي لايعتمد على نقطة الأصل أو نقطة المرجع، فإن الزخم الزاوي يعتمد بشكل أساسي على نقطة المرجع. لذلك نقول تحديداً الزخم الزاوي حول نقطة. إن الزخم الزاوي مقداراً و إتجاهاً يختلف كلياً بإختلاف نقطة المرجع. لجسيم زخمه الخطي $\mathbf{p}$ و موقعه بالنسبة إلى نقطة المرجع هو $\mathbf{r}$، فإن الصيغة الكلاسيكية للزخم الزاوي للجسيم حول نقطة المرجع تُعْطى بالتعريف

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \tag{10.1}$$

حسب هذا التعريف فإن الفضاء التقليدي للزخم الزاوي هو الفضاء الإقليدي ثلاثي الابعاد لأن متجه الزخم الزاوي عمودي على المستوى الذي يحوي متجهي الموقع و الزخم الخطي. أيضاً أن من التعريف (10.1) فإن الزخم الزاوي $\mathbf{L}$ ناتج عن الضرب المتجه لمتجهي الموقع و الزخم لذلك يسمى متجه محوري axial vector و هو يندرج تحت ما يسمى بالمتجهات الكاذبة pseudovector و هي المتجهات التي لايتغير إتجاهها بالإنعكاسية. هذه الخواص لها معاني كثيرة كما سنرى لاحقاً.

في ميكانيكا الكم نعبر عن الكميات الفيزيائية بمؤثرات هيرميشية و خطية. الزخم الزاوي ليس إستثناء، حيث يمكن التعبير عنه بمؤثر بمعاونة مؤثر الزخم الخطي $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ لنحصل على

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla}. \tag{10.2}$$

الميزة من إستخدام $\boldsymbol{\nabla}$ هو سهولة التعبير عن مؤثر الزخم الزاوي $\hat{\mathbf{L}}$ في الإحداثيات الكارتيزية أو الإحداثيات القطبية المنحنية كالكروية أو الإسطوانية. في الإحداثيات الكارتيزية الزخم الزاوي يعطى بـ

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{i}} & \hat{\mathbf{j}} & \hat{\mathbf{k}} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix},$$

بعد فك المحدد ننتهي إلى مركبات مؤثر الزخم الزاوي في الإحداثيات الكارتيزية

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y; \quad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z; \quad \text{and} \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x. \tag{10.3}$$

يمكن بكل سهولة التعبير عن أي من المركبات الكارتيزية كمؤثر تفاضلي. على سبيل المثال المركبة $\hat{L}_x$ يمكن أن تمثل بمؤثر تفاضلي لنكتب

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right).$$

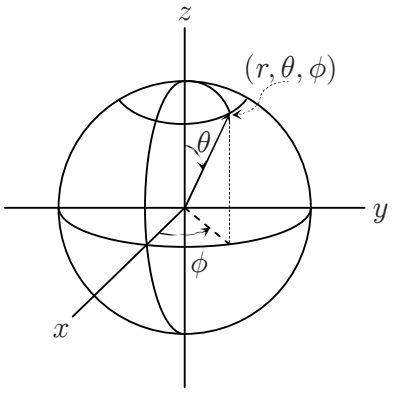
حيث عبرنا عن مؤثرات الزخم الخطي في الفضاء بإستخدام الصيغة (8.115)، لنحصل على $\hat{p}_y = -i\hbar\partial/\partial y$ و $\hat{p}_z = -i\hbar\partial/\partial z$. يمكن أيضاً كتابة باقي المركبات الكارتيزية كمؤثرات تفاضلية بمعلومية مركبات الزخم الخطي.

من النتائج الخاصة لمؤثر الزخم الزاوي من العلاقة (10.3) هي

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}. \tag{10.4}$$

هذه العلاقة يمكن إثباتها بإستخدام التحليل الموتر tensor analysis و رمز الليفي-سيفيتا كما فعلنا في الباب السابع في تحليل الضرب المتجه (7.21). لو أخذنا المركبة i component i^{th} للطرف الأيسر من العلاقة (10.4) نحصل على

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}})_i &= \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})_j (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})_k, \\
&= \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \left(\sum_{lm} \varepsilon_{jlm} x_l p_m \right) \left(\sum_{st} \varepsilon_{kst} x_s p_t \right), \\
&= \sum_{jlmst} \left(\sum_{k} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kst} \right) \varepsilon_{jlm} x_l p_m x_s p_t, \\
&= \sum_{jlmst} \left(\delta_{is}\delta_{jt} - \delta_{it}\delta_{js} \right) \varepsilon_{jlm} x_l p_m x_s p_t, \\
&= \sum_{jlmst} \varepsilon_{jlm} \left(\delta_{is}\delta_{jt} x_l p_m x_s p_t - \delta_{it}\delta_{js} x_l p_m x_s p_t \right), \\
&= \sum_{jlm} \varepsilon_{jlm} \left(x_l p_m x_i p_j - x_l p_m x_j p_i \right),
\end{aligned}$$



شكل (10.1): الإحداثيات القطبية الكروية لنقطة تقع على مسافة قطرية r و موقع زاوي θ و ϕ.

حيث إستخدمنا علاقة التقلص لليفي-سيفيتا المعرفة في (7.24). لاحظ كيف حافظنا على ترتيب مركبات الموقع و الزخم الخطي لأنها غير إبدالية. نعوض عن مركبات الزخم الخطي بمؤثرات تفاضلية $p_m = -i\hbar\partial/\partial x_m$ حسب الصيغة (8.115)، مع ملاحظة أن $\partial x_i/\partial x_m = \delta_{im}$ و هكذا، بالإضافة إلى تطبيق التقلبات الدورية لرمز اليفي-سيفيتا المعطى في (7.23) لنحصل على

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}})_i &= -i\hbar \sum_{jlm} \varepsilon_{jlm} \left(x_l \frac{\partial x_i}{\partial x_m} p_j - x_l \frac{\partial x_j}{\partial x_m} p_i \right), \\
&= -i\hbar \left(\sum_{jlm} \varepsilon_{jlm} \delta_{im} x_l p_j - \sum_{jlm} \varepsilon_{jlm} \delta_{jm} x_l p_i \right), \\
&= -i\hbar \left(\sum_{jl} \varepsilon_{jli} x_l p_j - \sum_{jl} \varepsilon_{jlj} x_l p_i \right), \\
&= -i\hbar \sum_{jl} \varepsilon_{ijl} x_l p_j - 0 = i\hbar \sum_{jl} \varepsilon_{ilj} x_l p_j, \\
&= i\hbar \left(\mathbf{r} \times \mathbf{p} \right)_i = i\hbar \left(\hat{\mathbf{L}} \right)_i,
\end{aligned}$$

و الذي يثبت العلاقة (10.4) مباشرة. لاحظ أننا وصلنا إلى هذه العلاقة بفضل تمثيل الزخم الخطي بمؤثر تفاضلي. إذاً هي نتيجة في الفضاءات المتجهة عموما لذلك نجدها في ميكانيكا الكم، لكنها غير صالحة للفضاءات الإقليدية لذلك لا نجده في الميكانيكا الكلاسيكية و التي تحتم أن الضرب المتجه لمتجهين متوازيين يساوي دائماً الصفر.

بمعرفة التحويلات الخطية بين الإحداثيات الكارتيزية و الإحداثيات القطبية المنحنية، يمكن أن يمتد تعريف الزخم الزاوي المداري إلى الإحداثيات الكروية أو الإسطوانية، حسب ما تقتضيه تناظرات النظام. من المفيد جداً تعريف مؤثر الزخم الزاوي المداري (10.2) في الإحداثيات القطبية الكروية، و الموضحة في الشكل (10.1)، لما لها من تطبيقات هامة في مختلف أفرع الفيزياء. لعمل ذلك نعبر عن $\boldsymbol{\nabla}$ بالإحداثيات الكروية (r, θ, ϕ) كالتالي

$$\boldsymbol{\nabla} = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi},$$

و نعوضها في (10.2) لنحصل على

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar r \left(\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

حيث $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$. من حقيقة أن $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{r}} = 0$ ، و $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{\phi}}$ ، و أخيراً $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\boldsymbol{\phi}} = -\hat{\boldsymbol{\theta}}$ ، نحصل على

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \left(\hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \tag{10.5}$$

للتعبير عن المركبات الكارتيزية لـ $\hat{\mathbf{L}}$ بالإحداثيات الكروية فإننا نحلل متجهات الوحدة $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ و $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ إلى مركباتهما الكارتيزية من العلاقات

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &= \hat{\mathbf{i}} \sin\theta\cos\phi + \hat{\mathbf{j}} \sin\theta\sin\phi + \hat{\mathbf{k}} \cos\theta, \\ \hat{\boldsymbol{\theta}} &= \hat{\mathbf{i}} \cos\theta\cos\phi + \hat{\mathbf{j}} \cos\theta\sin\phi - \hat{\mathbf{k}} \sin\theta, \\ \hat{\boldsymbol{\phi}} &= -\hat{\mathbf{i}} \sin\phi + \hat{\mathbf{j}} \cos\phi, \end{aligned} \tag{10.6}$$

لنعوضها في (10.5) لنحصل على المركبات الكارتيزية لـ $\hat{\mathbf{L}}$ كالتالي

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \tag{10.7}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \tag{10.8}$$

و أخيراً

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \tag{10.9}$$

من العلاقة (10.5) يمكننا حساب مؤثر مربع الزخم الزاوي $\hat{L}^2$ لنحصل على

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right],$$

لنجد أن قيمته تتفق تماماً مع ما وجدنا في الباب السابع حسب العلاقة (7.19) من التعويض في مؤثر لابلاس ∇^2 في مربع الزخم الخطي.

سوف نحتاج إلى مؤثري الرفع و الخفض $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$، على الترتيب، و اللذان يعرفان كالتالي

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y. \tag{10.10}$$

سوف نتعرف سبب تسميتهما بمؤثري الرفع و الخفض في القسم (10.3). من الملاحظ أن كلاً من $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ ليسا بذاتيي التجاور (أو هيرميشيين)، بل هما مجاوران لبعضهما البعض. حيث أنه من السهل إثبات أن

$$(\hat{L}_+)^\dagger = \hat{L}_-, \tag{10.11}$$

يمكن التعبير عن المركبات الكارتيزية لـ $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ مباشرة من (10.7) و (10.8) في (10.10) لنحصل على

$$\hat{L}_\pm = -i\hbar \left[(-\sin\phi \pm i\cos\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos\phi \pm i\sin\phi) \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right].$$

بإستخدام علاقة أويلر $e^{\pm i\phi} = \cos\phi \pm \sin\phi$ نصل إلى

$$\hat{L}_\pm = \pm\hbar\, e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \tag{10.12}$$

سنعرف المزيد عن خصائص مؤثري الرفع و الخفض $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ لدى دراستنا لعلاقات التبديل في القسم التالي.

10.2 علاقات التبديل Commutation relations

المركبات الكارتيزية لمؤثرات الزخم الخطي $\hat{L}_x$، $\hat{L}_y$، و $\hat{L}_z$ غير إبدالية مع بعضها البعض. هذا يعني أنها مؤثرات غير متزامنة و لايوجد لها مجموعة مشتركة من المتجهات المميزة. هذا يتفق مع حقيقة أن الدوران عملية غير إبدالية، كما نعلم من الميكانيكا التقليدية. يمكن تحديد علاقات التبديل، على سبيل المثال، بين $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$، كالتالي

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y), \hat{L}_y], \\
&= [y\hat{p}_z, \hat{L}_y] - [z\hat{p}_y, \hat{L}_y], \\
&= [y\hat{p}_z, (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)] - [z\hat{p}_y, (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)], \\
&= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] - ([z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] - [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]) . \\
&= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y, x] (\hat{p}_z)^2 - z^2[\hat{p}_y, \hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z], \\
&= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - 0 - 0 + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z],
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا الصيغ (10.3) للتعويض عن $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ و قمنا بفك علاقات التبديل. بإستخدام علاقات التبديل (8.73) و (8.86) و علاقات التبديل القانونية (8.114)، فإن جميع التبديلات في الطرف الأيمن من الخطوة الأخيرة تختفي ما عدا التبديل الأول و التبديل الرابع. لنحصل على

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z], \\
&= \{y\hat{p}_z (z\hat{p}_x) - z\hat{p}_x (y\hat{p}_z)\} + \{z\hat{p}_y (x\hat{p}_z) - x\hat{p}_z (z\hat{p}_y)\} , \\
&= \{y\hat{p}_x (\hat{p}_z z) - y\hat{p}_x (z\hat{p}_z)\} + \{x\hat{p}_y (z\hat{p}_z) - x\hat{p}_y (\hat{p}_z z)\} ,
\end{aligned}$$

لاحظ أنه جميع المؤثرات في الطرف الأيمن إبدالية ماعدا المؤثران $\hat{p}_z$ و z لذلك يجب أن نحافظ على ترتيبهما، بينما يمكننا تغير ترتيب المؤثرات الاخرى في الطرف الأيمن دون أي مشكلة. نجمع الحدود التي فيها $\hat{p}_z z$ عامل مشترك مع بعضها و نجمع الحدود التي فيها $z\hat{p}_z$ عامل مشترك مع بعضها و بهذا نحصل على

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= (y\hat{p}_x - x\hat{p}_y) \hat{p}_z z + (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) z\hat{p}_z, \\
&= -\hat{L}_z \hat{p}_z z + \hat{L}_z z\hat{p}_z, \\
&= \hat{L}_z [z, \hat{p}_z], \\
&= i\hbar \hat{L}_z.
\end{aligned}$$

بنفس الطريقة يمكن حساب بقية علاقات التبديل لنحصل على

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y; \quad \text{and} \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x. \tag{10.13}$$

لاحظ انه يوجد تقلبات تدويرية cyclic permutation في علاقات التبديل للمركبات الكارتيزية للزخم الزاوي تشبه تلك التي عرفناها للرمز ليفي-سيفيتا في العلاقة (7.23). بإستخدام هذا التشابه، يمكن أن نعمم علاقات التبديل (10.13) في علاقة واحدة مختزلة

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_l \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l. \tag{10.14}$$

في الإحداثيات الكارتيزية فإن المؤشرات j, k, l لها قيم تجري على المركبات x, y, z. هذا أيضا يوحي برابط مع الصيغة الكمية (10.4). فلو إستخدمنا طريقة المحدد لحساب $\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}}$ سنجد أن

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} &= \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{i}} & \hat{\mathbf{j}} & \hat{\mathbf{k}} \\ \hat{L}_x & \hat{L}_y & \hat{L}_z \\ \hat{L}_x & \hat{L}_y & \hat{L}_z \end{vmatrix}, \\
&= \hat{\mathbf{i}}(\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y) + \hat{\mathbf{y}}(\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z) + \hat{\mathbf{k}}(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x), \\
&= \hat{\mathbf{i}}[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + \hat{\mathbf{j}}[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + \hat{\mathbf{k}}[\hat{L}_x, \hat{L}_y], \\
&= i\hbar\left(\hat{\mathbf{i}}\hat{L}_x + \hat{\mathbf{j}}\hat{L}_y + \hat{\mathbf{k}}\hat{L}_z\right), \\
&= i\hbar\hat{\mathbf{L}}.
\end{aligned}$$

أي أن علاقات التبديل (10.13) تحقق العلاقة (10.4)، و هي نفس التكافؤ ما بين علاقات التبديل القانونية (8.114) لمؤثرات الزخم الخطي و الموقع مع تمثيل مؤثر الزخم بمؤثر تفاضلي كما في الصيغة (8.115). كما شاهدنا هذه نتيجة خاصة في ضرب المؤثرات الغير إبدالية و إلا فإن المحدد يساوي الصفر بسبب أن له صفين متساويين.

بما أن مركبات مؤثر الزخم الزاوي غير إبدالية مع بعضها البعض، كما رأينا في علاقات التبديل (10.13)، فإن قياس أي من هذه المؤثرات يؤثر على دقة قياس المؤثرات الأخرى حسب علاقة عدم اليقين المعممة (8.93). يمكن حساب الخطأ في قياس أي مركبتين من مركبات مؤثر الزخم الزاوي، على سبيل المثال $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ لنحصل على علاقة عدم اليقين المعممة

$$\langle(\Delta L_x)^2\rangle\langle(\Delta L_y)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}|\langle L_z\rangle|^2. \tag{10.15}$$

يمكن إستنباط المتراجحتين الباقيتين بتطبيق التقلبات التدويرية cyclic permutation لـ x، y، و z. في حالة أن $\langle L_z\rangle = 0$ فإن هذا يعني أن $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ لهم قيم دقيقة في آن واحد. هذا يعني أن النظام في حالة الطيفية S و التي أيضاً تعني أن $\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = \langle L_z\rangle = 0$ مما يعني أن جميع مركبات الزخم الزاوي المداري له قيم دقيقة في نفس الوقت.

سيكون من المفيد البحث عن مجموعة من مؤثرات الزخم الزاوي الإبدالية حتى نحصل على مجموعة مشتركة من المتجهات (أو الدوال) المميزة. رأينا في ذرة الهيدروجين القسم (7.4) أن مربع مؤثر الزخم الزاوي إبدالي مع الهاميلتون. في الإحداثيات الكارتيزية يعطى مربع الزخم الزاوي بـ

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \tag{10.16}$$

و الذي يكون إبدالياً أيضاً مع مركبات مؤثر الزخم الزاوي، على سبيل المثال $\hat{L}_x$، حيث نجد أن

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x], \\
&= 0 + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z, \\
&= \hat{L}_y(-i\hbar\hat{L}_z) + (-i\hbar\hat{L}_z)\hat{L}_y + \hat{L}_z(i\hbar\hat{L}_y) + (i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_z, \\
&= 0,
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا حقيقة أن كل مؤثر إبدالي مع نفسه و طبقنا علاقة التبديل (8.112). بنفس الطريقة نجد أن $\hat{\mathbf{L}}^2$ إبدالية مع كل من $\hat{L}_y$ و $\hat{L}_z$. أي نكتب

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0; \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = 0; \quad \text{and} \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}] = 0. \tag{10.17}$$

النتيجة الأخيرة تتفق مع حقيقة أن أي مؤثر إبدالي دائماً مع أي دالة له. سنسلم بها كقاعدة من الآن فصاعداً.

من تعريف مؤثري الخفض و الرفع $\hat{L}_\pm$ في (10.10) و حسب علاقات التبديل (10.13) نستنتج مباشرة أن كلاً من $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ غير إبداليين، حيث علاقة التبديل لهما يمكن أن تحسب كالتالي

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_+, \hat{L}_-] &= [(\hat{L}_x + i\hat{L}_y), (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)], \\
&= [\hat{L}_x, \hat{L}_x] - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_y], \\
&= -2i[\hat{L}_x, \hat{L}_y],
\end{aligned}$$

و بإستخدام علاقات التبديل (10.13) ننتهي إلى

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z. \tag{10.18}$$

إن حاصل الضرب

$$\begin{aligned}
\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp &= (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)(\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y), \\
&= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i\hat{L}_x\hat{L}_y \pm i\hat{L}_y\hat{L}_x, \\
&= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x), \\
&= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \pm \hbar\hat{L}_z,
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ من علاقات التبديل (10.13). بجمع و طرح $\hat{L}_z^2$ في الطرف الأيمن ننتهي إلى

$$\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar\hat{L}_z. \tag{10.19}$$

واضح أن ناتج الضرب $\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp$ يُعْطي مؤثر ذاتي التجاور. مباشرة من (10.17) نستنتج أن

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_\pm] = 0. \tag{10.20}$$

سيكون للعلاقة (10.20) مغزى هام لدى دراسة المتجهات المميزة لمؤثرات العزوم الزاوية كما سنرى في القسم (10.3). من الهام، كما سنرى لاحقاً، إيجاد علاقة التبديل بين $\hat{L}_z$ و $\hat{L}_\pm$ والتي يمكن حسابها مباشرة بإستخدام علاقات التبديل للزخم الزاوي (10.13)، لنحصل على

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y], \\
&= [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}_z, \hat{L}_y], \\
&= i\hbar\hat{L}_y \pm i(-i\hbar\hat{L}_x), \\
&= \pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y),
\end{aligned}$$

أو ننتهي إلى أن

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm. \tag{10.21}$$

العلاقة (10.21) تذكرنا بالقسم (9.4) و بالأخص النقطة السابعة.

10.3 المتجهات و القيم المميزة لمؤثرات الزخم الزاوي
Eigenvectors and eigenvalues of the angular momentum

حقيقة أن مربع مؤثر الزخم الزاوي إبدالي مع مؤثر الزخم الزاوي عموماً و مع مركباته خصوصاً كما في العلاقة (10.17) يثير إهتمامنا بوجود متجهات متزامنة. أضف إلى ذلك أن $\hat{\mathbf{L}}^2$ إبدالي مع الهاميلتون $\hat{H}$ في أغلب الأنظمة

الفيزيائية لأن الطاقة الحركية الناتجة عن الحركة الزاوية و المدارية تتناسب مع $\mathbf{L}^2/2I$، حيث I عزم القصور الذاتي للنظام. لقد رأينا كيف أن $\hat{H}$ دالة لـ $\hat{\mathbf{L}}^2$ في الأنظمة تحت تأثير الجهود المركزية. من هذا نستنتج علاقة التبديل

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0. \tag{10.22}$$

بالإضافة إلى ذلك، لاحظنا في ذرة الهيدروجين في القسم (7.4) أن المركبة $\hat{L}_z$ إبدالية مع $\hat{H}$. هذا ناتج عن عدم إعتماد الجزء الزاوي من الدالة الموجية ألا و هو دالة التوافق الكروي $Y_{l\,m_l}(\theta, \phi)$ على المركبات السمتية لدى أخذ قيمتها المطلقة لحساب دالة التوزيع الزاوية. حيث أن $Y_{l\,m_l}(\theta, \phi) \propto e^{\pm i m_l \phi}$. لذلك نجد أن

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \tag{10.23}$$

إن إختيار محور z، في الإحداثيات الكروية القطبية، كمرجع نقيس الزاوية θ منه و كمحور لدوران الزاوية السمتية azimuthal angle ϕ حوله ما هو إلا محض إصطلاح. أضف لذلك، دائماً ما نعتبر إتجاه المجالات الخارجية و التي تتفاعل مع الأنظمة المجهرية هو محور z. هذا الإختيار يسهل التعامل رياضياً مع المسائل الفيزيائية بسبب أهمية محور z المرجعية. على سبيل المثال إختيار إتجاه z للمجال المغناطيسي في تجربة شتيرن-جيرلاخ أدى إلى حدوث قوة بإتجاه z تفصل الشعاع بسبب تفاعل عزم ثنائي القطبية المغناطيسية مع المجال المغناطيسي. إن عزم ثنائي القطبية المغناطيسية يتناسب مع الزخم الزاوي المداري للذرات $\vec{\mathbf{L}}$ و لدى تفاعله مع المجال المغناطيسي الخارجي حسب العلاقة (1.47)، فإن مركبة الزخم الزاوي L_z، أو ما يعرف بالمسقط المغناطيسي للزخم الزاوي، هي من تساهم في الإختلاف في قيم الطاقة. هذا التفاعل أيضاً يسهم في الإنقسامات الطيفية فيما يسمى أثر زيمان.

بسبب إبدالية $\hat{\mathbf{L}}^2$ مع $\hat{L}_z$ و إنحفاظهما لأنهما إبداليان مع $\hat{H}$، و أهميتهما المرجعية، سيكون من المناسب جداً إعتبار كت مميز $|\lambda, \mu\rangle$ متزامن لـ $\hat{\mathbf{L}}^2$ و $\hat{L}_z$ بحيث يحقق المعادلتين المميزتين

$$\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle; \qquad \text{and} \qquad \hat{L}_z|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle, \tag{10.24}$$

حيث أن λ و μ يرتبطان بالأعداد الكمية للقيم المميزة و التي توصف الحالات المميزة لـ $\hat{\mathbf{L}}^2$ و $\hat{L}_z$، على التوالي.

حسب علاقة التبديل (10.20) نستنتج أن الكت $|\lambda, \mu\rangle$ متجه مميز لكلا المؤثرين $\hat{L}_\pm$ و $\hat{\mathbf{L}}^2$. يمكن إثبات أن الكت $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle$ هو كت مميز أيضاً لـ $\hat{\mathbf{L}}^2$ بالقيمة المميزة λ. أي أن

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \left(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle\right) = \hat{L}_\pm \hat{\mathbf{L}}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda \left(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle\right),$$

و بالتالي فإن الكت $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle$ أيضاً متجه مميز لـ $\hat{L}_z$. لمعرفة القيمة المميزة نحتاج إلى علاقة التبديل (10.21) بين $\hat{L}_z$ و $\hat{L}_\pm$ و التي منها يمكن إثبات أن الكت $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle$ أيضاً متجه مميز لـ $\hat{L}_z$ كالتالي

$$\hat{L}_z \left(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle\right) = (\hat{L}_\pm \hat{L}_z \pm \hbar \hat{L}_\pm)|\lambda, \mu\rangle = (\hat{L}_\pm \mu \pm \hbar \hat{L}_\pm)|\lambda, \mu\rangle,$$

ننتهي إلى أن

$$\hat{L}_z \left(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle\right) = (\mu \pm \hbar) \left(\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle\right), \tag{10.25}$$

أي أن الكت $\hat{L}_\pm|\lambda, \mu\rangle$ أيضاً متجه مميز لـ $\hat{L}_z$ بقيمة مميزة $\mu \pm \hbar$. هذا يعني أن المؤثر $\hat{L}_+$ يُسْقِط (أو بالأحرى يرفع) الحالة $|\lambda, \mu\rangle$ إلى الحالة $|\lambda, \mu + \hbar\rangle$، و المؤثر $\hat{L}_-$ يُسْقِط (أو بالأحرى يخفض) الحالة $|\lambda, \mu\rangle$ إلى الحالة $|\lambda, \mu - \hbar\rangle$. لهذا، يُسمى $\hat{L}_+$ مؤثر الرفع و $\hat{L}_-$ بمؤثر الخفض. هذه الطريقة مشابهة تماماً لما فعلنا في في المؤثرات الدرجية في الحركة التوافقية البسيطة.

إن عملية الرفع يمكن أن تتواصل إلى أن تصل الحالة إلى قيمة عظمى من μ، و لتكن $\mu_{\max}$، و التي بعدها لن يمكن رفع الحالة و بالتالي مؤثر الرفع سيعطي صفراً، أي أن

$$\hat{L}_+|\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0; \qquad \hat{L}_z|\lambda, \mu_{\max}\rangle = \mu_{\max}|\lambda, \mu_{\max}\rangle; \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{L}}^2|\lambda, \mu_{\max}\rangle = \lambda|\lambda, \mu_{\max}\rangle.$$

بما أن الرفع بوحدة $\hbar$، اي أن μ تزداد كمضاعفات لـ $\hbar$، فمن المناسب أن نعتبر أن

$$\mu_{\max} = l\hbar, \tag{10.26}$$

حيث l عدد عشوائي. يصل عندها الكت إلى أعلى رتبة من العدد الكمي μ ليصبح $|\lambda, l\hbar\rangle$. من علاقة الضرب (10.19) يمكننا كتابة $\hat{\mathbf{L}}^2$ بالصيغة

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z,$$

لدى تأثيره على الكت $|\lambda, l\hbar\rangle$ فإننا نحصل على

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda, l\hbar\rangle &= (\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z)|\lambda, l\hbar\rangle, \\
\lambda|\lambda, l\hbar\rangle &= \Big(0 + (l\hbar)^2 + \hbar(l\hbar)\Big)\,|\lambda, l\hbar\rangle, \\
&= l(l+1)\hbar^2|\lambda, l\hbar\rangle,
\end{aligned}$$

و الذي نستنتج منه مباشرة أن

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2. \tag{10.27}$$

بتطبيق نفس النقاش، نقول أن إن عملية الخفض تتواصل إلى أن تنخفض الحالة إلى قيمة صغرى من μ، و لتكن $\mu_{\min}$، و التي بعدها لن يمكن خفض الحالة إلى أقل منها و بالتالي مؤثر الخفض عليها سيعطي صفراً، أي أن

$$\hat{L}_-|\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0; \qquad \hat{L}_z|\lambda, \mu_{\min}\rangle = \mu_{\min}|\lambda, \mu_{\min}\rangle; \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{L}}^2|\lambda, \mu_{\min}\rangle = \lambda|\lambda, \mu_{\min}\rangle.$$

بما أن الخفض بوحدة $\hbar$، فمن المناسب أن نعتبر أن

$$\mu_{\min} = l'\hbar, \tag{10.28}$$

أيضاً l' عدد عشوائي. يصل عندها الكت إلى أقل رتبة من العدد الكمي μ ليصبح $|\lambda, l'\hbar\rangle$. من علاقة الضرب (10.19) يمكننا كتابة $\hat{\mathbf{L}}^2$ بالصيغة

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z,$$

لدى تأثيره على الكت $|\lambda, l'\hbar\rangle$ فإننا نحصل على

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda, l'\hbar\rangle &= (\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)|\lambda, l'\hbar\rangle, \\
\lambda|\lambda, l'\hbar\rangle &= \Big(0 + (l'\hbar)^2 - \hbar(l'\hbar)\Big)\,|\lambda, l'\hbar\rangle, \\
&= l'(l'-1)\hbar^2|\lambda, l'\hbar\rangle,
\end{aligned}$$

و الذي نستنتج منه مباشرة أن

$$\lambda = l'(l'-1)\hbar^2. \tag{10.29}$$

بمقارنة النتيجتين (10.27) و (10.29)، نحصل على

$$l(l+1) = l'(l'-1),$$

حل المعادلة التربيعيى أعلاه لـ l' يُعْطِينا حلين: إما $l' = l+1$ و هذا الحل مرفوض فيزيائياً لأنه يعني أن $\mu_{\min} > \mu_{\max}$ مما يناقض الفرض بأن $\mu_{\max}$ هي أعلى رتبة للحالة $|\lambda, \mu\rangle$ و $\mu_{\min}$ هي أقل رتبة للحالة $|\lambda, \mu\rangle$. الحل الثاني هو $l' = -l$ و هذا الحل يجعل النتيجة (10.29) تتطابق النتيجة (10.27)، لنقول بشكل مؤكد أن

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2. \tag{10.30}$$

نجد من (10.26) و (10.28) أن

$$-l\hbar \leq \mu \leq l\hbar; \quad \Rightarrow \quad -l \leq \mu/\hbar \leq l,$$

واضح جداً من أن العدد الكمي μ يرتبط بمسقط الزخم الزاوي على محور z و هذا يتضح جلياً من فرضنا للمعادلتين المميزتين (10.24). و عليه نعرف m_l العدد الكمي لمسقط الزخم الزاوي على محور z، أو ما يعرف بالمسقط المغناطيسي للزخم الزاوي حيث إن إتجاه z يُحدد بإتجاه المجال المغناطيسي، ليُعْطى بـ

$$m_l = \mu/\hbar \qquad \Rightarrow \qquad -l \leq m_l \leq l, \tag{10.31}$$

ليصبح $\{|l, m_l\rangle\}_{l\, m_l}$ مجموعة المتجهات المميزة للمؤثرين المتزامنين $\hat{\mathbf{L}}^2$ و $\hat{L}_z$، ومن ثم تصبح المعادلتين المميزتين (10.24) على الصيغة

$$\hat{\mathbf{L}}^2|l, m_l\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m_l\rangle; \qquad \text{and} \qquad \hat{L}_z|l, m_l\rangle = m_l\hbar|l, m_l\rangle, \tag{10.32}$$

و يكون أثر مؤثر الرفع $\hat{L}_+$ المتعاقبة على الحالة $|l, m_l\rangle$، حسب (10.25)، رفعها إلى الحالات $|l, m_l + 1\rangle$ ، $|l, m_l + 2\rangle$، ... إلى، $|l, l\rangle$. في المقابل، فإن أثر مؤثر الخفض $\hat{L}_-$ المتعاقبة على الحالة $|l, m_l\rangle$، حسب (10.25)، هو خفضها إلى الحالات $|l, m_l - 1\rangle$ ، $|l, m_l - 2\rangle$، ... إلى، $|l, -l\rangle$. لنصل إلى حقيقة أن

$$\hat{L}_+|l, l\rangle = 0 \qquad \text{and} \qquad \hat{L}_-|l, -l\rangle = 0, \tag{10.33}$$

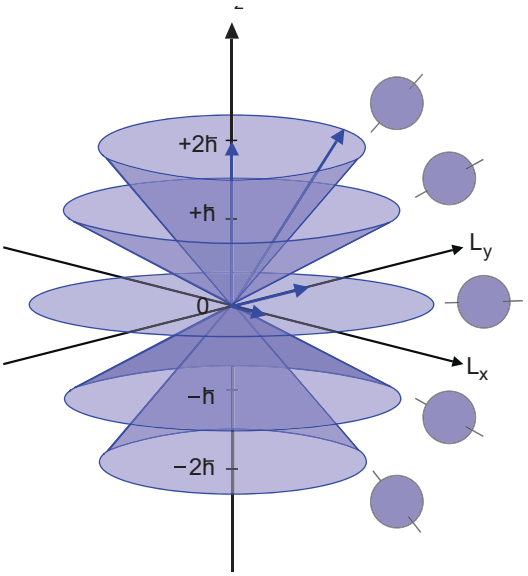
هذا يعني أن قيم m_l الممكنة تصبح

$$m_l = l, l-1, \cdots, -(l-1), -l, \tag{10.34}$$

أي أنه لكل قيمة ممكنة للعدد الكمي l يوجد $2l+1$ قيمة ممكنة للعدد الكمي m_l. لاحظ أن القيم الممكنة للعدد الكمي الزاوي المداري $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$.

الشكل (10.2) يوضح نموذج لمتجه الزخم الزاوي المداري للعدد الكمي $l = 2$ في الفضاء الإقليدي. السطوح الهندسية للمخاريط المتحدة الرأس في الشكل توضح الإتجاهات الممكنة possible orientations لمتجه الزخم الزاوي المداري، و الذي مقداره يساوي $\sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$ و يمثل طول المتجه من الرأس إلى القاعدة. لاحظ أن جميع المخاريط لها نفس المسافة المستقيمة من الرأس للقاعدة. على سطح المخروط متجه الزخم الزاوي له نفس العدد الكمي المغناطسي m_l. الحلقة تمثل حقيقة أن المركبة L_z محددة بدقة لكن L_x و L_y لايمكن تحديدهم، لهذا كل متجه كلاسيكي بطول يساوي $\sqrt{6}\hbar$ له قيم محددة من L_z مكوناً مخروطاً. القيم المحددة L_z تُعْطى بالمساقط العمودية لمتجهات الزخم الزاوي على محور z و التي تمثلها الأعداد الكمية الممكنة للعدد الكمي المغناطسي $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$. لاحظ في الحالة $m_l = 0$ المخروط أصبح دائرة، و ذلك لأن متجه الزخم الزاوي ليس له أي مركبة بإتجاه محور z. إن القيم المميزة للحالة تُعَرّف بالأعداد الكمية l و m_l يمكنها التواجد في أي مكان على سطح المخروط و لايمكن لأي حال من الأحوال أن يمثل هذا المخروط نظاماً واحداً لأن مركبات الزخم الزاوي غير إبدالية مع بعضها البعض. هذا يتضح من حقيقة أن مقدار متجه الزخم الزاوي أكبر من أعلى قيمة ممكنة لمركبة z، أي أن $|\mathbf{L}| > L_z^{\max}$ و هذا يعود إلى أن $\sqrt{l(l+1)} > l$ ، ماعدا الحالة التافهة و التي عندها $l = 0$.

من الواضح أنه من غير الممكن أن نجعل متجه الزخم الزاوي $\mathbf{L}$ يتجه كلياً على طول محور z. للوهلة الأولى يبدو أن هذا غير منطقي، كيف لا يمكننا أن نختار المحاور الإحداثية بحيث يكون محور z على طول متجه الزخم الزاوي $\mathbf{L}$؟ للقيام بذلك يجب علينا معرفة جميع المركبات الثلاث للزخم الزاوي المداري بنفس اللحظة، وهذا ينافي علاقة عدم اليقين (10.15) التي تنص أنه من المستحيل تحديد جميع مركبات $\mathbf{L}$ بشكل متزامن. ليس هذا وحسب، بل أنه من غير الممكن تحديد متجه الزخم الزاوي المداري نفسه بشكل محدد بالفضاء. لهذا السبب فإننا مثلنا فضاء الزخم الزاوي المداري هندسياً بالمخاريط الموضحة بالشكل (10.2) و ليس بمتجه (خط مستقيم و سهم). هذا يبدو أمراً غريباً بأن المتجهات الإقليدية لم تعد بالبساطة التي تعودنا عليها في الميكانيكا التقليدية، بل أصبحت تحدد بسطوح هندسية، أو حتى أسوء بحجوم هندسية. هذا طبعاً من بركات مبدأ عدم اليقين.



شكل (10.2): توضيح لنموذج متجه الزخم الزاوي المداري للعدد الكمي $l = 2$ في الفضاء.

بقي أن نعرف الكت الناتج عن $\hat{L}_\pm|l, m_l\rangle$. نحن نعلم أنه يتناسب مع $|l, m_l \pm 1\rangle$، لذلك نعتبر

$$\hat{L}_\pm|l, m_l\rangle = C_\pm|l, m_l \pm 1\rangle, \tag{10.35}$$

حيث $C_\pm$ ثابت مركب. يمكننا حساب الثابت C_+ و ذلك بضرب المعادلة $\hat{L}_+|l, m_l\rangle = C_+|l, m_l + 1\rangle$ ضرباً داخلياً (من اليسار إلى اليمين) بالبرا المرافق لها $\langle l, m_l|\hat{L}_+^\dagger = \langle l, m_l + 1|C_+^*$ لنحصل على

$$\begin{aligned}\langle l, m_l|\hat{L}_+^\dagger\hat{L}_+|l, m_l\rangle &= \langle l, m_l + 1|C_+^*C_+|l, m_l + 1\rangle,\\ \langle l, m_l|\hat{L}_-\hat{L}_+|l, m_l\rangle &= |C_+|^2\langle l, m_l + 1|l, m_l + 1\rangle,\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا العلاقة (10.11) لأخذ المجاور. في المعادلة أعلاه، نستخدم النتيجة (10.19) في الطرف الأيسر، و نطبق علاقة التعامد في الطرف الأيمن، نحصل على

$$\begin{aligned}\langle l, m_l|(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)|l, m_l\rangle &= |C_+|^2,\\ \Big(l(l+1) - m_l^2 - m_l\Big)\hbar^2\langle l, m_l|l, m_l\rangle &= |C_+|^2.\end{aligned}$$

بنفس الطريقة يمكن حساب قيمة الثابت C_- لنحصل على

$$\Big(l(l+1) - m_l^2 + m_l\Big)\hbar^2\langle l, m_l|l, m_l\rangle = |C_-|^2.$$

بتطبيق علاقة التعامد ننتهي إلى أن

$$|C_\pm| = \hbar\sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)}, \tag{10.36}$$

بإهمال قيمة الطور في (10.36) نصل إلى قيمة الكِت $\hat{L}_\pm|l, m_l\rangle$ تعطى بالصيغة

$$\hat{L}_\pm|l, m_l\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)}|l, m_l \pm 1\rangle. \tag{10.37}$$

لاحظ أن (10.37) تحقق المعادلات (10.33) عند قيم m_l العظمى.

بقي أن نعرف علاقات التعامد و علاقات التمام لمجموعة كِت المميزة $\{|l, m_l\rangle\}_{l\, m_l}$ لنكتب علاقة التعامد و المعايرة

$$\langle l', m_l'|l, m_l\rangle = \delta_{ll'}\, \delta_{m_l m_l'}. \tag{10.38}$$

بما أن $\{|l, m_l\rangle\}_{l\, m_l}$ مجموعة كِت مميزة لمؤثرات هيرميشية و خطية، فإن $\{|l, m_l\rangle\}_{l\, m_l}$ كاملة. كما تعلمنا في (8.46) و (8.47)، فإن أي كِت عشوائي $|\varphi\rangle$ سيكتب بمعلومية $\{|l, m_l\rangle\}_{l\, m_l}$ بالصيغة

$$|\varphi\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^{+l} \langle l, m_l|\varphi\rangle |l, m_l\rangle, \tag{10.39}$$

و التي تقتضي علاقة التمام التالية

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^{+l} |l, m_l\rangle\langle l, m_l| = 1. \tag{10.40}$$

مسلحين بالمتجهات المميزة لمؤثرات الزخم الزاوي يمكننا الآن إيجاد صيغ للإزاحات الزاوية ذات الأطياف المستمرة مثل الزاوية العمودية θ و الزاوية السمتية ϕ. هذا يمكن فهمه فيما تذكرنا أن مؤثر الزخم الزاوي المداري $\hat{\mathbf{L}}$ هو مولد الدوران.

10.4 الدوال المميزة للزخم الزاوي المداري
Eigenfunctions of the orbital angular momentum

من خلال دراستنا للقسم (8.7) و الخاص بالديناميكا الكمية، و في ضوء فهمنا للتحويلات التناظرية الواحدية، و على الضوء التقابل بين الزخم الخطي و الزاوي، و حسب خبراتنا السابقة من كون الزخم الخطي هو مولد الإزاحة الخطية أو الإنتقال، فإننا نستنبط أن الزخم الزاوي المداري هو مولد للإزاحات الزاوية θ و ϕ و المعرفة على الإحداثيات القطبية الكروية. لذلك نُعَرِّف متجه كِت للإزاحة الزاوية $|\theta, \phi\rangle$ ليمثل الإحداثيات (الحالة) الزاوية للنظام الذي توصف حركته المدارية بمؤثر الزخم الزاوي $\hat{L}^2$.

بما أن القيم الممكنة للإزاحات الزاوية θ و ϕ مستمرة، فإن القيم الطيفية للكِت $|\theta, \phi\rangle$ مستمرة. سنعتبر أن مجموعة الكِت $|\theta, \phi\rangle$ مميزة لمؤثر الإزاحة الزاوية (الزاوية الفراغية) $\hat{\Omega}$. سوف لن نخوض بكل التعابير الجبرية لـ $\hat{\Omega}$ لكن سنعتبر أنه خطي و هيرميشي و يحقق المعادلة المميزة

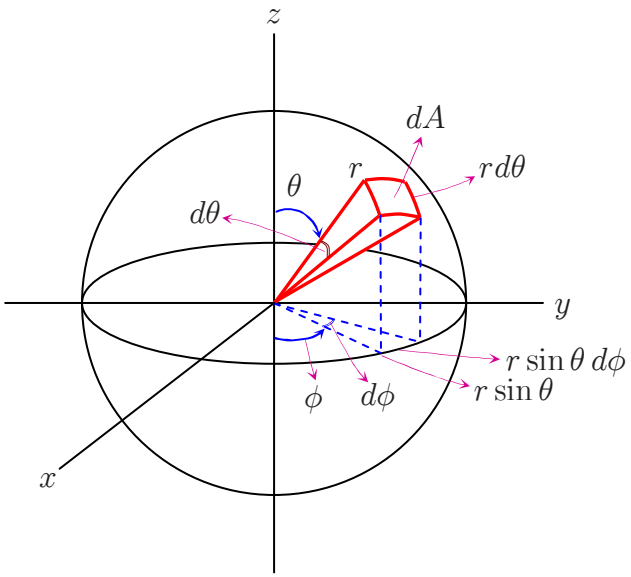
$$\hat{\Omega}|\theta, \phi\rangle = \Omega|\theta, \phi\rangle, \tag{10.41}$$

حيث Ω حقيقية و لاتحمل أبعاد فيزيائية لكن وحدته تُعْطى بالراديان المجسمة steradian. للتعرف أكثر على Ω نأخذ الشكل (10.3) لنعرف عنصر الزاوية الفراغية $d\Omega$ للهرم طول ضلعه الجانبي r و زاوية رأسه الأفقية $d\theta$ و الدورانية $d\phi$ و مساحة قاعدته هي dA تعطى بالتعريف

$$d\Omega \equiv \frac{dA}{r^2}.$$

عنصر المساحة dA يساوي مساحة قاعدة الهرم، أي الطول $(rd\theta)$ في العرض $(r\sin\theta d\phi)$ لنحصل على $dA = r^2 \sin\theta d\theta d\phi$ و بالتالي فإن $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. هذا معروف سابقاً من الأحداثيات الكروية. بشكل عام فإن الزاوية المجسمة التي تصنعها نقطة تتحرك على سطح كرة إحداثيها (r, θ, ϕ) لمرجعية محور z (حيث نقيس منه الزاوية θ) و محور x (و الذي نقيس منه الزاوية ϕ)، كما يوضح الشكل (10.1)، تُحْسب من التكامل التالي

$$\Omega = \int_{\Omega} d\Omega' = \int_0^{\theta} \sin\theta' d\theta' \int_0^{\phi} d\phi',$$



شكل (10.3): عنصر الزاوية الفراغية $d\Omega$ و التي يصنعها عنصر المساحة dA طول ضلعه r و زاوية رأسه $d\theta$.

لنصل إلى

$$\Omega = \frac{A}{r^2} = \phi(1 - \cos\theta),$$

و بالتالي فإن العلاقة (10.41) تصبح

$$\hat{\Omega}|\theta, \phi\rangle = \phi(1 - \cos\theta)|\theta, \phi\rangle, \tag{10.42}$$

حيث هنا إعتبرنا $\phi(1 - \cos\theta)$ القيمة المميزة للمؤثر $\hat{\Omega}$ و هو يمثل قيم طيفية مستمرة. بما أننا أخذنا $\hat{\Omega}$ خطي و هيرميشي و طيفه مستمر، فإن مجموعة كِت المميزة له $|\theta, \phi\rangle$ كاملة، مستقلة خطياً. و عليه فإن $|\theta, \phi\rangle$ تحقق علاقة التعامد

$$\langle\theta', \phi'|\theta, \phi\rangle = \delta(\cos\theta' - \cos\theta)\delta(\phi' - \phi) \tag{10.43}$$

إختيارنا لقيم دوال دلتا في علاقة التعامد (10.43) ناتج عن حاجتنا لمساواة التكامل على الزاويا الفراغية لدوال دلتا للوحدة، أي أن

$$\begin{aligned} 1 = \iint_{\Omega} \langle\theta', \phi'|\theta, \phi\rangle d\Omega &= \iint_{\theta,\phi} \delta(\cos\theta' - \cos\theta)\delta(\phi' - \phi)\sin\theta d\theta d\phi, \\ &= -\int_{\theta=0}^{\pi} \delta(\cos\theta' - \cos\theta)d(\cos\theta) \int_{\phi=0}^{2\pi} \delta(\phi' - \phi)d\phi, \\ &= \int_{-1}^{1} \delta(u' - u)du \int_{\phi=0}^{2\pi} \delta(\phi' - \phi)d\phi = 1, \end{aligned}$$

حيث أن $u = \cos\theta$ و بالتالي $1 \geq u \geq -1$ و عليه التكامل على du تم على القيم الممكنة لفضاء u و هو نفس الحال للتكامل $d\phi$ على جميع القيم الممكنة لـ $2\pi \geq \phi \geq 0$. ناتج التكاملين سيعطي الوحدة بوجود دوال دلتا. من أعلاه و من حقيقة أن دوال دلتا معرفة داخل التكاملات، من السهل أن نثبت أن

$$\delta(\cos\theta' - \cos\theta) = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta' - \theta).$$

من حقيقة أن مجموعة كِت $|\theta,\phi\rangle$ كاملة، أي أنها أساسات تبني فضاء الإزاحة الزاوية، فإنها تحقق علاقة التمام و التي نستطيع أن نتنبأ بها على الصيغة

$$\int_{\Omega}|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|d\Omega=\iint_{\theta,\phi=0}^{\pi,2\pi}|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|\sin\theta d\theta d\phi=1. \tag{10.44}$$

إن تطبيقات الكِت $|\theta,\phi\rangle$ محدودة، لكن فائدتها تظهر لدى إسقاط فضاء الكِت $|l,m_l\rangle$ على فضاء $|\theta,\phi\rangle$. في واقع الأمر فإن الضرب الداخلي لمتجهي الكِت السابقين ليس سوى دالة نعرفها جيداً، و هي دالة التوافق الكروي $Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)$، و التي سنُعَرِّفُها بمعلومية متجهات كِت المميزة كالتالي

$$Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)=\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle. \tag{10.45}$$

وجدنا في الباب السابع أن مؤثر مربع الزخم الزاوي $\hat{L}^2$ يعطى من العلاقة (7.19) و أن معادلة التوافق الكروي $Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)$ هي حل لمعادلة ليجندر المزاملة (A.44) و التي تعطي على الفور المعادلة المميزة (7.30) و التي تماثل المعادلة المميزة (10.32). هذا يجعلنا ندرك على الفور أن $Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)$ هي مجموعة الدوال المميزة للمؤثر $\hat{L}^2$. ليس هذا و حسب، بل أن $Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)$ مجموعة دوال مميزة للمؤثر $\hat{L}_z$ بسبب إبدالية $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$. بما أن معادلة ليجندر المزاملة (A.44) ذاتية الترافق، فإن دوال التوافق الكروي $Y_{lm}(\theta,\phi)$ كاملة و مستقلة خطياً و تتبع علاقة التعامد (A.45) و علاقة التمام (A.46).

إن الدوال الحقيقية $|Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)|^2=|\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle|^2$ تمثل دالة التوزيع الزاوي للنظام، كما رأينا ذلك في ذرة الهيدروجين، و هي دوال ثلاثية الأبعاد كما يوضح الشكل (A.2). أن مقدار دالة التوزيع الزاوي عند قيم محددة من θ و ϕ تُعطي كثافة الإحتمالية (إحتمالية لكل sterradian) أن نجد الجسيم عند تلك الزاويا بالأعداد الكمية l و m_l. و عليه فإن $|Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)|^2d\Omega=|\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle|^2d\Omega$ تعني إحتمال أن يتواجد النظام بين الزاوية المجسمة Ω و $\Omega+d\Omega$، كأن يكوم محصوراً في عنصر الزاوية الفراغية الموضحة في الشكل (10.3).

يمكن إعادة صياغة العلاقة (7.30) بإستخدام العلاقة (10.32) كالتالي

$$\begin{aligned}\hat{L}^2Y_{l\,m_l}(\theta,\phi) &= \hat{L}^2\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle=\langle\theta,\phi|\hat{L}^2|l,m_l\rangle,\\ &= l(l+1)\hbar^2\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle,\\ &= l(l+1)\hbar^2Y_{l\,m_l}(\theta,\phi).\end{aligned}$$

بنفس الطريقة نجد أن

$$\begin{aligned}\hat{L}_zY_{l\,m_l}(\theta,\phi) &= \hat{L}_z\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle=\langle\theta,\phi|\hat{L}_z|l,m_l\rangle,\\ &= m_l\hbar\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle,\\ &= m_l\hbar Y_{l\,m_l}(\theta,\phi).\end{aligned}$$

و التي يمكن إثباتها مباشرة بإستخدام العلاقة (10.9) و التي تؤثر مباشرة على التمثيل (A.43)، حيث تؤثر المشتقة $-i\hbar\partial/\partial\phi$ على الدالة الأسية $\exp(im_l\phi)$ لنحصل على $m_l\hbar$، كما في النتيجة أعلاه. من علاقة التعامد (10.38) و علاقة التمام (10.44) نجد أن

$$\begin{aligned}\delta_{ll'}\,\delta_{m_lm_l'} &= \langle l',m_l'|l,m_l\rangle=\langle l',m_l'|\left(\iint_{\theta,\phi=0}^{\pi,2\pi}|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|\sin\theta d\theta d\phi\right)|l,m_l\rangle,\\ &= \iint_{\theta,\phi=0}^{\pi,2\pi}\langle l',m_l'|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|l,m_l\rangle\sin\theta d\theta d\phi,\\ &= \iint_{\theta,\phi=0}^{\pi,2\pi}Y^*_{l'm_l'}(\theta,\phi)Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi,\end{aligned}$$

و هي نفس علاقة التعامد لدوال التوافق الكروي في الصيغة (A.45). في المقابل، من علاقة التعامد (10.43) و علاقة التمام (10.40) نجد

$$\begin{aligned}\delta(\cos\theta'-\cos\theta)\delta(\phi'-\phi) &= \langle\theta',\phi'|\theta,\phi\rangle = \langle\theta',\phi'|\left(\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m_l=-l}^{+l}|l,m_l\rangle\langle l,m_l|\right)|\theta,\phi\rangle,\\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m_l=-l}^{+l}\langle\theta',\phi'|l,m_l\rangle\langle l,m_l|\theta,\phi\rangle,\\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m_l=-l}^{+l}Y_{l\,m_l}(\theta',\phi')Y^*_{l\,m_l}(\theta,\phi),\end{aligned}$$

و هي نفس علاقة التمام (A.46).

من الرائع حقيقة التوافق مابين تمثيلي الدوال و متجه الفضاء للديناميكا الزخم الزاوي المداري. هذا النسق الجميل بين تمثيل جبر الفضاء الخطي و بين تمثيل الدوال الخاصة للزخم الزاوي المداري ليس ورديا كما يظهر، إذ أن هناك منعطف في هذه القصة. ففي جبر الفضاء الخطي وجدنا أن قيمة l تأخذ قيم موجبة صحيحة أو أنصاف أعداد فردية. لكن دوال التوافق الكروية الناتجة عن فصل المتغيرات و حل الجزء الزاوي الناتج عن الحركة الزاوية المدارية تُقيد قيم العدد الكمي l ليكون فقط أعداد موجبة صحيحة، و إلا فإن حل معادلة ليجندر المزاملة لن يتقارب.

ماهو سبب الإختلاف بين التمثيلين لقيم العدد الكمي l؟ الإجابة على هذا السؤال تعود إلى واقع الديناميكا المستخدم في حساب المعادلات المميزة. في وقت أن المعادلة المميزة لدوال التوافق الكروي (7.30) مصدرها معادلة ليجندر المزاملة (A.44) و التي بدورها ناتجة عن ديناميكا الحركة الزاوية المدارية، فإن المعادلة المميزة (10.32) عامة لأي ديناميكا خصائصها التناظرية symmetrical properties توافق تلك التي يحققها الزخم الزاوي المداري. لذلك، في حالة الزخم الزاوي المداري فقط، فإننا نقيد قيم العدد الكمي l ليكون أعداداً صحيحة.

لكن هل هناك حركة (أو حتى حركات) زاوية، عدا الحركة المدارية، لها نفس خصائص التناظر الجبرية لكن عددها (أو أعدادها) الكمية تحمل قيم أنصاف أعداد فردية؟ الإجابة هي نعم! لدينا ما يسمى الحركة الزاوية المغزلية spin angular momentum و التي سندرسها في الباب القادم. بل أن تناظرات الزخم الزاوي عامة تتبع علاقات المجموعة الواحدية الخاصة الثانية special unitary group 2أو SU(2). حتى أن الصورة أكبر من ذلك، حيث أن إحدى القوى الأساسية في الطبيعة تتبع المجموعة SU(2) وهي القوة الضعيفة و التي يطلق على العدد الكمي الخاص لها نظير الحركة المغزلية isospin.

مثال (10.1): من دالة التوافق الكروي $Y_{22}(\theta,\phi) = 3\sqrt{\frac{5}{96\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}$، أثبت أن هذه الدالة معايرة. إستخدم مؤثر الرفع/الخفض لحساب $Y_{21}(\theta,\phi)$. ♠

حل مثال (10.1): شرط المعايرة لدوال التوافق الكروية على الزاوية المجسمة يحسب كالتالي

$$\begin{aligned}\int_\Omega|Y_{22}(\theta,\phi)|^2d\Omega &= 9\frac{5}{96\pi}\int_0^\pi\sin\theta d\theta\sin^4\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,e^{-2i\phi}e^{2i\phi},\\ &= -9\frac{5}{96\pi}\int_0^\pi d(\cos\theta)\sin^4\theta\int_0^{2\pi}d\phi,\\ &= -(2\pi)9\frac{5}{96\pi}\int_0^\pi d(\cos\theta)(\sin^2\theta)^2 = -\frac{15}{16}\int_0^\pi d(\cos\theta)(1-\cos^2\theta)^2,\end{aligned}$$

بأخذ $u=\cos\theta$ مع تبديل حدود التكامل و قلبها للتخلص من الإشارة السالبة نحصل على

$$\begin{aligned}\int_\Omega|Y_{22}(\theta,\phi)|^2d\Omega &= \frac{15}{16}\int_{-1}^1du(1-u^2)^2 = \frac{15}{16}\int_{-1}^1du(1-2u^2+u^4) = \frac{15}{16}(u-\frac{2}{3}u^3+\frac{1}{5}u^5)|_{-1}^1,\\ &= \frac{15}{16}\left[(1-\frac{2}{3}+\frac{1}{5})-(-1+\frac{2}{3}-\frac{1}{5})\right] = \frac{15}{16}\left[(\frac{8}{15})-(-\frac{8}{15})\right] = 1.\end{aligned}$$

إذاً معايرة! لحساب قيمة $Y_{21}(\theta,\phi)$ من $Y_{22}(\theta,\phi)$ نستخدم مؤثر الخفض (10.37) على الطرف الأيمن و الطرف الأيسر في العلاقة (10.45) لنحصل على

$$\hat{L}_- Y_{22}(\theta,\phi) = \hat{L}_- \langle\theta,\phi|2,2\rangle.$$

الطرف الأيمن يصبح

$$\begin{aligned}\hat{L}_-\langle\theta,\phi|2,2\rangle &= \langle\theta,\phi|\hat{L}_-|2,2\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)-2(2-1)}\langle\theta,\phi|2,1\rangle,\\ &= 2\hbar Y_{21}(\theta,\phi).\end{aligned}$$

و عليه يصبح

$$\begin{aligned}Y_{21}(\theta,\phi) &= \frac{1}{2\hbar}\hat{L}_- Y_{22}(\theta,\phi) = \frac{1}{2\hbar}(-\hbar)\,e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(3\sqrt{\frac{5}{96\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}\right),\\ &= -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{5}{96\pi}}\,e^{-i\phi}\left(2e^{2i\phi}\sin\theta\cos\theta - i\cot\theta\sin^2\theta(2i)e^{2i\phi}\right),\\ &= -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{5}{96\pi}}\,e^{-i\phi}\left(4e^{2i\phi}\sin\theta\cos\theta\right) = -6\sqrt{\frac{5}{96\pi}}e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta.\end{aligned}$$

النتيجة تتفق مع قيمة $Y_{21}(\theta,\phi)$ في الجدول (A.2). ♣

10.5 تمثيل المصفوفات لمؤثرات الزخم الزاوي المداري
Matrix representations of angular momentum operators

من المناسب أحياناً، بل من الهام أحياناً أخرى كما سنرى في الباب اللاحق، أن نمثل مؤثرات الزخم الزاوي بمصفوفات. من علاقة التعامد لأساسات الزخم الزاوي (10.38) نستطيع أن نرى أن الحالة توصف بالعددين الكميين l و m_l. السؤال الذي يطرح نفسه أي من هذين العددين الكميين يحدد أبعاد المصفوفة؟ للإجابة على هذا السؤال نعتبر علاقات التبديل (10.17) و التي منها نجد

$$\begin{aligned}0 &= \langle l', m_l'|[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_j]|l, m_l\rangle,\\ &= \langle l', m_l'|\hat{\mathbf{L}}^2\,\hat{L}_j|l, m_l\rangle - \langle l', m_l'|\hat{L}_j\,\hat{\mathbf{L}}^2|l, m_l\rangle,\\ &= \hbar^2\left[l'(l'+1) - l(l+1)\right]\langle l', m_l'|\hat{L}_j|l, m_l\rangle,\end{aligned}$$

حيث $j = x, y, z$. نجد إذاً أن عنصر المصفوفة $\langle l', m_l'|\hat{L}_j|l, m_l\rangle \neq 0$ غير صفري إلا عندما $l' = l$. بالتالي فإت تمثيل المصفوفات لمؤثرات الزخم الزاوي المداري ممكن لقيمة ثابتة من قيم العدد الكمي الزاوي المداري l.

بناء عليه فإننا يمكننا كتابة عنصر المصفوفة للمؤثر $\hat{L}_z$ بإستخدام العلاقة (10.32) و علاقة التعامد (10.38) لنحصل على

$$\langle l, m_l'|\hat{L}_z|l, m_l\rangle = m_l\hbar\,\delta_{m_l' m_l}, \tag{10.46}$$

و الذي يعطي مصفوفة قطرية عناصرها هي $m_l\hbar = l\hbar, (l-1)\hbar, \cdots, -(l-1)\hbar, -l\hbar$ و أبعادها $2l+1$. أي نكتب

$$\mathbf{L_z} = \hbar\begin{bmatrix} l & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & l-1 & \cdots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & -(l-1) & 0\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -l\end{bmatrix}. \tag{10.47}$$

لاحظ أن الأساسات و قيمها المميزة تعطى كالتالي

$$|l,l\rangle \doteq \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |l,l-1\rangle \doteq \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \cdots, |l,-l+1\rangle \doteq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |l,-l\rangle \doteq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{10.48}$$

بناء على الإصطلاح المتبع بتمثيل $\hat{L}_z$ في (10.47)، فإن مؤثر الرفع $\hat{L}_+$ يُخَفِّض من رتبة الصف الذي يحوي الوحدة في مجموعة الأساسات (10.48). في المقابل، فإن مؤثر الخفض $\hat{L}_-$ يرفع من رتبة الصف الذي يحوي الوحدة في مجموعة الأساسات (10.48). هذا يعاكس تماماً المؤثرات الدرجية للحركة التوافقية البسيطة و التي دور مؤثر الرفع $\hat{a}^+$ هو زيادة رتبة الصف الذي يحوي الوحدة، و مؤثر الخفض $\hat{a}^-$ أو خفض رتبة الصف الحاوي للوحدة. لهذا فإن تمثيل المصفوفات لـ $\hat{a}^+$ سيعطي عناصر غير صفرية تحت القطر كما هو في المثال (2)، بينما عناصر المصفوفة لـ $\hat{a}^-$ سيعطي عناصر غير صفرية فوق القطر.

وعليه نستنتج أن العناصر الغير الصفرية لمصفوفة مؤثر الرفع $\hat{L}_+$ ستكون فوق القطر و العناصر الغير الصفرية لمصفوفة مؤثر الخفض $\hat{L}_-$ ستكون أسفل القطر. تحسب عناصر المصفوفة لمؤثري الرفع و الخفض بإستخدام (10.37) و علاقة التعامد (10.38)، لنحصل على

$$\langle l,m_l'|\hat{L}_\pm|l,m_l\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m_l(m_l\pm 1)}\,\delta_{m_l' m_l\pm 1}. \tag{10.49}$$

لحساب المصفوفة $\mathbf{L}_\pm$ نبتدأ من $m_l = l$ و نبدأ بالخفض بمقدار الوحدة حتى نصل إلى $m_l = -l$ أي نذهب بالأساسات من اليمين إلى اليسار في (10.48). عند ثبات قيمة العدد الكمي l يمكن إسقاطه من الأساس $|l,m_l\rangle$ ليُكتب الأساس بالشكل $|m_l\rangle$، و ذلك لاسباب تحريرية محضة لتقليل مساحة المصفوفة. تصبح عندئذٍ عناصر المصفوفة $\mathbf{L}_\pm$ كالتالي

$$\mathbf{L}_\pm = \begin{bmatrix} \langle l|\hat{L}_\pm|l\rangle & \langle l|\hat{L}_\pm|l-1\rangle & \cdots & \langle l|\hat{L}_\pm|-l+1\rangle & \langle l|\hat{L}_\pm|-l\rangle \\ \langle l-1|\hat{L}_\pm|l\rangle & \langle l-1|\hat{L}_\pm|l-1\rangle & \cdots & \langle l-1|\hat{L}_\pm|-l+1\rangle & \langle l-1|\hat{L}_\pm|-l\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \langle -l+1|\hat{L}_\pm|l\rangle & \langle -l+1|\hat{L}_\pm|l-1\rangle & \cdots & \langle -l+1|\hat{L}_\pm|-l+1\rangle & \langle -l+1|\hat{L}_\pm|-l\rangle \\ \langle -l|\hat{L}_\pm|l\rangle & \langle -l|\hat{L}_\pm|l-1\rangle & \cdots & \langle -l|\hat{L}_\pm|-l+1\rangle & \langle -l|\hat{L}_\pm|-l\rangle \end{bmatrix},$$

و عليه نحصل على تمثيل المصفوفات لمؤثر الرفع

$$\mathbf{L}_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2l} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \sqrt{2l} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{10.50}$$

و على تمثيل المصفوفات لمؤثر الخفض

$$\mathbf{L}_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2l} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{2l} & 0 \end{bmatrix}. \tag{10.51}$$

لاحظ أننا لم نخرج $\sqrt{2}$ كمعامل لان بقية العناصر، و التي لم نحسبها، لن تعطي هذا المعامل.

من تعريف مؤثري الرفع و الخفض (10.10) يمكن كتابة مركبتي مؤثر الزخم الزاوي المداري $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ بمعلومية مؤثري الرفع و الخفض $\hat{L}_\pm$ على الصيغة التالية

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-); \quad \text{and} \quad \hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-). \tag{10.52}$$

بإستخدم تمثيل المصفوفات (10.50) و(10.51) لمؤثري الرفع و الخفض $\hat{L}_\pm$، يمكن تمثيل $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ بالمصفوفات لنحصل على

$$\mathbf{L}_\mathsf{x} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2l} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2l} & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \sqrt{2l} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{2l} & 0 \end{bmatrix}, \tag{10.53}$$

و

$$\mathbf{L}_\mathsf{y} = \frac{\hbar}{2i} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2l} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2l} & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2(2l-1)} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\sqrt{2(2l-1)} & 0 & \sqrt{2l} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\sqrt{2l} & 0 \end{bmatrix}. \tag{10.54}$$

يمكن التحقق من أن تمثيل المصفوفات العام أعلاه يحقق جميع العلاقات الجبرية لمؤثر الزخم الزاوي المداري، كعلاقات التبديل (10.17)-(10.21). و العلاقات المميزة (10.32). لكن بسبب كبر حجم المصفوفات العام سيكون من الصعب تحقيق هذه العلاقات. في المثال التالي سنقوم ذلك لقيمة محددة من قيم العدد الكمي الزاوي المداري l.

مثال (10.2): إوجد تمثيل المصفوفات لمؤثرات الزخم الزاوي المداري $\hat{L}_z$ و $\hat{\mathbf{L}}^2$. وذلك للعدد الكمي الزاوي المداري $l = 1$، و أثبت من أنها تحقق علاقة التبديل (10.17) و المعادلة المميزة (10.32). ♠

حل مثال (10.2): من السهل إيجاد $\hat{L}_z$ من (10.46) أو (10.47)، إذا علمنا أنه عند $l = 1$ فإن $m_1 = 1, 0, -1$

لنحصل على

$$\mathbf{L_z} = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

لحساب $\hat{\mathbf{L}}^2$ فإننا نحتاج أيضاً معرفة كلاً من $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ و اللذان نحددهما من المؤثرين $\hat{L}_\pm$

$$\mathbf{L_\pm} = \begin{bmatrix} \langle 1,1|\hat{L}_\pm|1,1\rangle & \langle 1,1|\hat{L}_\pm|1,0\rangle & \langle 1,1|\hat{L}_\pm|1,-1\rangle \\ \langle 1,0|\hat{L}_\pm|1,1\rangle & \langle 1,0|\hat{L}_\pm|1,0\rangle & \langle 1,0|\hat{L}_\pm|1,-1\rangle \\ \langle 1,-1|\hat{L}_\pm|1,1\rangle & \langle 1,-1|\hat{L}_\pm|1,0\rangle & \langle 1,-1|\hat{L}_\pm|1,-1\rangle \end{bmatrix},$$

حيث نجد العناصر الغير صفرية للمؤثر $\hat{L}_+$ هي $\langle 1,1|\hat{L}_+|1,0\rangle$ و $\langle 1,0|\hat{L}_+|1,-1\rangle$ و كلاهما يُعْطي $\sqrt{2}\hbar$ حسب العلاقة (10.49). نحصل على $\mathbf{L_+}$ بالصيغة

$$\mathbf{L_+} = \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

بنفس الطريقة، نجد أن العناصر الغير صفرية للمؤثر $\hat{L}_-$ هي المجاور للعناصر غير الصفرية للمؤثر $\hat{L}_+$، أي العنصرين $\langle 1,0|\hat{L}_-|1,1\rangle$ و $\langle 1,-1|\hat{L}_-|1,0\rangle$ و كلاهما أيضاً يُعْطي $\sqrt{2}\hbar$ حسب العلاقة (10.49). لنحصل على $\mathbf{L_-}$ بالصيغة

$$\mathbf{L_-} = \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

يمكن تحقيق العلاقة (10.37) على الأساسات $|1,1\rangle$، $|1,0\rangle$، و $|1,-1\rangle$. لنأخذ على سبيل المثال الأساس $|1,0\rangle$، نجد أن

$$\begin{aligned} \hat{L}_+|1,0\rangle &\doteq \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ &= \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \doteq \sqrt{2}\hbar|1,1\rangle. \end{aligned}$$

كذلك فإن

$$\begin{aligned} \hat{L}_-|1,0\rangle &\doteq \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ &= \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \doteq \sqrt{2}\hbar|1,-1\rangle. \end{aligned}$$

من معادلة (10.52) و (10.53) نجد أن المركبة $\hat{L}_x$ تكتب بصيغة المصفوفات كالتالي

$$\mathbf{L_x} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

في المقابل نجد من معادلة (10.52) و (10.54) نجد أن المركبة $\hat{L}_y$ تكتب بصيغة المصفوفات كالتالي

$$\mathbf{L}_{\mathsf{y}} = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

نتحقق من علاقة التبديل (10.17) كالتالي

$$\mathbf{L}_{\mathsf{x}}\mathbf{L}_{\mathsf{y}} = \frac{i\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}; \qquad \text{and} \qquad \mathbf{L}_{\mathsf{y}}\mathbf{L}_{\mathsf{x}} = \frac{i\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

لنجد أن

$$\mathbf{L}_{\mathsf{x}}\mathbf{L}_{\mathsf{y}} - \mathbf{L}_{\mathsf{y}}\mathbf{L}_{\mathsf{x}} = i\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = i\hbar\mathbf{L}_{\mathsf{z}},$$

تحقق إذاً علاقة التبديل. إذا أردنا حساب $\hat{\mathbf{L}}^2$ نستخدم (10.16) لنحصل على

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \mathbf{L}_{\mathsf{x}}^2 + \mathbf{L}_{\mathsf{y}}^2 + \mathbf{L}_{\mathsf{z}}^2, \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ &= 2\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

لاحظ أن المعامل $2\hbar^2$ ناتج عن $l(l+1)\hbar^2$ و هي القيمة المميزة للمؤثر $\hat{\mathbf{L}}^2$. ♣

إن تمثيل المصفوفات للزخم الزاوي المداري، وإن كان ليس فريداً، إلا إنه سيكون قاعدة هامة لنا لتمثيل الزخم الزاوي المغزلي (أو اللف) و الذي لايملك أي تمثيل للدوال بسبب طبيعة الحركة المغزلية للجسيمات و التي تعتبر تناظراً داخلياً لها.

10.6 أسئلة و تمارين

سؤال (10.1): عن طريق مساواة ∇ بين الإحداثيات الكروية و الكارتيزية و بتحليل متجهات الوحدة في الإحداثيات الكارتيزية إلى مركباتها الكارتيزية حسب العلاقات (10.6)، أثبت أن

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\cos\phi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\sin\phi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \sin\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}.$$

هذه العلاقات تسهل تحويل المركبات الكارتيزية لمؤثرات الزخم الزاوي من معلوميةالمركبات الكارتيزية إلى معلومية المركبات الكقطبية الكروية. ♢

سؤال (10.2): من السؤال (1) أثبت أن

$$x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

ماهو الشبه بين العلاقة أعلاه وتمثيل $\hat{L}_z$؟ ♢

سؤال (10.3): أثبت بالتفصيل العلاقات (10.7)-(10.9) من العلاقة (10.5) و بتحليل متجهات الوحدة في الإحداثيات الكارتيزية إلى مركباتها الكارتيزية حسب العلاقات (10.6). ♢

سؤال (10.4): أثبت العلاقة (10.4) في الإحداثيات القطبية الكروية. ♢

سؤال (10.5): بإستخدام العلاقات (10.7)-(10.9) في (10.16) أثبت أن

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right].$$

هذه هي نفس العلاقة (7.19) و التي تم إثباتها من تمثيل مؤثر لابلاس بالإحداثيات القطبية الكروية. ♢

سؤال (10.6): بإستخدام تمثيل $\boldsymbol{\nabla}$ في الإحداثيات الإسطوانية في العلاقة (10.2) أوجد مركبات الزخم الزاوي المداري الكارتيزية في الإحداثيات الإسطوانية لجسم يتحرك على سطح إسطوانة نصف قطرها R، و مثلها بمؤثرات تفاضلية. ♢

سؤال (10.7): إما بحساب علاقة التبديل لجميع المركبات أو بإستخدام التحليل الموتر، أثبت أن

$$[x_j, \hat{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkn}x_n; \qquad \text{and} \qquad [\hat{p}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkn}\hat{p}_n.$$

هل تستطيع تفسير عدم إبدالية الموقع مع الزخم الزاوي أو الزخم الخطي مع الزخم الزاوي رياضياً و فيزيائياً؟ ♢

سؤال (10.8): يمكن نمذجة الجزيء CN ككرتين كتلتيهما M_1 و M_2 مرتبتطين بقضيب صلب rigid rod طوله a ليأخذ الجزيء شكل الدمبل dumbbell shape. الدمبل يدور في المستوى حول محور يمر خلال مركز الكتلة و عمودي على المستوى.

أ- أكتب معادلة هاميلتون التي تصف الحركة.

ب- ماهي القيم الطيفية الممكنة للطاقة.

ج- أكتب تعبيراً رياضياً لفرق الطاقة بين الحالة الأرضية و حالة الإثارة الأولى بمعلومية الكتل و a.

هذا مثال آخر من أمثلة النظام ذوالجسمين. ♢

سؤال (10.9): عبر عن التوافق الكروي لـ $l = 0, 1, 2$ كدوال لـ x, y, z. ♢

سؤال (10.10): إحسب عناصر المصفوفة التالية: $\langle l, m_1|\hat{L}_x|l, m_2\rangle$، $\langle l, m_1|\hat{L}_y|l, m_2\rangle$، $\langle l, m_1|\hat{L}_x^2|l, m_2\rangle$، و $\langle l, m_1|\hat{L}_y^2|l, m_2\rangle$. من المناسب إستخدام مؤثرات الرفع و الخفض $\hat{L}_\pm$. ♢

سؤال (10.11): معادلة هاميلتون للدوار المحوري المتناظر an axially symmetric rotator يُعْطى بالعلاقة

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_3}$$

أ- بإستخدام تمثيل المؤثرات و ميكانيكا الكم، إحسب القيم المميزة لـ $\hat{H}$.
ب- أرسم الطيف (القيم المميزة) بإعتبار أن $I_1 > I_3$.
ج- كيف يصبح الطيف في النهاية عندما $I_1 \gg I_3$؟ ♢

سؤال (10.12): إبتداءً من $Y_{44}(\theta, \phi) = Ne^{4i\phi}\sin^4\theta$، حيث N ثابت المعايرة، إحسب $Y_{4\,m_l}$ لجميع قيم m_l الموجبة. ♢

سؤال (10.13): نظام يوصف بالمؤثر الهاميلتوني التالي

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} + \alpha\hat{L}_z,$$

ماهي القيم المميزة (طيف الطاقة) لهذا النظام؟ ♢

سؤال (10.14): إعتبر حالة العزم الزاوي المداري $l = 2$. ما هي القيم المميزة للمؤثرات (أ) $\hat{L}_z$، (ب) $\frac{3}{5}\hat{L}_x - \frac{4}{5}\hat{L}_y$، و (ج) $2\hat{L}_x - 6\hat{L}_y + 3\hat{L}_z$ ؟ ♢

سؤال (10.15): جسيم تحت تأثير جهد متناظر كروياً في حالة توصف بالحزمة الموجية

$$\psi(x, y, z) = N(xy + yz + zx)e^{-\alpha r^2},$$

حيث N ثابت. ماهو إحتمالية أن يعطي قياس $\hat{\mathbf{L}}^2$ صفر؟ ماهو إحتمالية أن يعطي قياس $\hat{\mathbf{L}}^2$ القيمة $6\hbar^2$؟ إذا وجد أن $l = 2$، ماهي الإحتمالات النسبية لـ $m = 2, 1, 0, -1, -2$؟ ♢

11

The spin angular momentum الزخم الزاوي المغزلي

كما يدل عنوان هذا الباب، فإن تسمية الزخم الزاوي المغزلي (أو ببساطة الغَزْل)[1]لجسيم ما تدل على الديناميكا المتعلقة بالدوران حول نقطة مرجع تقع داخل الجسيم نفسه. لهذا السبب فإن الحركة المغزلية تعتبر خاصية جوهرية للجسيم intrinsic property. في واقع الأمر القضية ليست بهذه السهولة، و هذا التصور البسيط قد لايكون واقعياً. للجسيمات التي لها تراكيب داخلية، على سبيل المثال لا الحصر: البروتون، النيوترون، أو النواة الذرية، فإن الحركة المغزلية ناتجة عن الجمع الجبري للعزوم الزاوية المدارية و المغزلية لمكونات هذه الجسيمات حول مركز الكتلة. في المقابل، الجسيمات الأساسية، كالإلكترون مثلاً، تملك غَزْل لكنها جسيمات نقطية point particles لاتراكيب لها structureless و بالتالي ليس لها مركز كتلة. بل و الأدهى هو بعض الجسيمات عديمة كتلة massless particles ، كالفوتون photon على سبيل المثال، له غزْل. و بالتالي الديناميكا المرتبطة بالغَزْل في ميكانيكا الكم ليست لها علاقة بالصورة الكلاسيكية النمطية للحركة المغزلية، كما هو الحال في دوران الكواكب حول محاورها. على سبيل المثال، دوران الأرض حول محورها ناتج عن محصلة الزخم الزاوي المداري لمكونات الأرض من صخور و حبات رمل. لكن لايوجد أي معنى ديناميكي كلاسيكي للحركة المغزلية لجسيم نقطي عديم التراكيب، كالإلكترون حيث لايمكن تحليله إلى مكونات أساسية، أو لجسيم عديم الكتلة كما الفوتون حيث لايوجد له مركز كتلة.

بكلام آخر الغزل هنا هو حصرياً ظاهرة كمية exclusive quantum pheneomena ليست له أي علاقة بالصورة الكلاسيكية. لكن تبقى حقيقة أن الغزل spin خاصية جوهرية للجسيم intrinsic property ، تماماً كما هو الحال في الشحنة الكهربائية. نحن لانعلم، حتى لحظة كتابة هذه الأسطر، ماهي حقيقة الشحنة الكهربائية التي تحملها بعض الجسيمات الأولية لكننا نعلم بوجودها و تأثيراتها من خلال تفاعل الجسيمات مع المجالات الكهربائية الخارجية. بنفس المفهوم نستدل على وجود الحركة المغزلية للجسيمات المشحونة من خلال تكون عزوم مغناطيسية ثنائية القطبية magnetic dipole moments مما يجعل هذه الجسيمات المجهرية مغانط مجهرية تتفاعل مع المجالات المغناطيسية الخارجية.

لماذا إذاً الخلط و سوء الفهم في التسمية؟ في الواقع هذا راجع إلى قصة إكتشاف الغزل و الذي سوف نختصر سردها من أحد مكتشفيها، ألا وهو العالم صامويل جاودسميث Samuel Abraham Goudsmit 1902–1978. بدأت الفكرة في بدايات عام 1925م عندما نشر ولفجانج باولي Wolfgang Pauli ورقة بحث تتضمن مبدأ الإستبعاد exclusion principle، و الذي سمي لاحقاً بإسمه. هذا المبدأ لايسمح لتواجد إلكترونين معاً عند نفس الحالات

---

[1]بعض التراجم يستخدم مصطلح التدويم أو اللف. لكننا هنا سنستخدم الغَزْل لترجمة spin و مصطلح الحركة المغزلية لترجمة spin motion و المِغْزَل للتعبير عن الدالة الموجية و التي يُطلق عليها spinor.

الكمية وبنفس الأعداد الكمية. ولكي يتم تفسير تواجد إلكترونين في الحالة الأرضية لذرة الهيليوم و الذرات المتعددة الإلكترونات، إقترح باولي وجود عدد كمي إضافي يحمله الإلكترون لكن لم يحدد ماهيته أو الديناميكا التي تسببه. في أواخر العام 1925م إقترح العالم جاودسميث Goudsmit أن هذا العدد الكمي يجب أن يكون نصف عدد صحيح half integer من أجل تفسير خطين طيفيين شاذين و غير مسموحين forbidden إكتشفهما العالم باشن Paschen سابقاً لدى دراسته لأطياف العناصر القلوية الأرضية. لاحقاً وجد جاودسميث بعد دراسة مستفيضة للأطياف الذرية أن إعتبار العدد الكمي الإضافي $1/2$ للعزوم الزاوية يفسر جميع الخطوط الطيفية المزدوجة doublets الغير مسموحة و التي أكتشفها باشن. من جهته، العالم أولينبيك Uhlenbeck بخلفيته الكلاسيكية إعتبر أن الإلكترون يتحرك حركة زاوية مغزلية شبيهة بدوران الاجسام حول محاورها. بتعاون العالمان جاودسميث و أولينبيك Goudsmit and Uhlenbeck نشرا إستنتاجاتهما في ورقات بحثية معتبرين أن للإلكترون درجة حرية إضافية additional degrees of freedom مفترضين أنها ديناميكياً ناتجة عن الحركة المغزلية و جبرياً تشبه العزوم الزاوية المدارية. لاحظ أن هذه الدراسات و التنبآت تمت في عهد مايعرف بثورة الدراسات الطيفية و قبل إكتشاف نظرية ميكانيكا الكم.

إلى هنا ننهي قصة إكتشاف الغزل للإلكترون، لكن لهذه القصة تبعاتها خصوصاً بعد إكتشاف ميكانيكا الكم على يد هايزنبرج و شرودنجر، حيث قام باولي بإيجاد تمثيل رياضي لحالة الإلكترون المغزلية بإستخدام المصفوفات لأن الغزل تناظر داخلي لايمكن إستخدام الفضاء الإحداثي للتعبير عن حالته، كما فعلنا مع الزخم الزاوي المداري حينما عبرنا عنه بالدالة الموجية $Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)$. وقد تمت إضافة حالة الغزل يدوياً مع الدالة الموجية الناتجة عن معادلة شرودنجر لتعطي صورة أكمل للإلكترون في ذرة الهيدروجين. في العام 1928م تمكن ديراك Dirac من خلال صياغته لميكانيكا الكم النسبية من التنبأ بوجود الغزل $1/2$ كتناظر أساسي في الصيغة الرياضية للدالة الموجية النسبية بالإضافة إلى تنبأه بوجود الأجسام المضادة من خلال نظريته الكمية النسبية. وأطلق ديراك إسم المغزل (أو المَغَازل) spinor (or spinors) على الدوال الموجية الناتجة عن حل معادلة ديراك، و التي تشبه معادلة شرودنجر من ناحية الصياغة لكنها قائمة على الهاميلتون النسبي.

بعد تطور الفيزياء الحديثة و إكتشاف الجسيمات الأولية وجد أن الغزل عبارة عن تناظر داخلي للجسيمات الأساسية و له قيم مختلفة عن أنصاف الأعداد الفردية. حيث وجد جسيمات لها غزل يحمل أعداداً كمية صحيحة. هذا أدى تماماً إلى تلاشي فكرة إرتباط الحركة المغزلية بالديناميكا الكلاسيكية. في المقابل تطور علم الإحصاء الفيزيائي الكمي quantum statistics القائم على تقسيم الجسيمات إحصائياً إلى نوعين: أحدهما يطلق عليه الفيرميونات fermions و يتبع إحصاء فيرمي-ديراك و له حركة مغزلية (أو غزل) أعدادها الكمية تساوي أنصاف أعداد فردية و يطيع مبدأ باولي للإستبعاد. وثانيهما البوزونات Bosons و يتبع إحصاء بوز-أينشتين و له حركة مغزلية (أو غزل) أعدادها الكمية تساوي أعداد صحيحة ولا يطيع مبدأ باولي للإستبعاد.

بشكل عام الجبر و التناظر الذي يحكم الغزل يتبع نفس الصيغة العامة للزخم الزاوي المداري من مؤثرات و علاقات تبديل. لذلك للغزل إتجاه و مقدار و إن كان هذا الإتجاه ليس بالإتجاه الإقليدي المعهود. كذلك نؤكد مرة أخرى أنه لايوجد أي تمثيل للغزل في الفضاء. لكن يمكننا إستخدام التمثيلات المجردة، كتمثيلات ديراك أو المصفوفات لوصف الغزل رياضياً. لهذا السبب سنعبر عن المغازل χ بطرق مجردة بإستخدام أقواس ديراك تارة و بإستخدام المصفوفات $\boldsymbol{\chi}$ تارة أخرى. في بعض الأحيان سنستخدم χ و $\boldsymbol{\chi}$ ، بالتبادل، لتوصيف المغازل.

11.1 مؤثرات الغزل و علاقات التبديل
Spin operators and commutation relations

إن جبر الزخم المغزلي ليس سوى نسخة كربونية عن جبر الزخم الزاوي. و عليه نفرض مؤثر متجه الزخم المغزلي $\hat{\mathbf{S}}$ والذي يمكن أن يكتب بمعلومية مركباته الكارتيزية

$$\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z), \tag{11.1}$$

و التي تحقق علاقات التبديل

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z; \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y; \quad \text{and} \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \tag{11.2}$$

بصيغ مشابهة تماماً للعلاقات (10.13).

المتجهات المميزة تُحَدَّد من معرفتنا للعدد الكمي المغزلي s و المساقط المغناطيسية m_s لنكتبها على الصيغة $|s, m_s\rangle$ و التي تحقق المعادلات المميزة

$$\hat{\mathbf{S}}^2|s,m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2|s,m_s\rangle; \qquad \text{and} \qquad \hat{S}_z|s,m_s\rangle = m_s\hbar|s,m_s\rangle, \tag{11.3}$$

والتي تماثل نظيراتها في الزخم الزاوي المداري التي إستنتجناه في (10.32). هذا الإستنتاج ماكان ليتم لولا مؤثري الرفع و الخفض $\hat{S}_+$ و $\hat{S}_-$، على الترتيب، و اللذان يعرفان كالتالي

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y, \tag{11.4}$$

تماماً كما في العلاقة (10.10)، وقاعدة تأثيرهما تماثل تلك التي في العلاقة (10.37)، أي أن

$$\hat{S}_\pm|s,m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s\pm 1)}|s,m_s\pm 1\rangle. \tag{11.5}$$

بما أن مجموعة المتجهات المميزة $\{|s,m_s\rangle\}$ لاترتبط بأي علاقة مع دوال التوافق الكروية، وباالتالي مستقلة عن الفضاء الزاوي القطبي و الذي يوصف بالزوايا θ و ϕ، فإنه لايوجد أي تقييد لقيم العدد الكمي المغزلي s مما يعني عدم إستبعاد قيم أنصاف الأعداد الصحيحة. و عليه فإن القيم الممكنة للأعداد الكمية s و m_s تصبح

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots; \qquad m_s = -s, -s+1, \ldots, s-1, s. \tag{11.6}$$

بالرغم من تماثل التوصيف الجبري بين الزخم الزاوي المداري و المغزلي، لكن يبقى هناك بعض الفروقات الهامة من أهمها هو أن الغزل spin، بإعتباره قيمة جوهرية للجسيم لاتعتمد على الفضاء، لايتغير طالما بقي الجسيم. في المقابل فإن الزخم الزاوي المداري يتغير مع تفاعلات الجسيم و إنتقالاته من حالة إلى أخرى، حسب قاعدة إنتقالات معينة سنتحدث عنها في الباب (??). هذا يجعل نظرية الغزل spin أسهل نسبياً.

يبقى فقط أن نناقش القضية التالية: لماذا الإهتمام فقط بـ $\hat{S}_z$ دون المركبتين الأخريين $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ على الرغم من أنهما تمثلان كميات رصودة؟، لماذا لانهتم بإيجاد القيم المميزة وحالات الغزل spin لهما؟ الإجابة تتأتى من علاقات التبديل (11.2). إن قياس أي مركبة من مركبات الحركة المغزلية معناه أنه ليس بالإمكان تحديد قيم المركبتين الأخريين. هذا يظهر جلياً من علاقة عدم التأكد المعممة (8.93) للمؤثرات الغير إبدالية و التي لايمكن قياسها في آن واحد. وعليه يجب أن نختار مركبة واحدة فقط كي نقيس قيم الغزل spin الممكنة لها. وقد إصطلحنا على إعتبارها المركبة بإتجاه z و التي تمثل ايضاً إتجاه المجال المغناطيسي الخارجي و الذي يتفاعل مع العزم المغناطيسي ثنائي القطبية magnetic dipole moment الناتج عن الحركة المغزلية ذاتها للجسيمات المشحونة. إذاً قضية المؤثر $\hat{S}_z$ لتمثيل المِغْزل spin وقياس قيمه المميزة eigenspin هي قضية إصطلاحية لا أكثر ولا أقل.

11.2 الغزل $\frac{1}{2}$ Spin

هي الحالة التي يكون فيها العدد الكمي للغزل $s = 1/2$ و يعتبر من أهم الحالات الفيزيائية نظراً لأن الجسيمات الأساسية (اللبتونات leptons و الكواركات quarks) لها هذه القيمة من الغزل spin. بالإضافة إلى أن الجسيمات المكونة للذرة و نواتها من إلكترونات، بروتونات، و نيوترونات لها $s = 1/2$.

الحالة $s = 1/2$ تعتبر أيضاً من أبسط الحالات مقارنة مع رتب غزل أعلى لأنه في هذه الحالة لدينا مسقطين مغناطيسيين للغزل $m_s = \pm 1/2$. وبالتالي لدينا حالتين مميزيتين للغزل، أولهما: الحالة $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ و التي نطلق عليها الغزل إلى الأعلى spin up و سنرمز لها إختصاراً بحالة الغزل المميزة eigenspin $|\uparrow\rangle$ ونرمز للدالة الموجية (أو المِغْزَل spinor) بـ $\chi_\uparrow$ ، ثانيهما: الحالة $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ و التي نطلق عليها الغزل إلى الأسفل spin down

و سنرمز لها إختصاراً بحالة الغزل المميزة eigenspin $|\downarrow\rangle$ ونرمز للدالة الموجية (أو المِغْزَل spinor) بـ $\chi_\downarrow$. بتمثيل المصفوفات فإن حالتي الغزل كأساسات تمثلان بالمغازل المعايرة التالية

$$|\uparrow\rangle \to \boldsymbol{\chi}_\uparrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad |\downarrow\rangle \to \boldsymbol{\chi}_\downarrow = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{11.7}$$

من العلاقات (11.3) فإن مجموعة العلاقات المميزة للمؤثر $\hat{\mathbf{S}}^2$ تصبح

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\uparrow\rangle ; \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{S}}^2 |\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\downarrow\rangle , \tag{11.8}$$

و للمؤثر $\hat{S}_z$ تصبح

$$\hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar |\uparrow\rangle ; \quad \text{and} \quad \hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hbar |\downarrow\rangle . \tag{11.9}$$

في المقابل، ومن قاعدة تأثير مؤثر الرفع $\hat{S}_+$ في (11.5)، نجد أن

$$\hat{S}_+ |\uparrow\rangle = 0; \quad \text{and} \quad \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle , \tag{11.10}$$

ومن قاعدة تأثير مؤثر الخفض $\hat{S}_-$ في (11.5)، نجد أن

$$\hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle ; \quad \text{and} \quad \hat{S}_- |\downarrow\rangle = 0. \tag{11.11}$$

الآن نحن جاهزون لتمثيل المؤثرات المغزلية على شكل مصفوفات، كما فعلنا سابقاً في القسم (10.5). ولنبدأ مع المؤثر $\hat{\mathbf{S}}^2$ لنحصل على

$$\mathbf{S}^2 = \begin{bmatrix} \langle\uparrow| \hat{\mathbf{S}}^2 |\uparrow\rangle & \langle\uparrow| \hat{\mathbf{S}}^2 |\downarrow\rangle \\ \\ \langle\downarrow| \hat{\mathbf{S}}^2 |\uparrow\rangle & \langle\downarrow| \hat{\mathbf{S}}^2 |\downarrow\rangle \end{bmatrix}.$$

يمكن حساب عناصر المصفوفة أعلاه بضرب العلاقات المميزة (11.8) بالبرا $|\uparrow\rangle$ ثم بالبرا $|\downarrow\rangle$ لنحصل مباشرة على

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbf{I}. \tag{11.12}$$

بنفس الطريقة، و بإستخدام العلاقات المميزة (11.9) نمثل المؤثر $\hat{S}_z$ بالمصفوفات على الصيغة

$$\mathbf{S_z} = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{11.13}$$

بقي أن نمثل مؤثرات الرفع و الخفض لأهميتها في حساب $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$. بالنسبة لمؤثر الرفع $\hat{S}_+$ لو ضربنا العلاقات (11.10) بالبرا $|\uparrow\rangle$ ثم بالبرا $|\downarrow\rangle$ سنجد أن جميع عناصر المصفوفة صفراً ماعدا عنصر المصفوفة $= \langle\uparrow| \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar$ أي العنصر الذي في الصف الأول العمود الثاني. و بالتالي نمثل مؤثر الرفع $\hat{S}_+$ كمصفوفة كالتالي

$$\mathbf{S}_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{11.14}$$

في المقابل، لو ضربنا العلاقات (11.11) بالبرا $|\uparrow\rangle$ ثم بالبرا $|\downarrow\rangle$ سنجد أن جميع عناصر المصفوفة لمؤثر الخفض $\hat{S}_-$ تساوي صفراً، ماعدا عنصر المصفوفة $= \langle\downarrow| \hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar$ أي العنصر الذي في الصف الثاني العمود الأول. و بالتالي نمثل مؤثر الخفض $\hat{S}_-$ كمصفوفة كالتالي

$$\mathbf{S}_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{11.15}$$

من الجدير بالملاحظة أن $\mathbf{S}^2$ في (11.12) و $\mathbf{S}_z$ في (11.13) مصفوفات هيرميشية لأنهما تمثلان كميات فيزيائية رصودة. في المقابل نجد أن $\mathbf{S}_\pm$ في (11.14) و (11.15) غير هيرمشيتين لأنهما كميتان غير رصودتان. في الواقع $\mathbf{S}_\pm$ مجاورين لبعضهما البعض.

الآن يمكننا حساب $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ من $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$ و $\hat{S}_y = \frac{i}{2}(\hat{S}_- - \hat{S}_+)$ ، لنحصل مباشرة على

$$\mathbf{S}_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{11.16}$$

و

$$\mathbf{S}_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \tag{11.17}$$

لاحظ أن $\mathbf{S}_x$ في (11.16) و $\mathbf{S}_y$ في (11.17) مصفوفات هيرميشية لأنهما تمثلان كميات فيزيائية رصودة، وإن كنا إصطلاحياً نعتمد فقط على $\mathbf{S}_z$ لقياس القيم المميزة وتحديد حالة الغزل بسبب عدم قدرتنا على قياس جميع مركبات الغزل بنفس الوقت حسب ما تقتضيه علاقات التبديل (11.2).

يمكن التحقق من أن تمثيل المصفوفات للغزل spin في (11.12) إلى (11.14) تحقق جميع العلاقات المميزة (أو الذاتية) (11.8) إلى (11.11) بتطبيقها مباشرة على المغازل (11.7)، لنجد على سبيل المثال

$$\mathbf{S}_z\, \boldsymbol{\chi}_\uparrow = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\, \boldsymbol{\chi}_\uparrow,$$

و

$$\mathbf{S}_z\, \boldsymbol{\chi}_\downarrow = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar\, \boldsymbol{\chi}_\downarrow.$$

كذلك يمكن التحقق من تأثير مصفوفة الرفع $\mathbf{S}_+$ على المغازل $\boldsymbol{\chi}_\uparrow$ و $\boldsymbol{\chi}_\downarrow$، كالتالي

$$\mathbf{S}_+\, \boldsymbol{\chi}_\uparrow = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0,$$

و

$$\mathbf{S}_+\, \boldsymbol{\chi}_\downarrow = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar\, \boldsymbol{\chi}_\uparrow.$$

بنفس الطريقة، نتحقق من تأثير مصفوفة الخفض $\mathbf{S}_-$ على المغازل $\boldsymbol{\chi}_\uparrow$ و $\boldsymbol{\chi}_\downarrow$، كالتالي

$$\mathbf{S}_-\, \boldsymbol{\chi}_\uparrow = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar\, \boldsymbol{\chi}_\downarrow,$$

و

$$\mathbf{S}_-\, \boldsymbol{\chi}_\downarrow = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0.$$

نؤكد مرة اخرى أن المغازل المعايرة $\boldsymbol{\chi}_\uparrow$ و $\boldsymbol{\chi}_\downarrow$ في (11.7) ليست مغازل مميزة eigenspinors لـ $\mathbf{S}_x$ في (11.16) و $\mathbf{S}_y$ في (11.17). يمكن للقاريء التحقق من ذلك مباشرة. ماذا لو أردنا الخروج عن الإصطلاح و إستخدام $\mathbf{S}_x$ أو $\mathbf{S}_y$ لتمثيل نظام الغزل $\frac{1}{2}$ عوضاً عن $\mathbf{S}_z$؟ الإجابة تأتي في المثال التالي:

مثال (11.1): إحسب القيم المميزة eigenvlaues و المغازل المميزة eigenspinors لمصفوفة مؤثر الغزل $\mathbf{S}_x$ في (11.16)، وتحقق من أنها مغازل مميزة لـ $\mathbf{S}^2$. ♠

حل مثال (11.1): لو إعتبرنا علاقة الغزل المميزة eigenspin تُعْطى بـ $\mathbf{S}_{\times}\,\boldsymbol{\chi}^x = m_s^x\,\boldsymbol{\chi}^x$، حيث m_s^x مساقط الغزل على طول محور x فبإستخدام العلاقة الخاصة (9.24) نكتب علاقة المحدد التالية

$$\det|\mathbf{S}_{\times} - m_s^x\,\hbar\mathbf{I}| = 0,$$

أو

$$\begin{aligned}\det\left|\begin{bmatrix}0 & \frac{\hbar}{2}\\ \frac{\hbar}{2} & 0\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}m_s^x\hbar & 0\\ 0 & m_s^x\hbar\end{bmatrix}\right| &= \begin{vmatrix}-m_s^x\hbar & \frac{\hbar}{2}\\ \frac{\hbar}{2} & -m_s^x\hbar\end{vmatrix},\\ &= (m_s^x\hbar)^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = 0,\end{aligned}$$

ومنها نستنتج أن $m_s^x = \pm\frac{1}{2}$. إذاً لدينا حالتين من حالات الغزل المميزة، حالة الغزل إلى أعلى spin-up (بإتجاه x الموجب) وتوصف بالمغزل spinor $\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x$ و لها القيمة المميزة $\hbar/2$، حالة الغزل إلى أسفل spin-down (بإتجاه x السالب) وتوصف بالمغزل spinor $\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^x$ و لها القيمة المميزة $-\hbar/2$. لنفرض أن المغازل spinors كالتالي

$$\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x = \begin{bmatrix}a_{\uparrow}\\ b_{\uparrow}\end{bmatrix}; \qquad \boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^x = \begin{bmatrix}a_{\downarrow}\\ b_{\downarrow}\end{bmatrix}.$$

نحسب $\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x$ من التعويض في معادلة القيمة المميزة لنحصل على

$$\mathbf{S}_{\times}\,\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x = \frac{\hbar}{2}\,\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x \quad\Rightarrow\quad \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{\uparrow}\\ b_{\uparrow}\end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}a_{\uparrow}\\ b_{\uparrow}\end{bmatrix},$$

ومنها نجد أن

$$\begin{bmatrix}b_{\uparrow}\\ a_{\uparrow}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}a_{\uparrow}\\ b_{\uparrow}\end{bmatrix} \quad\Rightarrow\quad a_{\uparrow} = b_{\uparrow} = a.$$

ننتهي إلى

$$\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x = a\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}.$$

يمكن حساب الثابت a من شرط المعايرة

$$1 = \widetilde{\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x}^*\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x = a^*\begin{bmatrix}1 & 1\end{bmatrix}a\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix} = |a|^2(1+1); \quad\Rightarrow |a| = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

بإهمال الطور للثابت a، يصبح مِعْزَل spinor حالة الغَزْل إلى أعلى spin-up state المعاير كالتالي

$$\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}.$$

بنفس الطريقة، نحسب $\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^x$ من التعويض في معادلة القيمة المميزة لنحصل على

$$\mathbf{S}_{\times}\,\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^x = -\frac{\hbar}{2}\,\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^x \quad\Rightarrow\quad \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{\downarrow}\\ b_{\downarrow}\end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}a_{\downarrow}\\ b_{\downarrow}\end{bmatrix},$$

ومنها نجد أن

$$\begin{bmatrix}b_{\downarrow}\\ a_{\downarrow}\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}a_{\downarrow}\\ b_{\downarrow}\end{bmatrix} \quad\Rightarrow\quad a_{\downarrow} = -b_{\downarrow} = b.$$

ننتهي إلى

$$\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^{x} = b \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

نحسب الثابت b من شرط المعايرة

$$1 = \widetilde{\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^{x}}^{*} \boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^{x} = b^{*} \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} b \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = |b|^{2} (1+1); \quad \Rightarrow |b| = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

بإهمال الطور للثابت b، يصبح مِعْزَل spinor حالة الغَزْل إلى أسفل spin-down state كالتالي

$$\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

لاحظ أن $\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^{x}$ و $\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^{x}$ ليستا أساسات. السبب يعود إلى إننا إعتبرنا الأساسات لـ $\mathbf{S_z}$ و $\mathbf{S}^2$ معاً، وعلى هذا الفرض قمنا ببناء المؤثرات الإخرى. لو قمنا بأخذ الاساسات لـ $\mathbf{S_x}$ و $\mathbf{S}^2$ لتغير التمثيل كلياً ولأصبح مغازل spinors المركبات الأخرى ليست أساسات. التمثيل عموماً ليس بذومغزى طالما أن المؤثرات تحقق علاقات التبديل (11.2). من السهل التحقق من أن

$$\chi_{\uparrow}^{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow} + \chi_{\downarrow}) \quad \text{and} \quad \chi_{\downarrow}^{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow} - \chi_{\downarrow}),$$

ومن هذا المنطلق، يصبح أيضاً من السهل التحقق من أن المعازل spinors $\boldsymbol{\chi}_{\uparrow}^{x}$ و $\boldsymbol{\chi}_{\downarrow}^{x}$ هي معازل مميزة eigen-spinors لـ $\mathbf{S}^2$. ♣

من المثال السابق نجد أن المعنى الفيزيائي لعلاقة الجمع الخطي التي تربط $\chi_{\uparrow}^{x}$ مع كلاً من $\chi_{\uparrow}$ و $\chi_{\downarrow}$، هو أن الجسيم الذي له مركبة x للزخم الزاوي المغزلي تساوي $+\hbar/2$ له 50% إحتمال أن تكون قيمة مركبة z للزخم المغزلي $+\hbar/2$ و 50% أن تكون قيمتها $-\hbar/2$. هذا أيضاً ينطبق على الحالة الأخرى عندما تكون مركبة x للزخم الزاوي المغزلي $-\hbar/2$. بمعنى أنه لو حددنا مركبة x للزخم الزاوي المغزلي فسنفقد الدقة في معرفة مركبة z للزخم المغزلي. حتى نوضح الصورة أكثر، لنفترض أننا قمنا بقياس حالة الغزل spin state لجسيم غزله spin $\frac{1}{2}$ و وجدناه، على سبيل المثال، في الحالة $|\uparrow\rangle$ (أو المغزل $\chi_{\uparrow}$) فإننا نقول أن عملية القياس قد أسقطت حالة الغزل للجسيم على الحالة $\chi_{\uparrow}$. عندها يمكننا القول بكل ثقة أن مركبة z للزخم الزاوي المغزلي تساوي $+\hbar/2$. لكن لو تسائل آخر: ماهي مركبة x للزخم الزاوي المغزلي؟ فإننا مجبرون على الإجابة بأنها غير معروفة تحديداً و إنها ستكون إما $+\hbar/2$ (بإحتمال 50%) أو $-\hbar/2$ (أيضاً بإحتمال 50%). بالطبع هذا لايعني إننا نجهل حالة الغزل spin state للجسيم، على العكس تماماً، الحالة هي $\chi_{\uparrow}$ كما ذكرنا سابقاً، لكن الجسيم لايملك مركبة محددة للزخم الزاوي المغزلي بإتجاه x (وكذلك y) بسبب علاقة التبديل بين $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_z$ وما يتمخض عنها من علاقة عدم اليقين، و التي تعني عدم إمكانية قياسهما في آن واحد. في حالة أننا نريد قياس مركبة x للغزل فإن النتيجة ستكون إما $+\hbar/2$ أو $-\hbar/2$. لو أجرينا فعلاً قياس مركبة x للغزل (بغض النظر عن مدى الدقة و الحرص في عملية القياس كي لا نزعج الجسيم) و كانت النتيجة، على سبيل المثال، $+\hbar/2$ ، فإنه يمكننا القول ان الجسيم أصبح الآن له مركبة غزل محددة بإتجاه x لكن في المقابل فقدنا الحالة الأبتدائية $\chi_{\uparrow}$ و أصبح الآن الجسيم في الحالة الجديدة $\chi_{\uparrow}^{x}$. بقول آخر لا نعلم الآن بالتحديد ماهية مركبة z للغزل، و التي قد تكون إما $+\hbar/2$ أو $-\hbar/2$. [2]

إن نقاش نظرية القياس الكمية على حالة الغزل يساعد كثيراً على فهم ميكانيكا الكم و طبيعتها العجيبة في وجود عدم تحديد في الكميات الفيزيائية للانظمة الكمية. العديد من الكتب و المراجع الرئيسية يستخدم الغزل spin في هذا الإطار، كما هو الحال في المرجع [4].

---

[2] فكرة المناقشة لقياس مركبات الغزل وردت بأسلوب رائع جداً على شكل حوار بين شخصين في المرجع [3] صفحة 217-216.

مثال (11.2): لو فرضنا جسيم غزله spin $\frac{1}{2}$ يُعطى بالحالة

$$\chi = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2+i \\ 2 \end{bmatrix}.$$

تحقق من أن الحالة χ معايرة. ما هي إحتمالية أن نحصل على $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$، لو قسنا $\hat{S}_z$ و $\hat{S}_x$؟ ♠

حل مثال (11.2): نتحقق من المعايرة من الضرب الداخلي للحالة $\boldsymbol{\chi}$، أي

$$\tilde{\boldsymbol{\chi}}^* \boldsymbol{\chi} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2-i & 2 \end{bmatrix} \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2+i \\ 2 \end{bmatrix} = \frac{[(2-i)(2+i)+4]}{9} = \frac{[4+1+4]}{9} = 1.$$

يمكن كتابة الحالة χ كمجموع خطي لأساسات الغزل spin $\frac{1}{2}$ كالتالي

$$\boldsymbol{\chi} = \frac{2+i}{3}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{2}{3}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

أو

$$\chi = \left(\frac{2+i}{3}\right)\chi_\uparrow + \left(\frac{2}{3}\right)\chi_\downarrow.$$

وبالتالي فإن إحتمال أن قياس $\hat{S}_z$ سيعطي $+\hbar/2$ يساوي $\left|\frac{2+i}{3}\right|^2 = \frac{4+1}{9} = \frac{5}{9} = 56\%$. أما إحتمال أن قياس $\hat{S}_z$ سيعطي $-\hbar/2$ يساوي $\left|\frac{2}{3}\right|^2 = \frac{4}{9} = 44\%$. حتى نقيس إحتمالية القيم الممكنة لـ $\hat{S}_x$ نعيد كتابة الحالة χ بمعلومية $\chi^x_\uparrow$ و $\chi^x_\downarrow$ وذلك بإستخدام العلاقة بين $\chi^x_\uparrow$ و $\chi_\uparrow$ و $\chi_\downarrow$ من جهة و $\chi^x_\downarrow$ و $\chi_\uparrow$ و $\chi_\downarrow$ من جهة أخرى من المثال السابق. و عليه نجد أن

$$\chi_\uparrow = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi^x_\uparrow + \chi^x_\downarrow\right); \quad \text{and} \quad \chi_\downarrow = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi^x_\uparrow - \chi^x_\downarrow\right).$$

نعوض في معادلة الحالة χ نحصل على

$$\begin{aligned} \chi &= \left(\frac{2+i}{3}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi^x_\uparrow + \chi^x_\downarrow\right) + \left(\frac{2}{3}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi^x_\uparrow - \chi^x_\downarrow\right), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{2+i}{3}\right) + \left(\frac{2}{3}\right)\right]\chi^x_\uparrow + \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{2+i}{3}\right) - \left(\frac{2}{3}\right)\right]\chi^x_\downarrow, \end{aligned}$$

لننتهي إلى أن

$$\chi = \left(\frac{4+i}{3\sqrt{2}}\right)\chi^x_\uparrow + \left(\frac{i}{3\sqrt{2}}\right)\chi^x_\downarrow.$$

وبالتالي فإن إحتمال قياس $\hat{S}_x$ سيعطي $+\hbar/2$ يساوي $\left|\frac{4+i}{3\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{16+1}{9\times 2} = \frac{17}{18} = 94\%$. أما إحتمال قياس $\hat{S}_x$ سيعطي $-\hbar/2$ يساوي $\left|\frac{i}{3\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{18} = 6\%$. ♣

11.3 The Pauli matrices مصفوفات باولي

من المثير للإهتمام وجود المعامل $\hbar/2$ لـ $\mathbf{S}_x$ ، $\mathbf{S}_y$ ، و $\mathbf{S}_z$. لو إعتبرنا مؤثر الغزل $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ يُعطى من العلاقة

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \tag{11.18}$$

حيث $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ هي تمثيل لمؤثرات في الفضاء الخطي، تتكون من المركبات التالية

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3). \tag{11.19}$$

المؤثرات الخطية $\hat{\sigma}_i$، لكل $i = 1, 2, 3$، تُمثل رياضياً بإستخدام مصفوفات باولي Pauli matrices كالتالي

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{11.20}$$

وهم نفس المصفوفات $\mathbf{S}_x$، $\mathbf{S}_y$، و $\mathbf{S}_z$، على الترتيب، لكن بدون المعامل $\hbar/2$. مصفوفات باولي لها خصائص رياضية مثيرة للإهتمام، نلخصها كما يلي كإمتدادات tensors و مصفوفات:

1. هيرميشية

$$\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i; \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^* = \boldsymbol{\sigma}_i \qquad \forall i = 1, 2, 3. \tag{11.21}$$

2. واحدية أي تحقق

$$\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i^{-1}; \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^* = \boldsymbol{\sigma}_i^{-1} \qquad \forall i, j = 1, 2, 3. \tag{11.22}$$

3. بما أنها هيرميشية و واحدية فإن هذا يعني أنها إرتدادية involutory أي أنها مقلوبة نفسها. رياضياً هذا يعني أن

$$\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i^{-1} = \hat{\sigma}_i; \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^* = \boldsymbol{\sigma}_i^{-1} = \boldsymbol{\sigma}_i; \quad \Rightarrow \quad \hat{\sigma}_i^2 = \hat{I}; \ \forall i = 1, 2, 3. \tag{11.23}$$

4. عديمة الاثر traceless و محددها determinant يساوي سالب الوحدة، اي أن

$$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_i) = 0; \quad \det(\boldsymbol{\sigma}_i) = -1; \qquad \forall i = 1, 2, 3. \tag{11.24}$$

5. جميعها لها نفس القيم المميزة ± 1.

6. تحقق علاقات التبديل

$$[\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l] = 2i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m; \quad \forall k, l, m = 1, 2, 3, \tag{11.25}$$

حيث ε_{klm} مؤشر ليڤي-سيڤيتا المُعَرَّف في (7.22). علاقة التبديل (11.25) تكافيء تماماً علاقات التبديل (11.2) و يمكن إعتبار الجمع على المؤشر المكرر m.

7. تحقق علاقات ضد التبديل anticommutation التالية

$$\{\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l\} = \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l + \hat{\sigma}_l\hat{\sigma}_k = 2\hat{I}\delta_{kl}; \quad \forall k,l,m = 1,2,3, \tag{11.26}$$

بكلام آخر نقول أن مصفوفات باولي عكس إبدالية anticommut.

8. مجموعة مصفوفات باولي مع مصفوفة الوحدة $\mathbf{I}_{2\times 2}$، أو

$$\{\mathbf{I}_{2\times 2}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3\}, \tag{11.27}$$

تمثل مجموعة كاملة من المصفوفات المربعة 2×2 الهيرميشية [3]. بكلام آخر أي مصفوفة مربعة 2×2 هيرميشية (فضاء هِلبرت) يمكن أن تُكتب بمعلومية المجموعة (11.27).

بسبب تمام مجوعة مصفوفات باولي و هيرمشيتهم و خصائصهم الرياضية المميزة، فإنها تُستَخْدم لتمثيل الكميات الفيزيائية الرصودة. أي كمية رصودة يمكن أن تمثل بمصفوفة مربعة $\mathbf{Q}$ تكتب بمعلومية المجموعة الكاملة (11.27)

$$\mathbf{Q} = a_0\mathbf{I} + \sum_{j=1}^{3} a_j\boldsymbol{\sigma}_j, \tag{11.28}$$

حيث أن $\{a_0, a_1, a_2, a_3\}$ ثوابت مركبة. $\mathbf{Q}$ في العلاقة (11.28) تُكتب كمصفوفة مربعة

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q} &= \begin{bmatrix} a_0 & 0 \\ 0 & a_0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & a_1 \\ a_1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -ia_2 \\ ia_2 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_3 & 0 \\ 0 & -a_3 \end{bmatrix}, \\
&= \begin{bmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

الثوابت المركبة $\{a_0, a_1, a_2, a_3\}$ تحدد من علاقات الأثر. لوضربنا طرفي العلاقة (11.28) بـ $\boldsymbol{\sigma}_k$ و حسبنا الأثر trace على الطرفين

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_k\mathbf{Q}) &= \mathrm{Tr}(a_0\boldsymbol{\sigma}_k\mathbf{I}) + \sum_{j=1}^{3}\mathrm{Tr}(a_j\boldsymbol{\sigma}_k\boldsymbol{\sigma}_j), \\
&= a_0\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_k) + \sum_{j=1}^{3} a_j\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_k\boldsymbol{\sigma}_j), \\
&= 0 + \sum_{j=1}^{3} 2a_j\delta_{kj},
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا خاصية الأثر $\mathrm{Tr}(a\mathsf{A}) = a\mathrm{Tr}(\mathsf{A})$ حيث A مصفوفة مربعة و a ثابت مركب. كذلك طبقنا العلاقة (11.22) و (11.23) في خصائص مصفوفات باولي لنجد أن $\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_k\boldsymbol{\sigma}_j) = \delta_{kj}\mathrm{Tr}(\mathbf{I}) = 2\delta_{kj}$. إستخدمنا أيضاً الخاصية (4) لإنعدام الأثر لمصفوفات باولي في العلاقة (11.24). لنصل إلى أن

$$a_j = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_j\mathbf{Q}). \tag{11.29}$$

---

[3] بعض المراجع و المرجعيات تعتبر مصفوفة الوحدة المركبة الصفرية لمصفوفات باولي $\boldsymbol{\sigma}_0$ أو فيما يُعْرف بالمركبة الزمنية temporal component. على إعتبار أن بقية مصفوفات باولي تمثل المركبات الفضائية spatial components و التي تمثل الكميات الرصودة observables التي تقابل مركبات الحركة المغزلية في الفضاء الإقليدي $\mathbb{R}^3$. هذا التمثيل الرباعي المركبات يسمى التمثيل المتغاير covariance representation ويستخدم في تمثيل المتجهات في فضاء منكوفسكي والذي يصف النسبية الخاصة و العامة. فمثلاً متجه الموقع يمثل بـ $x^\mu = (ct, x, y, z)$ حيث $x^0 = ct$ يمثل المركبة الزمنية، و المركبات الفضائية $x^1 = x$، $x^2 = y$، و $x^3 = z$. يمكن أن نكتب فضاء الموقع أيضاً على الصيغة $x^\mu = (ct, \mathbf{r})$. هذا ينطبق أيضاً على متجه الزخم الخطي و الذي يمثل تغايرياً بالمتجه الرباعي $p^\mu = (E/c, \mathbf{p})$ حيث الطاقة تعتبر المركبة الزمنية للزخم بينما متجه الزخم الإقليدي يحوي المركبات الفضائية. مثال آخر متجه كثافة التيار أيضاً يمثل تغايراياً بالمتجه $J^\mu = (c\rho, \mathbf{J})$. هنا كثافة الشحنة تعتبر المركبة الزمنية.

لاحظ أنه من خواص التبديل عند حساب الأثر فإن $\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_j\mathbf{Q}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{Q}\boldsymbol{\sigma}_j)$. نستدل إذاً على مدى أهمية مصفوفات باولي في تمثيل الكميات الرصودة. هنا في هذا الباب، كمثال على تطبيقات باولي إستخدامها كمؤثرات للمغزل. لكن يبقى لها تطبيقات واسعة في الفيزياء النظرية.

يمكن إيجاد علاقة تحول مصفوفات باولي من الصيغة التربيعية إلى الصيغة الخطية و ذلك بجمع الصيغة الموترة tensor form للعلاقاتين (11.25) و (11.26) لنحصل على

$$\{\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l\} + [\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l] = 2\delta_{kl} + 2i\varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m; \quad \forall k, l, m = 1, 2, 3,$$

و التي منها نحصل مباشرة على الصيغة الموترة

$$\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l = \delta_{kl} + i\sum_m \varepsilon_{klm}\hat{\sigma}_m; \quad \forall k, l, m = 1, 2, 3. \tag{11.30}$$

لاحظ أننا أضفنا الجمع $\sum_m$ في الطرف الأيمن و هذا بطبيعة الحال لن يؤثر على الصيغة الموترة لأن رمز ليڤي-سيڤيتا Levi-Civita symbol ε_{klm} سيضمن تلاشي الحدود التي يتساوى فيها أي مؤشرين. لنُعَرِّف الآن المتجهات الموترة covariant tensor vectors $\mathbf{a}$ و $\mathbf{b}$ ذات الستة قيم كالتالي

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3); \quad \text{and} \quad \mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3), \tag{11.31}$$

حيث أن كل مركبة من هذه المتجهات عبارة عن مصفوفة عمودية 1×2، أي

$$a_i = \begin{bmatrix} a_i^{(1)} \\ \\ a_i^{(2)} \end{bmatrix}; \quad b_i = \begin{bmatrix} b_i^{(1)} \\ \\ b_i^{(2)} \end{bmatrix}; \quad \forall i = 1, 2, 3. \tag{11.32}$$

لوضربنا العلاقة (11.30) بالمركبتين a_k و b_l ونطبق الجمع على المؤشرات $\sum_{kl}$ نحصل على

$$\sum_{kl}\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l a_k b_l = \sum_{kl} a_k b_l\delta_{kl} + i\sum_{klm}\varepsilon_{klm}a_k b_l\hat{\sigma}_m. \tag{11.33}$$

يمكن إعادة ترتيب الطرف الأيسر ليصبح عبارة عن

$$\sum_{kl}\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l a_k b_l = \sum_{kl}(\hat{\sigma}_k a_k)(\hat{\sigma}_l b_l) = (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{a})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{b}).$$

في المقابل الحد الأول من الطرف الأيمن يمكن أن يكتب

$$\sum_{kl} a_k b_l\delta_{kl} = \sum_k a_k b_k = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b}.$$

الحد الأخير في الطرف الأيمن، ومن التعريف الموتر للضرب الإقليدي المتجه في (7.21)، يمكن أن يُكتب

$$\sum_{klm}\varepsilon_{klm}a_k b_l\hat{\sigma}_m = \sum_m \hat{\sigma}_m\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right)_m = \hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right).$$

بتعويض الحدود في العلاقة (11.33) نحصل على العلاقة الهامة التالية

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{a})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{b}) = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right). \tag{11.34}$$

في حالة أن $\mathbf{a} = \mathbf{b}$، نحصل من (11.34) العلاقة التالية

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{a})^2 = a^2. \tag{11.35}$$

في حالة أن $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \hat{\mathbf{L}}$ ومن العلاقة (10.4) نحصل من (11.34) التالي

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{L}})^2 = \hat{L}^2 - \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{L}}, \tag{11.36}$$

والتي لها اهمية كبيرة لدى دراسة تفاعل الغزل مع الزخم الزاوي المداري spin-orbit interaction.

11.4 عزم ثنائي القطبية المغناطيسية الداخلي للإلكترون
Intrinsic magnetic dipole moment for electron

للجسيمات الأولية المشحونة و التي تمتلك غزل، تمتلك أيضاً خاصية جوهرية intrinsic property أخرى، الا وهي عزماً مغناطيسياً ثنائي القطبية magnetic dipole moment. بكلام مبسط، تلك الجسيمات عبارة عن مغانط مجهرية. على سبيل المثال الإلكترون يمتلك عزم مغناطيسي ثنائي القطبية مسئول عن الخواص المغناطيسية للذرات و المركبات. أما الجسيمات الغير اساسية، فقد تمتلك عزوم مغناطيسية نتيجة للحركة المدارية و المغزلية لمكوناتها الأساسية المشحونة، حتى لو كان الجسيم الغير اساسي ككل متعادل كهربائياً. على سبيل المثال النيوترون يحمل عزم مغناطيسي ثنائي القطبية عكس إتجاه العزم الزاوي المغزلي خاصته، بالرغم من انه متعادل كهربائياً، مما حدا العلماء أن يستنتجوا بأن النيوترون جسيم غير أساسي، يحوي جسيمات سالبة و موجبة بحيث أن الشحن السالبة تتوزع في فضاء أكبر منه للشحن الموجبة.

سوف نتعرف على السبب التقليدي و الرئيس لوجود عزوم مغناطيسية ثنائية القطبية للجسيمات المشحونة. و منها سننتقل إلى الصيغ الكمية للعزوم المغناطيسية بربطها بالعزوم الزاوية و المغزلية لهذه الجسيمات. و تحديداً سنحصر نقاشنا للإلكترون بدراسة تفاعل عزم ثنائي القطبية المغناطيسية للإلكترون مع المجالات المغناطيسية الخارجية.

11.4.1 العزوم المغناطيسية الخارجية و الداخلية
Extrinsic and intrinsic magnetic moments

كلاسيكياً، أي تيار مستقر steady current I يمر خلال عروة loop تنغلق على مساحة A، كما في الشكل (11.1أ)، يولد عزم ثنائي قطبية مغناطيسية magnetic dipole moment يعطى من خلال العلاقة الكلاسيكية

$$\boldsymbol{\mu} = I\mathbf{A}. \tag{11.37}$$

لنعتبر أنه توجد شحنة نقطية منفردة شحنتها q و كتلتها m تتحرك على طول مسار دائري نصف قطره r بسرعة مماسية v خلال دورة مقدارها T، كما في الشكل (11.1ب). هذا يشبه لحد ما حركة تيار $I = q/T$ في عروة دائرية مع العلم أن حركة الشحنة المنفردة لاتحقق شرط التيار المستقر، لكن من اجل التقريب سنفرض جدلاً أن حركة الشحنة على طول المسار الدائري كبيرة بما فيه الكفاية كي تصبح مقدار الصيغة (11.37) تقريباً تساوي

$$\mu \simeq \frac{q}{T}\pi r^2.$$

حيث يمكن التعويض عن الزمن الدوري $T = 2\pi r/v$ في مقدار العزم أعلاه، لنحصل على

$$\mu \simeq \frac{q}{2\pi r}v\pi r^2 = \frac{q}{2}vr = \frac{q}{2m}mvr,$$

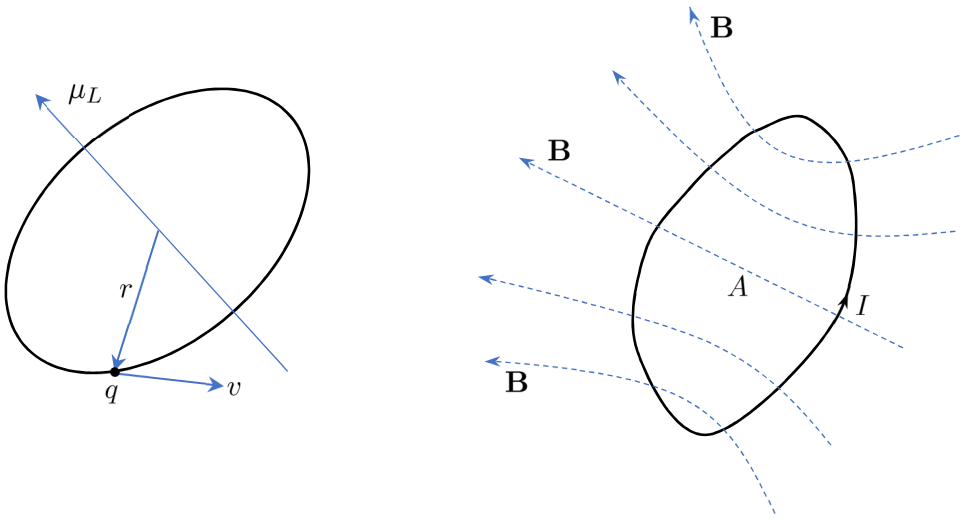
حيث أن المقدار mvr للحركة الدورانية ليس سوى الزخم الزاوي المداري L. و بالتالي نحصل على

$$\mu \simeq \frac{q}{2m}L,$$

مما يعني أن متجه العزم المغناطيسي مرتبط بإتجاه الزخم الزاوي المداري، و لننتقل من صيغة التقريب إلى صيغة التأكيد لنصل إلى

$$\boldsymbol{\mu}_L = g_L\frac{q}{2m}\mathbf{L}. \tag{11.38}$$

المعامل g_L يطلق عليه Landé g-factor و يعطي القيمة الواقعية للعزم المغناطيسي عوضاً عن القيمة المبسطة الناتجة عن المدار الكلاسيكي الدائري. بالإضافة إلى ذلك فإن نسبة μ_L إلى L لاتعتمد على أبعاد المدار orbit أو على الزمن الدوري. بطبيعة الحال سنحصل على نفس النتيجة (11.38) لو قمنا بعمل نفس الحسابات أعلاها لكن لمدار



(ب) (أ)

شكل (11.1): عزم ثنائي القطبية المغناطيسية التقليدي (أ) الناتج عن مرور تيار مستقر I خلال عروة loop تنغلق على مساحة A، و (ب) بسبب حركة شحنة q بسرعة عالية v خلال مدار دائري نصف قطره r.

إهليجي مما يعني أن μ_L/L لاتعتمد على الشكل الهندسي للمدار. إن عدم إعتماد النسبة μ_L/L كلياً على تفاصيل المدار قد يعني أيضاً إستقلالية هذه النسبة عن النظرية الميكانيكية التي نوظفها لحسابها. هذه حقيقة واقعية ستساعدنا بإستخدام نظرية الكم للزخم الزاوي لقياس العزم المغناطيسي ثنائي القطبية (المرجع [5] صفحة 269-268). إن العزم المغناطيسي تنائي القطبية و الناتج عن الحركة المدارية يصنف على إنه من العزوم الخارجية extrinsic dipole moment.

بنفس المفهوم السابق، و بسبب إمتلاك معظم الجسيمات لزخم زاوي مغزلي، فإن هذه الجسيمات تمتلك مغانط جوهرية intrinsic magnets يُعْطى عزمها المغناطيسي ثنائي القطبية من علاقة شبيهة بتلك التي في (11.38)، لكن للغزل تصبح

$$\boldsymbol{\mu}_S = g_S \frac{q}{2m}\mathbf{S}, \tag{11.39}$$

حيث نطلق على الكمية g_S بنسبة الإنجراف المغناطيسية gyromagnetic ratio.

11.4.2 تفاعل ثنائي القطبية المغناطيسية للإلكترون مع المجال المغناطيسي
The interaction of electron's magnetic dipole moment with magnetic field

ينتج عن تعرض الإلكترون إلى مجال مغناطيسي خارجي نوعان من التفاعل: الأول تفاعل تقليدي ناتج عن قوى لورنتز Lorentz force و الثاني تفاعل كمي ناتج عن تفاعل عزم ثنائي القطبية المغناطيسية الناتج عى العزم المغزلي للإلكترون مع المجال المغناطيسي الخارجي. ما يهمنا هنا هو التفاعل الثاني، و الذي يمكن إعتباره أكثر أهمية من التفاعل الأول عند حالات معينة، كما هو الحال للإلكترونات المتموضعه localized electron داخل الشبيكة البلورية [6]. في هذه الحالة نعتبر الغزل درجة الحرية الوحيدة الذي يمتلكها الإلكترون. في هذه الحالة فإن وجود مجال مغناطيسي خارجي على الإلكترون ينتج عنه تفاعل مع عزم ثنائي القطبية المغناطيسية له.

يمكن إستخدام الصيغة (11.39) لحساب متجه عزم ثنائي القطبية المغناطيسية للألكترون لنحصل على

$$\boldsymbol{\mu}_S = -g_e \frac{e}{2m_e}\mathbf{S}, \tag{11.40}$$

حيث أن $g_e = 2(1.0011596\ldots)$ و التي تعتبر من أدق الثوابت في الفيزياء قاطبة، نظرياً و عملياً. حيث تُحْسَب نظرياً بإستخدام نظرية تكمية المجالات الكهروديناميكية quantum electrodynamics و تقاس عملياً

بحجز trap الذرات المثيلة للهيدروجين في مجال مغناطيسي محوري و متجانس مع مجال كهربائي رباعي القطبية غير متجانس [7]. الإشارة السالبة بسبب شحنة الإلكترون. للإلكترون المتموضع محلياً، فإن مؤثر الهاميلتون الناتج عن التفاعل مع المجال المغناطيسي الخارجي $\mathbf{B}$ يُعْطى من طاقة الجهد التالية

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}_S \cdot \mathbf{B} = g_e \frac{e\hbar}{4m_e} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}, \tag{11.41}$$

حيث إستخدمنا علاقة مؤثر الغزل مع مصفوفات باولي $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ حسب العلاقات (11.20) و (11.19). بسبب إعتماد مؤثر الهاميلتون $\hat{H}$ على مؤثر الغزل $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ فإن الحالات المميزة تعطى عن طريق المغازل spinors χ، بحيث تصبح معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن بإستخدام مؤثر الهاميلتون المستقل عن الزمن $\hat{H}$ كالتالي

$$\hat{H}\chi(t) = g_e \frac{e\hbar}{4m_e} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}\chi(t) = i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt}. \tag{11.42}$$

عادة ما نعتبر أن متجه المجال المغناطيسي بإتجاه محور z، أي أن

$$\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}. \tag{11.43}$$

و عليه فإن الكمية $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} = \hat{\sigma}_3 B$ في العلاقة (11.42)، لتصبح (11.42) بعد حذف $\hbar$ من الطرفين كالتالي

$$g_e \frac{eB}{4m_e} \hat{\sigma}_3 \chi(t) = i\frac{d\chi(t)}{dt}, \tag{11.44}$$

حيث أن $\hat{\sigma}_3$ يعوض عنها بالمصفوفة $\boldsymbol{\sigma}_3$ من خلال العلاقة (11.13) أو (11.20)، لنحصل على

$$g_e \frac{eB}{4m_e} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \chi(t) = i\frac{d\chi(t)}{dt}, \tag{11.45}$$

والتي تمثل معادلة تفاضلية زمنية من الرتبة الأولى. لو أعتبرنا دالة المغزل $\chi(t)$ تُعطى بـ

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} a\psi_\uparrow(t) \\ b\psi_\downarrow(t) \end{bmatrix}, \tag{11.46}$$

حيث $\psi_\uparrow(t)$ تمثل حالة الغزل إلى أعلى spin up eignestate بسعة مقدارها a، و $\psi_\downarrow(t)$ تمثل حالة الغزل إلى أسفل spin down eignestate بسعة مقدارها b. هنا a و b عبارة عن ثوابت مركبة. نعرف الكمية ω كالتالي

$$\omega = g_e \frac{eB}{2m_e} = g_e\, \omega_c, \tag{11.47}$$

حيث ω لها نفس أبعاد التردد. ω_c تسمى تردد السيكلوترون للإلكترون cyclotron frequency. نعوض العلاقات (11.46) و (11.47) في (11.45) نحصل على المعادلتين التفاضليتين الزمنيتين

$$-i\frac{1}{2}\omega \begin{bmatrix} a\psi_\uparrow(t) \\ \\ -b\psi_\downarrow(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a\frac{d\psi_\uparrow(t)}{dt} \\ \\ b\frac{d\psi_\downarrow(t)}{dt} \end{bmatrix}, \tag{11.48}$$

حلهما مباشر و يعطي قيم الغزل المميزة

$$\begin{bmatrix} \psi_\uparrow(t) \\ \\ \psi_\downarrow(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ \\ e^{i\omega t/2} \end{bmatrix}, \tag{11.49}$$

ليصبح المغزل المميز للهاميلتون $\hat{H}$ يعطى بالصيغة

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} ae^{-i\omega t/2} \\ \\ be^{i\omega t/2} \end{bmatrix}. \tag{11.50}$$

يمكننا القول أنه لدى تعويض المغزل $\chi(t)$ من (11.50) في معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن (11.42)، نحصل على قيمتي الطاقة المميزة

$$\hat{H}\chi(t) = i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt} = i\hbar \begin{bmatrix} -i\frac{1}{2}\omega a e^{-i\omega t/2} \\ \\ i\frac{1}{2}\omega b e^{+i\omega t/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega a e^{-i\omega t/2} \\ \\ -\frac{1}{2}\hbar\omega b e^{+i\omega t/2} \end{bmatrix},$$

أو

$$E_\uparrow = \frac{1}{2}\hbar\omega = g_e\hbar\frac{eB}{4m_e}; \qquad \text{and} \qquad E_\downarrow = -\frac{1}{2}\hbar\omega = -g_e\hbar\frac{eB}{4m_e}, \tag{11.51}$$

حيث $E_\uparrow$ يمثل الطاقة المميزة عندما يكون غزل الإلكترون إلى أعلى spin up بإتجاه المجال (أي أن إتجاه $\boldsymbol{\mu}_S$ عكس إتجاه $\mathbf{B}$)، و $E_\downarrow$ يمثل الطاقة المميزة عندما يكون غزل الإلكترون إلى أسفل spin down عكس إتجاه المجال (أي أن إتجاه $\boldsymbol{\mu}_S$ بإتجاه $\mathbf{B}$). إن إحتمال إجراء قياس لقيم الطاقة المميزة لنحصل على $E_\uparrow$ هو $|a|^2$، في المقابل إحتمال إجراء قياس لقيم الطاقة المميزة لنحصل على $E_\downarrow$ هو $|b|^2$، يحيث يتحقق من شرط المعايرة

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \tag{11.52}$$

لاحظ، وبسبب شحنة الإلكترون السالبة، $E_\uparrow > E_\downarrow$. أي أن الطاقة تكون أقل عندما يكون $\boldsymbol{\mu}_S$ بإتجاه $\mathbf{B}$. إن الإنتقال من الحالة $\downarrow$ إلى الحالة $\uparrow$ يتم بتزويد الإلكترون المتموضع طاقة تساوي $\hbar\omega$.

بقي أن نحدد قيم الثوابت المركبة a و b من الشروط الإبتدائية للمغزل

$$\chi(0) = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix},$$

بحيث تتحقق العلاقة (11.52). بدون أي فقد للعمومية يمكن كتابة الثوابت المركبة [3] بمعلومية الجيب و جيب التمام

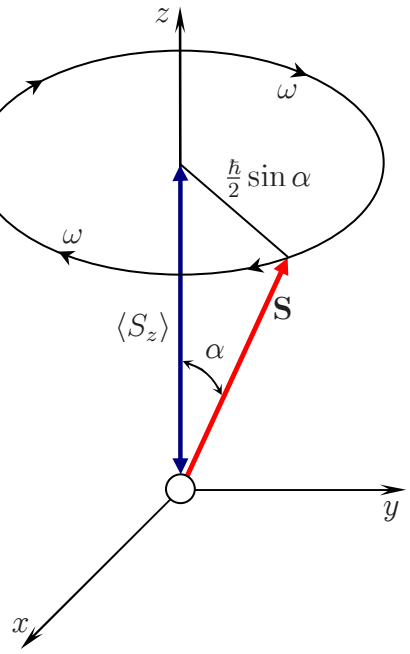
$$a = \cos\frac{\alpha}{2} \qquad \text{and} \qquad b = \sin\frac{\alpha}{2}, \tag{11.53}$$

حيث α زاوية ثابتة سنبحث عن مغزاها الفيزيائي بعد قليل. بذلك يصبح المغزل في (11.50) كالتالي

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t/2} \\ \\ \sin\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t/2} \end{bmatrix}. \tag{11.54}$$

كي نفهم مايحدث هنا أو بالأحرى نتعرف على ديناميكية الالكترون المتموضع تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي ثابت، نقوم بحساب القيم المتوقعه لمركبات الغزل $\mathbf{S}$ كدوال للزمن بإستخدام تمثيل المصفوفات (11.13)، (11.16)، و (11.17). بالتالي نجد أن $\langle S_x\rangle$ يُعطى بـ

$$\begin{aligned}
\langle S_x\rangle &= \boldsymbol{\chi}(t)^\dagger \hat{S}_x \boldsymbol{\chi}(t), \\
&= \begin{bmatrix} \cos\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t/2} & \sin\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t/2} \\ \sin\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t/2} \end{bmatrix}, \\
&= \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} \cos\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t/2} & \sin\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t/2} \\ \cos\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix}, \\
&= \frac{1}{2}\hbar\cos\frac{\alpha}{2}\sin\frac{\alpha}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) = \frac{1}{2}\hbar\left(2\cos\frac{\alpha}{2}\sin\frac{\alpha}{2}\right)\left(\frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}\right).
\end{aligned}$$



شكل (11.2): ترنح precession متجه الغزل $\mathbf{S}$ بوجود مجال مغناطيسي خارجي منتظم بإتجاه محور z.

بإستخدام علاقة أويلر $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm \sin\theta$ و من حساب المثلثات $2\cos\theta\sin\theta = \sin 2\theta$ نصل إلى

$$\langle S_x\rangle = \frac{1}{2}\hbar\,\sin\alpha\,\cos(\omega t). \tag{11.55}$$

بمتابعة نفس الخطوات يمكننا حساب القيم المتوقعة $\langle S_y\rangle$ و $\langle S_z\rangle$، لنحصل على القيم التالية

$$\langle S_y\rangle = \chi(t)^\dagger \hat{S}_y \chi(t) = -\frac{1}{2}\hbar\,\sin\alpha\,\sin(\omega t), \tag{11.56}$$

و

$$\langle S_z\rangle = \chi(t)^\dagger \hat{S}_z \chi(t) = \frac{1}{2}\hbar\,\cos\alpha. \tag{11.57}$$

يتضح من العلاقات (11.55)-(11.57) المعنى الفيزيائي للتردد ω في التعريف (11.47) و الزاوية α في التعريف (11.53). من مفهوم تمثيل المتجهات في الإحداثيات القطبية الكروية نفهم أن متجه الغزل $\mathbf{S}$ يميل عن محور z (إتجاه المجال المغناطيسي) بزاوية α، بينما يترنح $\mathbf{S}$ precess حول محور z بتردد مقداره ω. هذا التردد يطلق عليه تردد لارمور Larmor frequency . هذه الظاهرة موضحة في الشكل (11.2).

إن عملية ترنح ثنائيات القطبية المغناطيسية بوجود مجال مغناطيسي خارجي مثبتة تقليدياً، و أيضاً تنبأت فيها النظرية الكمية. هذا يحقق نظرية إيرنفست Ehrenfest's theorem و التي تؤكد أن القيمة المتوقعة لمتجه الغزل $\langle\mathbf{S}\rangle$ تتطور زمنياً حسب النظرية التقليدية. من المثير للإهتمام دراسة التطور الزمني لمتجه الغزل $\mathbf{S}$ حسب تصور هايزنبرغ في العلاقة (8.107)

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}(t)\right]. \tag{11.58}$$

من علاقة (11.41) يمكن كتابة مؤثر الهاميلتون للجسيمات التي لها شحنة q و غزل $\mathbf{S}$ و المتموضعة في مجال مغناطيسي خارجي $\mathbf{B}$ كالتالي

$$\hat{H} = -g_S\frac{q}{2m_e}\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{B}. \tag{11.59}$$

بإستخدام (11.59) في (11.58) نحصل على

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} g_S \frac{q}{2m_e} \left[\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}, \hat{\mathbf{S}}(t)\right].$$

يمكننا التعبير عن الضرب الداخلي $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = \hat{S}_x B_x + \hat{S}_y B_y + \hat{S}_z B_z$ أو $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = \sum_k \hat{S}_k B_k$. نستخدم الأخير لنحصل على

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = -g_S \frac{i}{\hbar} \frac{q}{2m_e} \sum_k B_k \left[\hat{S}_k, \hat{\mathbf{S}}(t)\right]; \qquad \forall k = x, y, z.$$

لنأخذ التطور الزمني للمركبة l و التي قد تكون x، y، أو z. لنحصل على

$$\frac{d\hat{S}_l}{dt} = -g_S \frac{i}{\hbar} \frac{q}{2m_e} \sum_k B_k \left[\hat{S}_k, \hat{S}_l\right] = -g_S \frac{i}{\hbar} \frac{q}{2m_e} \sum_k B_k (i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{S}_m),$$

حيث إختزلنا علاقات التبديل (11.2) بعلاقة موترة واحدة

$$\left[\hat{S}_k, \hat{S}_l\right] = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} \hat{S}_m. \tag{11.60}$$

عليه التطور الزمني للمركبة l يصبح

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_l}{dt} &= g_S \frac{q}{2m_e} \sum_{k,m} \varepsilon_{klm} B_k \hat{S}_m = g_S \frac{q}{2m_e} \sum_{k,m} \varepsilon_{lmk} B_k \hat{S}_m, \\ &= g_S \frac{q}{2m_e} (\hat{\mathbf{S}} \times \mathbf{B})_l, \end{aligned}$$

لنصل إلى العلاقة العامة

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = g_S \frac{q}{2m_e} (\hat{\mathbf{S}} \times \mathbf{B}). \tag{11.61}$$

النتيجة (11.61) مماثلة تماماً لعلاقة الترنح لمتجه الزخم الزاوي المداري لجسيم مشحون q تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي ممايسبب فتل torque $\boldsymbol{\tau}$ يعطى من خلال العلاقة الكلاسيكية $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_L \times \mathbf{B}$، حيث أن $\boldsymbol{\tau} = d\mathbf{L}/dt$. كذلك فإن النتيجة (11.61) عامة تشمل اي جسيمات لها أي زخم زاوي أو مغزلي، و بالتالي صالحة للتطبيق عندما نقوم بجمع الزخم الزاوي و المغزلي إلى الزخم الكلي $\mathbf{J}$ بحيث أن $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

11.5 أسئلة و تمارين

سؤال (11.1): فيما يخص جبر العزم الزاوي المغزلي، أجب على مايلي:

(أ) تحقق من أن مصفوفات الغزل (11.13)، (11.16)، و (11.17)، تحقق علاقة التبديل الأساسية للزخم الزاوي $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z$.

(ب) تحقق من أن مصفوفات باولي تحقق الخاصية الهيرميشية (11.21).

(ج) تحقق من أن مصفوفات باولي تحقق الخاصية الواحدية (11.22).

(د) تحقق من أن مصفوفات باولي إرتدادية كما هو موضح في العلاقة (11.23).

(هـ) أثبت أن مصفوفات باولي تحقق علاقة التبديل (11.25).

(و) أثبت أن مصفوفات باولي تحقق العلاقة الموترة (11.30).

♢

سؤال (11.2): لديك إلكترون يوصف في الحالة المغزلية

$$\chi = A \begin{bmatrix} 3i \\ 4 \end{bmatrix},$$

حيث A ثابت حقيقي.

(أ) أوجد قيمة ثابت المعايرة A.

(ب) إحسب القيم المتوقعة $\langle S_x \rangle$، $\langle S_y \rangle$، و $\langle S_z \rangle$.

(ج) إحسب القيم المتوقعة $\langle S_x^2 \rangle$، $\langle S_y^2 \rangle$، و $\langle S_z^2 \rangle$. تحقق من أن

$$\langle S_x^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle + \langle S_z^2 \rangle = \langle S^2 \rangle.$$

(د) إحسب ΔS_x، ΔS_y،و ΔS_z. تأكد من تحقيق علاقة عدم اليقين المعممة بالتحقق من أن حاصل الضرب

$$\Delta S_x \Delta S_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle S_z \rangle|$$

يتضح من هذا السؤال مدى قوة علاقة عدم اليقين المعممة و التي تعطي علاقة عدم اليقين بين الكميات الغير إبدالية مباشرة من علاقة التبديل. ♢

سؤال (11.3): يتعلق هذا السؤال بنظرية قياس مركبات الغزل لنظام غزله $1/2$. أجب على مايلي:

(أ) أوجد المغزل المميز eigenspionr و المعاير و القيم المميزة eigenvalues للمؤثر $\hat{S}_y$.

(ب) لو قسنا $\hat{S}_y$ لجسم ما في حالة غزل عامة χ، ماهي القيم الممكن الحصول عليها لكل حالة ($\uparrow$ أو $\downarrow$)؟ تحقق من أن الإحتماليات تنجمع إلى الوحدة.

(ج) لو قسنا $\hat{S}_y^2$، فما هي القيمة التي نحصل عليها و ماهي إحتماليتها.

♢

سؤال (11.4): أوجد تمثيل رياضي بإستخدام المصفوفات للمركبة القطرية للعزم الزاوي المغزلي $\mathbf{S}_r$، حيث أن $\hat{S}_r = \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$. في الإحداثيات القطرية فإن

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{i}} \sin\theta\cos\phi + \hat{\mathbf{j}} \sin\theta\sin\phi + \hat{\mathbf{k}} \cos\theta.$$

أوجد القيم المميزة و المغازل المميزة المعايرة. ♢

سؤال (11.5): أنشأ مصفوقات الغزل ($\mathbf{S}_x$، $\mathbf{S}_y$، و $\mathbf{S}_z$) لجسيم غزله 1. ♢

سؤال (11.6): أثبت بالتفصيل العلاقاتين (11.56) و (11.57). كذلك من علاقة الفتل torque الناتج عن تفاعل عزم ثنائي القطبية المغناطيسي مع مجال مغناطيسي خارجي، أثبت العلاقة (11.61) كلاسيكياً. ♢

سؤال (11.7): أوجد المغزل المميز و المعاير للمصفوفة التالية

$$\begin{bmatrix} \cos\alpha & e^{-i\beta}\sin\alpha \\ e^{i\beta}\sin\alpha & -\cos\alpha \end{bmatrix}.$$

أوجد كذلك المصفوفة الواحدية و التي تُقَطِّرن diagonalize المصفوفة أعلاه. ♢

سؤال (11.8): لأي متجهين $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$ و $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$، أثبت أن

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}).$$

مساعدة: إستخدم خاصية ضد التبديل (11.26) لمصفوفات باولي و العلاقة (11.30). ♢

سؤال (11.9): أثبت أنه لأي متجه $\mathbf{u}$ مقداره u فإن

$$e^{i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{u}} = \cos u + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u} \frac{\sin u}{u}.$$

♢

سؤال (11.10): لديك إلكترون متموضع تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي. حالته المغزلية توصف بالعلاقة (11.54).

(أ) لو قمنا بقياس مركبة الغزل spin component بإتجاه x عند زمن t، ماهو إحتمال أن يُعطي القياس $+\hbar/2$ ؟

(ب) نفس السؤال في الفقرة (أ) لكن لمركبة y.

(ج) أيضاً نفس السؤال في الفقرة (أ) لكن لمركبة z.

مساعدة: لحل أول فقرة تحتاج إلى حساب مسقط χ في العلاقة (11.54) على الحالة $\chi_{\uparrow}^{x}$. $\diamondsuit$

سؤال (11.11): لديك إلكترون متموضع تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي متذبذب

$$\mathbf{B} = B_0 \cos(\omega_0 t)\, \hat{\mathbf{k}},$$

حيث أن B_0 و ω_0 ثوابت حقيقية.

(أ) أنشأ مصفوفة الهاميلتون لهذا النظام.

(ب) إذا بدأ الإلكترون عند $t = 0$ في حالة الغزل إلى أعلى ($\uparrow$) بالنسبة لمحور x (أي أن $\chi(0) = \chi_{\uparrow}^{x}$). أوجد $\chi(t)$ عند أي زمن t. تحذير: الهاميلتون هنا معتمد على الزمن. لذلك لايمكن الحصول على $\chi(t)$ بالطرق المعتادة من الحالة الثابتة زمنيا stationary state. لحسن الحظ، في هذه الحالة يمكن حل معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن مباشرة من خلال العلاقة (11.42).

(ج) ما هو إحتمال الحصول على $-\hbar/2$ إذا قسنا $\hat{S}_x$؟ الإجابة: $\sin\left(\frac{\omega}{2\omega_0}\sin\omega_0 t\right)$ حيث ω تردد لامور تُعطى في (11.47).

((د ما هي أقل قيمة للمجال B_0 و التي تُجبر الإنقلاب الكامل في إتجاه $\hat{S}_x$؟

لاحظ أن السعات الناتجة عن الحسابات و بالتالي الإحتمالات تتغير مع الزمن جيبياً. لمعرفة شدة المجال اللازم كي ينعكس الغزل إلى إتجاه معين نحتاج إلى معرفة قيمة الزاوية و التي تجعل السعة قيمة عظمى في ذلك الإتجاه. $\diamondsuit$

12

Addition of angular momenta تجميع العزوم الزاوية

وجدنا في الأبواب السابقة أن العزوم الزاوية، سواء المدارية أو المغزلية، تمثل بمتجه له مركبات و إن إختلفت طبيعة الفضاءات التي نمثل فيها متجهات العزوم لكننا نفهم أن المتجهات تُجْمَع إلى بعضها البعض إما إضافةً أو إلغاءً. سوف نتعلم في هذا الباب إضافة و تجميع العزوم الزاوية بطرق مختلفة. من الممكن أن نضيف متجه الغزل $\mathbf{S}$ مع متجه الزخم الزاوي المداري $\mathbf{L}$ للجسيم الواحد. أو من الممكن أن نضيف متجه العزم المغزلي لجسيم $\mathbf{S}_1$ إلى متجه العزم المغزلي لجسيم آخر $\mathbf{S}_2$. للوهلة الأولى يبدو إننا نحاول جمع التفاح مع البرتقال على عكس ما تعلمنا أن الإضافة تتم لنفس النوع من الأشياء! لجسيم معين، فإن متجه العزم المغزلي لايرتبط بأي علاقة مع الدالة الموجية المكانية للجسيم spatial wavefunction ، بينما يرتبط الزخم الزاوي المداري بالدالة الموجية و بالأخص بالإحداثيات الزاوية للجسيم. بنفس المفهوم إضافة العزم المغزلي لجسيمين مختلفين يبدو أمراً غير إعتيادي، خصوصاً إذا كان الجسيمين بعيدين عن بعضهما البعض. المتجهات المتواجدة في فضاءات مختلفة نادراً ما يتم جمعها. فمثلاً إضافة المجال الكهربائي عند نقطة ما إلى المجال الكهربائي عند نقطة أخرى ليس له أي تفسير فيزيائي. في المقابل نقول بإيجاد محصلة المجال الكهربائي عند نقطة واحدة. الحال أكثر تعقيداً و تناقضاً في النسبية العامة حيث لا يمكن إضافة متجهات متواجدة في نقاط مختلفة من الفضاء-الزمن space-time.

12.1 البُنى الجبرية لجمع العزوم Algebric bases

إذاً كيف يتم جمع العزوم الزاوية؟ نحتاج أولا إلى إحضار العزوم إلى نقطة مشتركة بحيث يمكن إضافتهم. من المهم أن نوضح أنه على المستوى الجبري الأساسي، فإن كل الزخم الزاوي هو تفاح! لأن جبر العزوم الزاوية يتبع مجموعة مشتركة من الجبر، الا وهي المجموعة الواحدية الخاصة SU(2)، فمن الطبيعي إذاً إضافتهم. إذاً لا نضيف التفاح إلى البرتقال، بل نضيف التفاح إلى التفاح!

سوف نرى القيم المميزة للطاقات لكل مؤثر عزم زاوي على حدا، ستكون أيضا قيم مميزة لمؤثر العزم الكلي الناتج عن مجموع العزوم الزاوية. الرياضيات تسمح عن طريق الضرب الموتر tensor product لحالتين من حالات العزم الزاوي كي نحصل على حالة واحدة. الضرب الموتر إعادة تعريف للضرب بين المجموعات لفضاءات مختلفة للحصول على مجموعة مشتركة، نرمز له بالرمز $\otimes$. إذا كان لدينا فضاء متجه $\mathbb{U}$ و $\mathbb{V}$ فإن الضرب الموتر $\mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ هو أيضاً فضاءً متجهاً بعده يساوي حاصل ضرب بعدي $\mathbb{U}$ و $\mathbb{V}$. حالة خاصة للضرب الموتر هو الضرب الخارجي $\times$ لمتجهين في الفضاء الكارتيزي و الذي يعطي متجه محوري. إذا أعتبرنا العناصر في الفضاء المتجه $v \in \mathbb{V}$ و $u \in \mathbb{U}$ فإن $u \otimes v \in \mathbb{U} \otimes \mathbb{V}$ والتي تعرف بخاصية الإنغلاق closure property. إن الضرب $\otimes$ يتبع جميع خصائص العمليات الجبرية للمجموعات، كالخاصية التجميعية associative property و التوزيعية

distributive و وجود عنصر محايد فريد متجه الوحدة unique unity vector. بالإضافة هنا نشترط الإبدالية commutative إذا لايمكن الجمع بين فضاءات غير إبداليين.

مثال (12.1): الضرب الموتر و الجمع الموتر tensor product and tesnor sum، يرمز لهما على الترتيب بـ $\otimes$ و $\oplus$. يطلق عليهما أيضاً الضرب المباشر والجمع المباشر direct product and direct sum. يُستخدمان للضرب أو الجمع بين المجموعات groups أو الفضائات spaces. كي نفهم طبيعة هذا الضرب و الجمع لنفرض أنه لدينا مجموعتان $\mathbb{A} = \{1, 2, 3\}$ و $\mathbb{B} = \{5, 10\}$. أوجد: $\mathbb{A} \otimes \mathbb{B}$ و $\mathbb{A} \oplus \mathbb{B}$. علق على النتائج و ووضح ما إذا كانت العمليتان إبداليتان أم لا. ♠

حل مثال (12.1): لنبدأ بعملية الضرب:

$$\begin{aligned} \mathbb{A} \otimes \mathbb{B} &= \{1, 2, 3\} \otimes \{5, 10\} = \{1 \times \{5, 10\}, 2 \times \{5, 10\}, 3 \times \{5, 10\}\}, \\ &= \{\{5, 10\}, \{10, 20\}, \{15, 30\}\}. \end{aligned}$$

حيث قمنا بالتوزيع الضربي للمجموعة الثانية على عناصر المجموعة الأولى، و الذي ينتج عنه ثلاث مجموعات (عدد عناصر المجموعة الأولى) كل مجموعة تحوي على عنصرين (على عدد عناصر المجموعة الثانية). بناء عليه فإن هذا الضرب غير إبدالي. لأن قلب ترتيب الضرب لابد أن يعطي مجموعتين كل مجموعة تحوي ثلاث عناصر، أي

$$\mathbb{B} \otimes \mathbb{A} = \{5, 10\} \otimes \{1, 2, 3\} = \{\{5, 10, 15\}, \{10, 20, 30\}\}.$$

بنفس الطريقة فإن الجمع المباشر يصبح

$$\mathbb{A} \oplus \mathbb{B} = \{1, 2, 3\} \oplus \{5, 10\} = \{\{6, 11\}, \{7, 12\}, \{8, 13\}\},$$

أيضاً عملية الجمع هذه غير إبدالية، لأن

$$\mathbb{B} \oplus \mathbb{A} = \{5, 10\} \oplus \{1, 2, 3\} = \{\{6, 7, 8\}, \{11, 12, 13\}\}.$$

هذا مثال بسيط و مباشر على الضرب و الجمع المباشر. قاعدة الضرب أو الجمع تعتمد على التمثيل representation. سنرى كيف نعرف قواعد الجمع و الضرب في مجموعة SU(2). ♣

عملية الضرب أو الجمع المباشر تعتمد على التمثيل representation. في تمثيل المصفوفات، لو إعتبرنا المصفوفة المربعة **A** بعدها $N_A \times N_A$ (أو إختصاراً N_A) و المصفوفة المربعة **B** بعدها $N_B \times N_B$ (إختصاراً N_B)، فإن الضرب الموتر[1] يصبح كالتالي

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix},$$

[1] يسمى أحياناً بالضرب المباشر direct product أو ضرب كرونكر Kronecker Product.

والذي يتم بضرب المصفوفة **B** بأكملها بكل عنصر من عناصر المصفوفة **A**، أي

$$\begin{bmatrix} a_{11}\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} & a_{12}\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} & \cdots \\ a_{21}\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} & a_{22}\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix},$$

والذي ينتج عنه مصفوفة أبعادها $N_AN_B \times N_AN_B$ (إختصاراً N_AN_B) تُعطى كالتالي

$$\mathbf{A}\otimes\mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & \cdots & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & \cdots \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & \cdots & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots\ldots & \vdots & \vdots & \cdots \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & \cdots & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & \cdots \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & \cdots & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

بناء على القاعدة الجبرية أعلاه، لو إعتبرنا جسيم له غزل $\mathbf{S}$ فإنه لا يمكننا الجمع بين فضاء الإحداثيات coordinate space للجسيم الممثل بمجموعة الكت اللانهائية $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ و التي تعتبر اساسات للمؤثر $\hat{\mathbf{r}}$ مع فضاء الزخم الخطي momentum space لنفس الجسيم و الممثل بمجموعة الكت اللانهائية $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ و التي تعتبر اساسات للمؤثر $\hat{\mathbf{p}}$، على الرغم من أن كلا الفضائين يعتبران فضائين مكانيين spatial space. السبب يعود إلى أن كلاً من $\hat{\mathbf{r}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ غيرإبداليين. في المقابلأ فإن الوصف الكامل للجسيم يجب أن يأخذ بالحسبان درجات الحرية المكانية spatial degrees of freedom (إما $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ أو $\{|\mathbf{p}\rangle\}$) مع درجات الحرية الداخلية internal degrees of frees of freedom و التي توصف بالكت المتناهي البعد $\{|s,m_s\rangle\}$ (له $2s+1$ بعد) و الذي يبني فضاء المؤثرين $\hat{\mathbf{S}}^2$ و $\hat{S}_z$. لاحظ هنا أن كل من $\hat{\mathbf{r}}$ أو $\hat{\mathbf{p}}$ إبداليين مع كل من $\hat{\mathbf{S}}^2$ و $\hat{S}_z$. على هذا الأساس يمكننا النظر إلى أساسات أعم ناتجة عن الضرب الموتر للأساسات المتناهية $\{|s,m_s\rangle\}$ بـالأساسات الغير المتناهية $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ لنحصل على

$$|\mathbf{r},s,m_s\rangle = |\mathbf{r}\rangle\otimes|s,m_s\rangle, \tag{12.1}$$

بحيث أن المؤثرات التي تُبنى على الأساسات $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ تكون إبدالية مع أي مؤثر له $2s+1$ بعد مبني على الاساسات $\{|s,m_s\rangle\}$. لهذا السبب في كثير من المراجع تُكتب الدالة الموجية الكلية التي تصف إحداثيات و غزل جسيم

$$\langle\mathbf{r},s,m_s|\alpha\rangle = \Psi_{\alpha,s,m_s}(\mathbf{r}) = \psi_\alpha(\mathbf{r})\chi_{s,m_s}, \tag{12.2}$$

بناءً على الأساس الرياضي في (12.1). للإلكترون على سبيل المثال تُمثل الدالة الموجية كالتالي

$$\Psi_{e,\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \psi_e(\mathbf{r})\begin{bmatrix}\chi_\uparrow\\ \chi_\downarrow\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\psi_\uparrow(\mathbf{r})\\ \psi_\downarrow(\mathbf{r})\end{bmatrix},$$

حيث تمثل $|\psi_\uparrow(\mathbf{r})|^2$، على سبيل المثال، كثافة الإحتمالية للجسيم بأن يتواجد عند الموقع $\vec{\mathbf{r}}$ بغزل إلى أعلى spin up.

بنفس الفكرة، يمكن توسيع حالات الكت $\{|l,m_l\rangle\}$ المميزة للمؤثرين $\hat{\mathbf{L}}^2$ و $\hat{L}_z$ كما في (10.32)، والتي لها $2l+1$ بُعْد، لتشمل الغزل $\{|s,m_s\rangle\}$ (له $2s+1$ بعد) لنحصل بعدها على مجوعة كت مميزة لـ $\hat{\mathbf{L}}^2$ و $\hat{\mathbf{S}}^2$، بالإضافة إلى $\hat{\mathbf{J}}^2$ و $\hat{J}_z$. المؤثران الأخيران ناتجان عن الجمع الموتر لفضاء الزخم الزاوي مع فضاء الزخم المغزلي و سوف نشرح ذلك بالتفصيل في الأقسام التالية.

12.2 جمع العزوم المغزلية Adding spins

سنعمم النقاش في هذا القسم لجسيمين مختلفين رقم 1 و رقم 2 لهما غزلين $\hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}}_2$ بحالات الكِت المميزة $|s_1, m_{s_1}\rangle$ و $|s_2, m_{s_2}\rangle$ على التوالي و التي تحقق العلاقات المميزة (11.3). سوف نخصص النقاش لاحقاً للحالة الخاصة $s_1 = s_2 = 1/2$. نرمز لأبعاد فضاء $\hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}}_2$ بـ d_1 و d_2 معرفة من خلال العلاقة

$$d_1 \equiv 2s_1 + 1; \qquad \text{and} \qquad d_2 \equiv 2s_2 + 1. \tag{12.3}$$

سنلخص علاقات التبديل الأساسية كالتالي

$$[\hat{S}_{1a}, \hat{S}_{2b}] = 0; \qquad [\hat{S}_{1a}, \hat{S}_{1b}] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{S}_{1c}; \qquad [\hat{S}_{2a}, \hat{S}_{2b}] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{S}_{2c}, \tag{12.4}$$

حيث أن المؤشرات a, b, c تجري على جميع المركبات x, y, z.

الزخم المغزلي الكلي $\hat{\mathbf{S}}$ ناتج عن جمع الضرب الموتر التالي

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_{d_2\times d_2} + \hat{\mathbf{S}}_2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_{d_1\times d_1}, \tag{12.5}$$

حيث أن $\hat{\mathbf{1}}_{d_1\times d_1} = \hat{\mathbf{1}}_1$ (أو $\hat{\mathbf{1}}_{d_2\times d_2} = \hat{\mathbf{1}}_2$) يمثل مؤثر الوحدة identity operator في فضاء الغزل للجسيم رقم 1 (أو الجسيم رقم 2). نتحقق من أن التعريف (12.5) لايغير علاقات التبديل للزخم الزاوي، نحسب علاقة التبديل التالية

$$\begin{aligned}
[\hat{S}_a, \hat{S}_b] &= [\hat{S}_{1a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1, \hat{S}_{1b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1], \\
&= [\hat{S}_{1a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2, \hat{S}_{1b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1] + \\
&\quad [\hat{S}_{2a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1, \hat{S}_{1b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1], \\
&= \underbrace{[\hat{S}_{1a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2, \hat{S}_{1b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2]}_{i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{S}_{1c}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2} + \underbrace{[\hat{S}_{1a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2, \hat{S}_{2b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1]}_{=0} + \\
&\quad \underbrace{[\hat{S}_{2a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1, \hat{S}_{1b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2]}_{=0} + \underbrace{[\hat{S}_{2a}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1, \hat{S}_{2b}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1]}_{i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{S}_{2c}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1},
\end{aligned}$$

لنصل إلى

$$[\hat{S}_a, \hat{S}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}(\hat{S}_{1c}\otimes\hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2c}\otimes\hat{\mathbf{1}}_1) = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{S}_c. \tag{12.6}$$

بكلام آخر، مركبات الزخم الزاوي الكلي تطيع علاقات التبديل الأساسية للعزوم الزاوية. إن فضاء مؤثر الزخم الزاوي المغزلي الكلي $\hat{\mathbf{S}}$ يبنى على مجموعة الأساسات $\{|s, m_s\rangle\}$ التي لها بعد $d = d_1 \times d_2$ و الناتج عن الضرب الموتر $|s_1, m_{s_1}\rangle \otimes |s_2, m_{s_2}\rangle$. لدينا هنا خيارين لكيفية إختيار مجموعة الكِت $\{|s, m_s\rangle\}$ كالتالي

الخيار الأول: نختار الكِت المميزة المتزامنة simultaneous eigenkets للمؤثرات الإبدالية التالي: $\hat{\mathbf{S}}_1^2$، $\hat{\mathbf{S}}_2^2$، S_{1z}، و S_{2z}. سندلل على هذه المجموعة المميزة من الكِت بـ $\{|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle\}$، حيث تحقق المعادلات المميزة

$$\hat{\mathbf{S}}_j^2|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle = s_j(s_j+1)\hbar^2|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle; \qquad \forall j = 1, 2, \tag{12.7}$$

و

$$\hat{S}_{jz}|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle = m_{s_j}\hbar|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle, \qquad \forall j = 1, 2. \tag{12.8}$$

الخيار الثاني: نختار مجموعة كِت مميزة للمؤثرات المتزامنة $\hat{\mathbf{S}}^2$، S_z، $\hat{\mathbf{S}}_1^2$، و $\hat{\mathbf{S}}_2^2$. لذلك سيكون من المناسب التعبير عن $\{\{|s,m_s\rangle\}\}$ بـ $\{|s_1,s_2;s,m_s\rangle\}$.

سنذهب إلى الخيار الثاني، بحيث نكتب

$$|s_1,s_2;s,m_s\rangle = |s_1,m_{s_1}\rangle \otimes |s_2,m_{s_2}\rangle, \tag{12.9}$$

ببعد يساوي

$$d = \sum_s (2s+1) = (2s_1+1)(2s_2+1). \tag{12.10}$$

بهذه الطريقة أنشأنا مجموعة كِت مميزة للمؤثرين $\hat{\mathbf{S}}^2$، $\hat{S}_z$، بالإضافة إلى المؤثرين $\hat{\mathbf{S}}_1^2$، $\hat{\mathbf{S}}_2^2$. جميع هذه المؤثرات متزامنة لأنها جميعاً إبدالية مع بعضها البعض ولهم مجموعة كِت مشتركة تُعْطى في (12.9). لاحظ أننا في الخيار الثاني حذفنا العددين الكميين m_{s_1} و m_{s_2} و أكتفينا بـ m_s. ألسبب يعود إلى أن $\hat{\mathbf{S}}^2$ غير إبدالي مع كلاً من $\hat{S}_{1z}$ و $\hat{S}_{2z}$، بسبب وجود الحدود التي تحوي مركبات x و y للمؤثرين $\hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}}_2$، كما يظهر من خلال

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{S}}^2 &= \left(\hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_1\right) \cdot \left(\hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_1\right), \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_1 + 2\left(\hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_1\right), \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_1 + \\
&\quad 2\left(\hat{S}_{1x} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 \cdot \hat{S}_{2x} \otimes \hat{\mathbf{1}}_1 + \hat{S}_{1y} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 \cdot \hat{S}_{2y} \otimes \hat{\mathbf{1}}_1 + \hat{S}_{1z} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 \cdot \hat{S}_{2z} \otimes \hat{\mathbf{1}}_1\right),
\end{aligned}$$

والذي يخالف شروط الإبدالية مع كلاً من $\hat{S}_{1z}$ و $\hat{S}_{2z}$. بطبيعة الحال لدينا أربع كميات رصودة إبدالية مع بعضها البعض commuting observables و التي تُعطى في المجموعة $\{\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z, \hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_2^2\}$، بحيث تتحقق المعادلات المميزة

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{S}}^2|s_1,s_2;s,m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2|s_1,s_2;s,m_s\rangle, \\
\hat{S}_z|s_1,s_2;s,m_s\rangle &= m_s\hbar\,|s_1,s_2;s,m_s\rangle.
\end{aligned} \tag{12.11}$$

العدد الكمي المغزلي الكلي s إما عدد صحيح integer أو أنصاف اعداد فردية half integer. السبب المباشر يعود إلى أن مركبات $\hat{\mathbf{S}}$ تحقق علاقات التبديل العامة للعزوم الزاوية (12.6). السبب الغير مباشر هو أن الغزل للجسيمات إما عدد صحيح أو أنصاف أعداد فردية و لدى جمعها فالناتج إما عدد صحيح أو أنصاف أعداد فردية. الحاصل هو أن m_s تأخذ القيم $s, s-1, \ldots, -(s-1), -s$. بالإضافة إلى ذلك، و من علاقة (12.5)، نجد أن $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2z} \otimes \hat{\mathbf{1}}_1$ وبالتالي نجد أن

$$\begin{aligned}
\hat{S}_z|s_1,s_2;s,m_s\rangle &= \left(\hat{S}_{1z} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \hat{S}_{2z} \otimes \hat{\mathbf{1}}_1\right)\left(|s_1,m_{s_1}\rangle \otimes |s_2,m_{s_2}\rangle\right), \\
m_s\hbar|s_1,s_2;s,m_s\rangle &= \hat{S}_{1z}|s_1,m_{s_1}\rangle \otimes \hat{\mathbf{1}}_2|s_2,m_{s_2}\rangle + \hat{S}_{2z}|s_2,m_{s_2}\rangle \otimes \hat{\mathbf{1}}_1|s_1,m_{s_1}\rangle, \\
&= m_{s_1}\hbar|s_1,m_{s_1}\rangle \otimes 1|s_2,m_{s_2}\rangle + m_{s_2}\hbar|s_2,m_{s_2}\rangle \otimes 1|s_1,m_{s_1}\rangle, \\
&= (m_{s_1}+m_{s_2})\hbar(|s_1,m_{s_1}\rangle \otimes |s_2,m_{s_2}\rangle) \\
&= (m_{s_1}+m_{s_2})\hbar|s_1,s_2;s,m_s\rangle,
\end{aligned}$$

لاحظ أننا طبقنا إبدالية الضرب الموتر

$$|s_1,m_{s_1}\rangle \otimes |s_2,m_{s_2}\rangle = |s_2,m_{s_2}\rangle \otimes |s_1,m_{s_1}\rangle,$$

و الذي يعني أن $|s_1,s_2;s,m_s\rangle = |s_2,s_1;s,m_s\rangle$ كذلك إستخدمنا الخاصية التوزيعية و التجميعية. كذلك إعتبرنا مؤثر الوحدة يعطي قيمة مميزة هي الوحدة، أي أن

$$\hat{\mathbf{1}}_1|s_1,m_{s_1}\rangle = 1|s_1,m_{s_1}\rangle = |s_1,m_{s_1}\rangle.$$

نستنتج إذاً أن

$$m_s = m_{s_1} + m_{s_2}. \tag{12.12}$$

بما أننا نعلم أن القيمة العظمى لـ m_s هي s، بينما القيم العظمى لـ m_{s_1} و m_{s_2} تصل إلى s_1 و s_2، على الترتيب. إذاً من (12.12) نستنتج مباشرة أن $s \leq s_1 + s_2$. يمكن للعدد الكمي m_{s_1} أخذ القيم s_1 أو $-s_1$. في المقابل العدد الكمي m_{s_2} يمكنه أخذ القيم $-s_2$ أو s_2. و بالتالي فإن m_s تصل إلى أدنى مقدار $s_1 - s_2$ أو $s_2 - s_1$ والتي تمثل أصغر قيمة متاحة للعدد الكمي المغناطيسي m_s لكن في الوقت نفسه قد تمثل قيمة العدد الكمي المغزلي الكلي s. هذا يعني أن s له أدنى قيمة متاحة $|s_1 - s_2|$. من هذا المنطلق يمكننا تخمين طيف جميع القيم المتاحة لـ s و التي تتراوح بين القيم

$$s_1 + s_2 \geq s \geq |s_1 - s_2|, \tag{12.13}$$

و التي تتفق مع متراجحة المثلث الناتجة عن جمع المتجهات. لكل قيمة مسموحة من قيم s يوجد لدينا $2s + 1$ قيمة ممكنة لـ m_s. هذا يعني أن مجموع التضاعفات الممكنة ستُعْطي بُعْد الفضاء الكلي، كما في العلاقة (12.10). يمكن إثباتها بإعتبار أن $s_1 \geq s_2$، و بالتالي

$$\begin{aligned}
\sum_{s=s_1-s_2}^{s_1+s_2} (2s+1) &= \sum_{s=0}^{s_1+s_2} (2s+1) - \sum_{s=0}^{s_1-s_2-1} (2s+1), \\
&= (s_1+s_2+1)^2 - (s_1-s_2)^2, \\
&= 2s_1 + 2s_2 + 4s_1s_2 + 1, \\
&= 2s_1 + 1 + 2s_2(2s_1+1), \\
&= (2s_1+1)(2s_2+1),
\end{aligned}$$

حيث أننا إستخدمنا حقيقة أن $\sum_{n=0}^{N} n = N(N+1)/2$. إذاً نعمم العلاقة (12.10) لتصبح

$$\sum_{s=|s_1-s_2|}^{s_1+s_2} (2s+1) = (2s_1+1)(2s_2+1), \tag{12.14}$$

مما يتفق مع فرضيات الضرب الموتر لجمع العزوم. الجدول (12.1) يوضح جميع قيم كِت المميزة و الممكنة لعزم الزاوي المغزلي الكلي.

بقي أن نقول أن نقاشنا أعلاه يصلح لجمع أي منظومة زخزم زاوي تتبع علاقات التبديل (12.4). يمكن تطبيق ذات النقاش أعلاه لجمع زخم زاوي مداري $\hat{\mathbf{L}}$ مع زخم زاوي مغزلي $\hat{\mathbf{S}}$ لذات الجسيم، لينتج الزخم الزاوي الكلي $\hat{\mathbf{J}}$. كذلك يمكن تطبيقه لجمع الزخم الزاوي الكلي $\hat{\mathbf{J}}_1$ للجسيم رقم 1 مع الزخم الزاوي الكلي $\hat{\mathbf{J}}_2$ للجسيم رقم 2. في النظام ذي الجسيمين، على سبيل المثال الديوترون، يمكن حساب الزخم الزاوي الكلي للديوترون بحساب الزخم المغزلي الكلي للبروتون و النيوترون، و إضافته جبرياً للزخم الزاوي المداري النسبي.

12.3 معاملات كلبش-جوردن Clebsch-Gordan coefficients

تكلمنا سابقاً عن الخيارات المتاحة لمجموعة الكت، وقلنا أنه لدينا الخيار الأول$\{|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle\}$ للمؤثرات الإبدالية $\hat{\mathbf{S}}_1^2$، $\hat{\mathbf{S}}_2^2$، S_{1z}، و S_{2z}. هذه المجموعة كاملة، أي أن

$$\sum_{m_1,m_2} |s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}| = 1, \tag{12.15}$$

جدول (12.1): جميع قيم كت المميزة و الممكنة للعزم الزاوي المغزلي الكلي $\hat{\mathbf{S}}$ الناتج عن جمع المغزلين $\hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}}_2$.

$m_s \downarrow \vec{P}\ s$	s_1+s_2	s_1+s_2-1	s_1+s_2-2	$\cdots$	s_1-s_2
s_1+s_2	$\lvert s_1+s_2, s_1+s_2\rangle$				
s_1+s_2-1	$\lvert s_1+s_2, s_1+s_2-1\rangle$	$\lvert s_1+s_2-1, s_1+s_2-1\rangle$			
s_1+s_2-2	$\lvert s_1+s_2, s_1+s_2-2\rangle$	$\lvert s_1+s_2-1, s_1+s_2-2\rangle$	$\lvert s_1+s_2-2, s_1+s_2-2\rangle$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
s_1-s_2	$\lvert s_1+s_2, s_1-s_2\rangle$	$\lvert s_1+s_2-1, s_1-s_2\rangle$	$\lvert s_1+s_2-2, s_1-s_2\rangle$	$\cdots$	$\lvert s_1-s_2, s_1-s_2\rangle$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$-(s_1+s_2-2)$	$\lvert s_1+s_2, -(s_1+s_2-2)\rangle$	$\lvert s_1+s_2-1, -(s_1+s_2-2)\rangle$	$\lvert s_1+s_2-2, -(s_1+s_2-2)\rangle$		
$-(s_1+s_2-1)$	$\lvert s_1+s_2, -(s_1+s_2-1)\rangle$	$\lvert s_1+s_2-1, -(s_1+s_2-1)\rangle$			
$-(s_1+s_2)$	$\lvert s_1+s_2, -(s_1+s_2)\rangle$				

و بالتالي يمكن أن نكتب مجوعة الكت المميزة في الخيار الثاني $\{|s_1, s_2; s, m_s\rangle\}$ بمعلومية مجموعة الكت المميزة في الإختيار الأول $\{|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle\}$ كالتالي

$$\begin{aligned} |s_1, s_2; s, m\rangle &= \left(\underbrace{\sum_{m_{s_1}, m_{s_2}} |s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|}_{=1} \right) |s_1, s_2; s, m_s\rangle, \\ &= \sum_{m_{s_1}, m_{s_2}} \langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle \; |s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle. \end{aligned}$$

إن عنصر المصفوفة

$$\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle \,, \tag{12.16}$$

تُسمى معاملات كلبش-جوردن Clebsch Gordan coefficients[2] و هي تُعْطِي سعة الحصول على الحالة $|s, m_s\rangle$ من جمع الحالات $|s_1, m_{s_1}\rangle$ و $|s_2, m_{s_2}\rangle$. إن المعاملات التي لاتحقق المعادلة (12.12) تختفي. و عليه يمكن أن نفرض شرط المعادلة (12.12)، لنكتب

$$\begin{aligned} |s_1, s_2; s, m_s\rangle = \sum_{\substack{m_{s_1}, m_{s_2} \\ m_{s_1}+m_{s_2}=m_s}} & \langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle \\ & \times |s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle. \end{aligned} \tag{12.17}$$

إن معاملات كلبش-جوردن (12.16) لها الخصائص التالية:

1- عنصر مصفوفة حقيقية: بالإصطلاح نعتبر عنصر المصفوفة (12.16) حقيقي. و عليه فإن

$$\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle = \langle s_1, s_2; s, m_s|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle. \tag{12.18}$$

2- تُكَوِّن مصفوفة واحدية unitary matrix : إن أي مصفوفة واحدية حقيقية تكون متعامدة حسب الشرط (9.30). و عليه فإن شرط التعامد هنا يفرض أن يتحقق

$$\begin{aligned} \sum_{s, m_s} & \langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle\langle s_1, m'_{s_1}; s_2, m'_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle \\ & = \delta_{m_{s_1}, m'_{s_1}} \delta_{m_{s_2}, m'_{s_2}}. \end{aligned} \tag{12.19}$$

والذي يمكن إثباته بسهولة من تعامد مجموعة الكت $\{|s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}\rangle\}$ مع حقيقة أن معاملات كلبش-جوردن (12.16) حقيقية. بطريقة مماثلة، يمكننا التوصل كذلك إلى أن

$$\begin{aligned} \sum_{m_{s_1}, m_{s_2}} & \langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s', m'_s\rangle \\ & = \delta_{s,s'} \, \delta_{m_s, m'_s}. \end{aligned} \tag{12.20}$$

---

[2] يُطلق عليها في بعض المراجع معاملات فيجنر Wigner coefficients أو ترابط المتجهات vector-coupling.

3- معايرة normalized: كحالة خاصة للعلاقة (12.20)، لو أخذنا $s = s'$ و أعتبرنا

$$m_s = m'_s = m_{s_1} + m_{s_2},$$

نحصل على

$$\sum_{m_{s_1}+m_{s_2}=m_s} |\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle|^2 = 1, \tag{12.21}$$

والذي ينتج عن شرط المعايرة لمجموعة الكت المميزة $\{|s_1, s_2; s, m_s\rangle\}$.

4- قيمها غير الصفرية محددة: عناصر المصفوفة (12.16) غير صفرية إذا تحقق

$$\begin{aligned} &\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle \neq 0; \qquad |s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2, \\ &\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle \neq 0; \qquad m_s = m_{s_1} + m_{s_2}. \end{aligned} \tag{12.22}$$

5- القيمة العظمى لها موجبة: بالإصطلاح إعتبرنا أعلى قيمة ممكنة موجبة. كذلك من شرط المعايرة فإنها تساوي الوحدة، أي

$$\langle s_1, s_1; s_2, s - s_1|s_1, s_2; s, s\rangle = 1. \tag{12.23}$$

6- تتبع علاقة تماثل parity relation: بسبب الطبيعة التناظرية للمساقط المغناطيسية m_s ، m_{s_1} و m_{s_2} و التي لها قيم تتراوح بين الموجبة و السالبة علاقة التماثل التالية تساعد كثيراً عند تبديل إشارات المساقط المغناطيسية، حيث أن

$$\begin{aligned} &\langle s_1, m_{s_1}; s_2, m_{s_2}|s_1, s_2; s, m_s\rangle = \\ &\qquad (-1)^{s_1+s_2-s} \langle s_1, -m_{s_1}; s_2, -m_{s_2}|s_1, s_2; s, -m_s\rangle . \end{aligned} \tag{12.24}$$

هذه الخصائص هامة جداً في تحديد قيم معاملات كلبش-جوردن و التي منها يمكن حساب الدالة الموجية الكلية بعد ترابط الزخم. كما أود التأكيد أن هذه الخصائص ليست صالحة فقط للجمع بين الغزل، بل صالحة لجمع أي زخم زاوي يتبع علاقات التبديل للزخم الزاوي.

12.4 جمع جسيمين غزلهما $\frac{1}{2}$ Adding two spin $\frac{1}{2}$ particles

لنفترض نظام مكون من جسيمين لهما غزل spin $\frac{1}{2}$ مهملي درجات الحرية المدارية. لنعتبر الجسيمين قابلي للتفريق distinguishable و لنرقمهما جسيم رقم 1 بمؤثر غزل $\hat{\mathbf{S}}_1$ و جسيم رقم 2 بمؤثر غزل $\hat{\mathbf{S}}_2$. كلا المؤثرين $\hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}}_2$ لهما نفس الأعداد الكمية $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ و بالتالي لهما نفس الأبعاد. لن نكون إذاً بحاجة لإظهار الضرب $\hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_1$ أو $\hat{\mathbf{S}}_2 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2$ لضبط الأبعاد. لكل جسيم من الجسيمين حالتين متاحتين: إما الغزل لأعلى spin up $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ و سنرمز لهذه الحالة إختصاراً بـ $|\uparrow\rangle$، أو الغزل لأسفل spin down $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ و سنرمز لهذه الحالة إختصاراً بـ $|\downarrow\rangle$. مما تعلمناه سابقا من (12.5)، نكتب

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} &= \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2; \qquad \langle \hat{\mathbf{S}}^2 \rangle = s(s+1)\hbar^2, \\ s_1 &= s_2 = \frac{1}{2}; \qquad 1 \geq s \geq 0, \\ \langle \hat{\mathbf{S}}_1^2 \rangle &= \langle \hat{\mathbf{S}}_2^2 \rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2, \end{aligned} \tag{12.25}$$

حيث أن s العدد الكمي المغزلي الكلي، وقيمه المتاحة حُسبت من خلال العلاقة (12.13). كما فعلنا في الجدول (12.1) فإن جميع حالات الكِت الممكنة تُعطى حسب (12.25) كالتالي

$m_s \downarrow \nearrow s$	$s=1$	$s=0$
$m_s=1$	$\|1,1\rangle$	
$m_s=0$	$\|1,0\rangle$	$\|0,0\rangle$
$m_s=-1$	$\|1,-1\rangle$	

من الواضح لدينا 4 حالات متاحة، ثلاث لـ $s=1$ لذلك نطلق عليها الحالة الثلاثية triplet state و حالة واحدة لـ $s=0$ و لهذا نطلق عليها الحالة الأحادية singlet state. هذه الحالات ترتبط مع الأساسات الأربع (لكل جسيم حالتين: $|\uparrow\rangle$ و $|\downarrow\rangle$ وبالتالي لدينا 4 اساسات) من خلال الضرب الموتر (12.9). يمكننا وصف هذه النتيجة بشكل مجرد كالتالي

$$\frac{1}{2}\otimes\frac{1}{2}=1\oplus 0, \tag{12.26}$$

والتي تعني أن الضرب المباشر the direct product في فضائي هلبرت للغزل-$\frac{1}{2}$ (spin-1/2) يكافيء الجمع المباشر the direct sum لفضاء الغزل-1 (spin-1) مع فضاء الغزل-0 (spin-0). هدفنا الآن أن نعبر عن كل كِت كمجموع خطي للاساسات المضروبة مع بعضها البعض من خلال علاقة الضرب الموتر (12.9).

لنبتدأ بالكِت $|1,1\rangle$ و التي لها أكبر مسقط مغناطيسي. رياضياً، هذه الحالة ناتجة بالضرورة عن الضرب $|\uparrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle$ و الذي يُعْطي $|\uparrow\uparrow\rangle$. فيزيائياً، الكِت $|1,1\rangle$ ناتج عن أن كلا الجسيمان لهما غزل إلى أعلى. أي أن $m_{s_1}=m_{s_2}=\frac{1}{2}$ و حسب (12.12) فإن $m_s=1$. بالتالي نكتب

$$|1,1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle\,. \tag{12.27}$$

كما ذكرنا سابقاً، الحالة $|\uparrow\uparrow\rangle$ ناتجة عن الضرب الموتر للحالتين $|\uparrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle$ و التي قد يتضمن فرق في الطور، لنقل أنه δ. لذلك من الممكن أن يظهر معامل للطور $e^{i\delta}$ في الطرف الأيمن للإستنتاج (12.27). سنتبع إصطلاح كوندون-شورتلي the Condon-Shortley convention[3] و الذي يعتبر معامل الحالة الكبرى يساوي الوحدة. هذا الإصطلاح يظهر في تعريف دالة التوافق الكروية (A.43) من خلال معامل الطور (-1^m) (يمكن كتابته كـ $e^{im\pi}$) و أهميته تتضح لاحقا في هذا الباب لدى دراستنا لمعاملات كلبش-جوردن Clebsch–Gordan coefficients.

نعتبر الآن حالة الكِت التالية $|1,0\rangle$ و الأقل من الحالة الأولى. من الواضح أن هذه الحالة ناتجة عن الحالتين $|\uparrow\downarrow\rangle$ و $|\downarrow\uparrow\rangle$. وجود الحالتين نابع عن حقيقة إعتبارنا أن الجسيمين قابلي التفريق، و بالتالي إما الجسيم الأول في حالة $|\uparrow\rangle$ $(m_{s_1}=\frac{1}{2})$ و الثاني في حالة $|\downarrow\rangle$ $(m_{s_2}=-\frac{1}{2})$ لنحصل على $|\uparrow\downarrow\rangle$ $(m_s=0)$ و بالعكس لنحصل على $|\downarrow\uparrow\rangle$ $(m_{s_1}=-\frac{1}{2}$، $m_{s_2}=\frac{1}{2}$ و $m_s=0)$. بشكل أعم، و بناءً على خطية الفضاءات، يمكن القول أن حالة الكِت $|1,0\rangle$ هي حالة جمع خطي بين الحالتين $|\downarrow\uparrow\rangle$ و $|\uparrow\downarrow\rangle$. السؤال هو ماهي طبيعة هذا الجمع الخطي؟ للإجابة عليه نستخدم مؤثر الخفض (11.4) و قاعدة تأثيره (11.5) و التي منها نفهم أن

$$\hat{S}_-|1,1\rangle=\sqrt{2}\hbar|1,0\rangle. \tag{12.28}$$

بهذا يمكن كتابة حالة الكِت $|1,0\rangle$ بمعلومية الحالة الرئيسية $|1,1\rangle$. من حقيقة أن مؤثر الخفض $\hat{S}_-=\hat{S}_{1-}+\hat{S}_{2-}$، حيث $\hat{S}_{1-}$ يؤثر على حالة الجسيم الأول و $\hat{S}_{2-}$ يؤثر على حالة الجسيم الثاني. و بإستخدام (11.5) و (12.27)

[3] للمزيد عن the Condon-Shortley convention أنظر إلى المرجع [8]، أيضاً المرجع [1] صفحة 270، و 788.

نجد أن

$$\begin{aligned} |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}\hat{S}_-|1,1\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(\hat{S}_{1-}+\hat{S}_{2-})\,|\uparrow\uparrow\rangle\,, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(\hbar\,|\downarrow\uparrow\rangle+\hbar\,|\uparrow\downarrow\rangle), \end{aligned}$$

لنصل إلى أن

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\uparrow\rangle+|\uparrow\downarrow\rangle\right). \tag{12.29}$$

بإعتبار أن جميع حالات الكِت معايرة، العلاقة (12.29) تعني أن الحالة $|1,0\rangle$ قد تنتج عن الحالة $|\uparrow\downarrow\rangle$ بإحتمالية 50% أو من الحالة $|\downarrow\uparrow\rangle$ بنفس الإحتمالية. الشيء المثير للإنتباه هنا أن الجسيمين متعاكسين في الغزل دائماً. بمعنى لو أجرينا قياس على الجسيم رقم 1 فقط و وجدناه في حالة $\uparrow$ فإن الجسيم رقم 2 سيكون حتماً في الحالة $\downarrow$ دون اللجوء لقياسه. إذا علمنا من نقاشاتنا السابقة في ميكانيكا الكم أن الأنظمة الكمية الحساسة للقياس تُسقط على الحالة التي تُقاس فيها بفعل أداة القياس، فإن الجسيم الثاني أُسْقِط على الحالة $\downarrow$ بفعل القياس الذي أجري على الجسيم رقم 1! سنناقش هذه الحالة لاحقاً في الحالة الأحادية لنتعرف على ظاهرة، توصف بأنها mind blowing، ألا و هي ظاهرة التشابك الكمي quantum entanglement.

الحالة التالية $|1,-1\rangle$ و التي لها أقل مسقط مغناطيسي. رياضياً، هذه الحالة ناتجة بالضرورة عن الضرب $|\downarrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle$ و الذي يُعْطي $|\downarrow\downarrow\rangle$. فيزيائياً، الكِت $|1,-1\rangle$ ناتج عن أن كلا الجسيمان لهما غزل إلى أسفل. أي أن $m_{s_1}=m_{s_2}=-\frac{1}{2}$ و حسب (12.12) فإن $m_s=-1$. بالتالي نكتب

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\,. \tag{12.30}$$

كما ذكرنا سابقاً، الحالة $|\downarrow\downarrow\rangle$ ناتجة عن الضرب الموتر للحالتين $|\downarrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle$ و التي قد يتضمن فرق في الطور يظهر في الطرف الأيمن للإستنتاج (12.30). للتحقق من طور (12.30) فإننا نلجأ لحقيقة أن

$$\hat{S}_-|1,0\rangle = \sqrt{2}\hbar|1,-1\rangle. \tag{12.31}$$

يمكن إذاً كتابة حالة الكِت $|1,-1\rangle$ بمعلومية الحالة الأكبر $|1,0\rangle$ و التي سنعوض عنها بإستخدام العلاقة (12.29)، لنجد أن

$$\begin{aligned} |1,-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}\hat{S}_-|1,0\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(\hat{S}_{1-}+\hat{S}_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle+|\uparrow\downarrow\rangle), \\ &= \frac{1}{2\hbar}(\hbar|\downarrow\downarrow\rangle+\hbar|\downarrow\downarrow\rangle) = |\downarrow\downarrow\rangle, \end{aligned}$$

دون وجود أي حاجة لطور إضافي للعلاقة (12.30)، حسب إصطلاح كوندون-شورتلي the Condon-Shortley convention. بهذا نكون أنهينا جميع الحالات لـ $s=1$ و التي يطلق عليها الحالة الثلاثية triplet state بسبب وجود ثلاث حالات كِت تقابل المساقط المغناطيسية.

ننتقل الآن للحالة الأحادية singlet state $s=0$ و التي لها حالة كِت وحيدة $|0,0\rangle$ لها $m_s=0$. هذه الحالة ناتجة عن حالة الجمع الخطي للحالتين $|\uparrow\downarrow\rangle$ و $|\downarrow\uparrow\rangle$ بنفس الحجة التي أطلقناها للحالة $|1,0\rangle$، مع الإختلاف في طبيعة الجمع الخطي. السؤال هو ماهي طبيعة هذا الجمع الخطي؟ للإجابة على هذا السؤال سنفرض أن

$$|0,0\rangle = a\,|\downarrow\uparrow\rangle+b\,|\uparrow\downarrow\rangle\,, \tag{12.32}$$

حيث a و b ثوابت مركبة يجب أن يحققا شرطين أساسيين: أولهما شرط المعايرة للحالة $|0,0\rangle$، أي

$$\langle 0,0|0,0\rangle = 1 = |a|^2 + |b|^2, \tag{12.33}$$

و ثانيهما شرط التعامد للحالة $|0,0\rangle$ مع الحالة $|1,0\rangle$، أي أن

$$\langle 1,0|0,0\rangle = 0 = a + b. \tag{12.34}$$

سنأخذ بالإصطلاح التالي أن كلاً من a و b ثوابت حقيقية، و بالتالي من الشرطين (12.33) و (12.34) نجد أن $a = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ و $b = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}$. أيهما نختار؟ لايهم، لكن من المهم أن نعلم أن الجمع الخطي (12.32) هو جمع خطي عكس متناظر anti-symmetric. لذلك ننتهي إلى

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\downarrow}{\uparrow}\rangle - |{\uparrow}{\downarrow}\rangle\right). \tag{12.35}$$

لاحظ في الطرف الأيمن من العلاقة (12.35) لو إستبدلنا الجسيم الأول بالثاني لحصلنا على إشارة سالب. لهذا السبب نطلق على هذا النوع من الجمع الخطي بأنه عكس متناظر. في المقابل العلاقة (12.29) تمثل علاقة جمع خطي متناظر بين الأساسات. الجمع العكس تناظري لحالات الغزل المكون من أنصاف أعداد فردية صحيحة، كما هو الحال في الغزل $\frac{1}{2}$، للجسيمات المتماثلة (وإن كانت قابلة للتفريق) بمبدأ باولي للإستبعاد Pauli exclusion principle و الذي يعتبر أيضاً مبدأ أساسي وجوهري و الذي يمنع أن يتواجد جسيميين متماثلين identical particles لهما غزل يساوي أنصاف أعداد فردية في نفس الحالة من الأعداد الكمية. إذاً لو كان الجسيمين المتماثلين لهما نفس الزخم-الطاقة و نفس العزوم المدارية فلا بد أن يتعاكسا في الغزل. هنا تتحقق الحالة الأحادية.

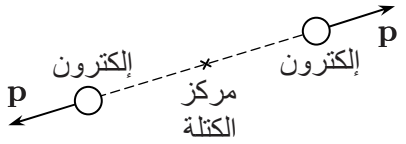
كما ناقشنا في العلاقة (12.29)، فإن الحالة الأحادية (12.35) تعني أيضاً أن الجسيمين متعاكسين في الغزل دائماً. بمعنى لو أجرينا قياس على الجسيم رقم 1 فقط و وجدناه في حالة $\uparrow$ فإن الجسيم رقم 2 سيكون حتماً في الحالة $\downarrow$ دون اللجوء للقياسه. السؤال المحير هنا: كيف عرف الجسيم رقم 2 حالة الجسيم رقم 1 و ماهي ألية إنتقال المعلومة، و التي وصفها أينشتين بأنها تنتقل بسرعة لانهائية، أسرع من الضوء؟

كي نفهم ما يدور هنا، نفترض التجربة التالية: لدينا حالة أحادية مكونة من إلكترونين يتحركان بزخم خطي متساوي بالمقدار و متعاكس بالإتجاه back-to-back momentum كما في الشكل (12.1)، بحيث أن مركز الكتلة ثابت. في إحداثيات مركز الكتلة، كلا الإلكترونين في حالة السكون و بالتالي لهما نفس الطاقة، و نفس الزخم المداري بالنسبة لمركز الكتلة $L = 0$. كي يمتثل النظام إلى مبدأ باولي للإستبعاد، لابد أن الحالة المغزلية الكلية للإلكترونين تكون في الحالة الأحادية. لو أجرينا قياس للمركبة S_x للإلكترون الذي يتحرك إلى اليمين في الشكل (12.1) فإن النتيجة ستكون $\pm\hbar/2$ بإحتمالية متساوية، حسب ما تعلمنا من المثال (1). لنفرض أن قياساً معيناً أعطى القيمة $+\hbar/2$. نقول عندئذٍ أن القياس أسقط الإلكترون الأيمن (نعتبره رقم 1) على الحالة

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

هذه حالة $\uparrow$ للمركبة S_x كما وجدناها في المثال (1). ماذا لو أجرينا قياس متزامن للمركبة S_x للإلكترون رقم 2 و الذي يتجه لليسار؟ أغلب الظن أن النتيجة غير معروفة تحديداً، أي أنها $\pm\hbar/2$ بإحتمالية متساوية، على أساس أن المعلومة عن حالة الإلكترون رقم 1 لايمكن أن تصل إلى أداة القياس للإلكترون رقم 2 بسرعة لحظية غير متناهية. في الواقع هذا الظن خاطيء! في ميكانيكا الكم النظام المكون من إلكترونين يوصف بمتجه حالة state vector واحد، هنا يوصف بـ $|0,0\rangle$، مما يعني أن الحالات المغزلية للإلكترونين متشابكة كمياً entangled. النظام لايزال في الحالة الأحادية و عليه فإن القياس المتزامن لمركبة S_x للإلكترون رقم 2 سيعطي بالضرورة $-\hbar/2$، أي أنه في الحالة

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$



شكل (12.1): نموذج نظام للحالة الأحادية مكون من إلكترونين متساويين بالزخم الخطي و متعاكسين بالإتجاه. و بالتالي في إحداثيات الكتلة الإلكترونين في حالة الزخم الزاوي المداري النسبي $L = 0$ و لهما نفس الطاقة. حسب مبدأ باولي للإستبعاد لابد أن يتعاكس الغزل للإلكترونين.

يكمن أثبات حالة التشابك الكمي مباشرة بتمثيل الحالة الأحادية (12.35) بإستخدام المصفوفات لنحصل على الدالة الموجية الأحادية

$$\chi_{00}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \right\}. \tag{12.36}$$

يمكن إسقاط المركبة S_x للإلكترون رقم 1 على الحالة $+\hbar/2$ بإستخدام تعريف المؤثرات الإسقاطية projection operators في العلاقة (8.52) و بإستخدام الدالة الموجية $\chi^x_\uparrow$ من المثال (1) نجد أن المؤثر الإسقاطي يصبح

$$\hat{P}^x_\uparrow(1) = \chi^x_\uparrow \widetilde{\chi^x_\uparrow}^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}_1. \tag{12.37}$$

لدى تأثير المؤثر الإسقاطي للإلكترون رقم 1 في (12.37) على الدالة الموجية (12.36) نحصل على

$$\begin{aligned} \hat{P}^x_\uparrow(1)\chi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\hat{P}^x_\uparrow(1) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \right) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \left(\hat{P}^x_\uparrow(1) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \right) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \right\}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \right) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \\ \\ \left(\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \right) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \end{array} \right\}, \end{aligned}$$

بإجراء العمليات الجبرية للمصفوفات على الإلكترون الأول نحصل على

$$\begin{aligned} \hat{P}^x_\uparrow(1)\chi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \right\}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \right\}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}_2, \end{aligned}$$

لننتهي إلى

$$\hat{P}^x_\uparrow(1)\chi_{00} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \times \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}_1}_{\chi^\uparrow_x(1)} \times \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}_2}_{\chi^\downarrow_x(2)}. \tag{12.38}$$

بغض النظر عن المعامل $(-\frac{1}{\sqrt{2}})$، فإن الطرف الأيمن عبارة عن ضرب حالتين: أحداهما يصف مركبة S_x للإلكترون رقم 1 في الحالة $\uparrow$ و ثانيهما يصف مركبة S_x للإلكترون رقم 2 في الحالة $\downarrow$، كنتيجة للتشابك الكمي لغزلي الإلكترونين.

لقد رأينا للنظام ذو الجسيمين غزلهما $\frac{1}{2}$ يمتلك أربع أساسات مميزة لمجموعة المؤثرات $\hat{\mathbf{S}}_1^2$، $\hat{\mathbf{S}}_2^2$، $\hat{S}_{1z}$، و $\hat{S}_{2z}$. بعد الجمع حصلنا على نظام يوصف بأربع حالات كت مميزة لمجموعة المؤثرات $\hat{\mathbf{S}}^2$، $\hat{\mathbf{S}}_1^2$، $\hat{\mathbf{S}}_2^2$، و $\hat{S}_z$. بكلام آخر لم تتغير عدد المؤثرات و لا الحالات قبل أو بعد الجمع. بقي أن نتحقق من صحة إستنتاج علاقات الكِت مع الأساسات من خلال العلاقات (12.27)، (12.29)، و (12.30) للحالة الثلاثية، و العلاقة (12.35) للحالة الأحادية. هذا يتم من خلال التحقق ما إذا كان الطرف الأيمن الذي يحوي الأربع أساسات المميزة تُعطي نفس القيم المميزة لحالات الكِت للمؤثر $\hat{\mathbf{S}}^2$. من العلاقات (12.27) يمكننا إيجاد علاقة للمؤثر $\hat{\mathbf{S}}^2$ مع $\hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}}_2$ كالتالي

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}^2 &= \left(\hat{\mathbf{S}}_1+\hat{\mathbf{S}}_2\right)\cdot\left(\hat{\mathbf{S}}_1+\hat{\mathbf{S}}_2\right),\\ &= \hat{\mathbf{S}}_1^2+\hat{\mathbf{S}}_2^2+2\hat{\mathbf{S}}_1\cdot\hat{\mathbf{S}}_2.\end{aligned}$$

الحد الأخير في الطرف الايمن يكتب كناتج للضرب القياسي للمركبات كالتالي

$$\hat{\mathbf{S}}_1\cdot\hat{\mathbf{S}}_2=\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}+\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}+\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}$$

يمكننا التخلص من مركبات x و y في الطرف الأيمن بإستخدام مؤثرات الخفض و الرفع في (11.4) حيث يمكننا كتابة مركبات x و y كالتالي

$$\hat{S}_x=\frac{1}{2}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right);\qquad \hat{S}_x=\frac{1}{2i}\left(\hat{S}_+ - \hat{S}_-\right), \tag{12.39}$$

ليصبح حد الضرب القياسي

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}_1\cdot\hat{\mathbf{S}}_2 &= \frac{1}{4}\left(\hat{S}_{1+}+\hat{S}_{1-}\right)\left(\hat{S}_{2+}+\hat{S}_{2-}\right)-\\ &\quad \frac{1}{4}\left(\hat{S}_{1+}-\hat{S}_{1-}\right)\left(\hat{S}_{2+}-\hat{S}_{2-}\right)+\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},\\ &= \frac{1}{4}\left(\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2+}+\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2-}+\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-}+\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}\right)-\\ &\quad \frac{1}{4}\left(\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2+}+\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2-}-\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-}-\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}\right)+\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},\end{aligned}$$

لننتهي إلى

$$\hat{\mathbf{S}}_1\cdot\hat{\mathbf{S}}_2=\frac{1}{2}\left(\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-}+\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}\right)+\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \tag{12.40}$$

و من ثم نصل إلى

$$\hat{\mathbf{S}}^2=\hat{\mathbf{S}}_1^2+\hat{\mathbf{S}}_2^2+\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-}+\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}+2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} \tag{12.41}$$

لنختبر الآن صحة العلاقة (12.27) بإتباع الخطوات التالية

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}^2|1,1\rangle &= \left[\hat{\mathbf{S}}_1^2+\hat{\mathbf{S}}_2^2+\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-}+\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}+2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\right]|\uparrow\uparrow\rangle,\\ 1(1+1)\hbar^2|1,1\rangle &= \left[\begin{array}{c}\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle+\\ \underbrace{\hat{S}_{1+}\left(\hbar|\uparrow\downarrow\rangle\right)}_{=0}+\underbrace{\hat{S}_{1-}\left(0|\uparrow\uparrow\rangle\right)}_{=0}+2\hat{S}_{1z}\left(\frac{1}{2}\hbar|\uparrow\uparrow\rangle\right)\end{array}\right],\\ 2\hbar^2|1,1\rangle &= \frac{3}{2}\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle+\frac{1}{2}\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle=2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle,\end{aligned}$$

حيث أستخدمنا العلاقة (11.5) أثناء حساباتنا. نجد أن الطرف الأيسر يكافيء الطرف الأيمن. يمكن التحقق من بقية العلاقات (12.29)، (12.30) و (12.35) بتأثير الطرف الأيمن من العلاقة (12.41) على حالات الكِت و تأثير الطرف الأيسر على الأساسات و التحقق من صحة الصيغ التي تربط حالات الكِت الناتجة عن جمع الغزل مع الأساسات في فضائات الجسيمين.

12.5 جمع الزخم الزاوي المغزلي و المداري
The addition of the spin-orbital angular momenta

جمع الزخم الزاوي المغزلي $\hat{\mathbf{S}}$ مع الزخم الزاوي المداري $\hat{\mathbf{L}}$ ينتج لنا ما يسمى الزخم الزاوي الكلي $\hat{\mathbf{J}}$ و هو في غاية الأهمية في الفيزياء الذرية و النووية. هناك العديد من الظواهر الطيفية الذرية لايمكن تفسيرها إلا بإعتبار الزخم الزاوي الكلي $\hat{\mathbf{J}}$. كما أنه يلعب دوراً كبيراً في تحديد الغزل النووي و دراسة الجهد النووي. السبب الأساسي يعود إلى أن الزخم الزاوي الكلي من الكميات المقاسة عملياً. إن خطوات هذا الجمع مماثلة تماما لتلك الخطوات المتبعة لجمع الغزل لجسيمين، كما وضحنا في القسم (12.2). بما أن $\hat{\mathbf{L}}$ تعتمد على الإحداثيات المكانية spatial coordinates بينما $\hat{\mathbf{S}}$ لاتعتمد على الإحداثيات، فإن كلا المؤثرين إبداليين، أي أن

$$[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0. \tag{12.42}$$

هذا يعني أن الزخم الزاوي الكلي، الذي يعرف بـ[4]

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}, \tag{12.43}$$

له مركبات تتبع علاقات التبديل العامة للزخم الزاوي، أي

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{J}_c, \tag{12.44}$$

حيث أن المؤشرات a, b, c تجري على جميع المركبات x, y, z. ما يهمنا هو إيجاد تعبير لـ $\hat{J}_z$ و $\hat{\mathbf{J}}^2$ و اللذان يُعطيان من

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z, \tag{12.45}$$

و

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}, \tag{12.46}$$

يمكن إيجاد علاقة للحد $\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}$ بإستخدام العلاقة (12.40)، بتبديل $\hat{\mathbf{L}} \to \hat{\mathbf{S}}_1$ و $\hat{\mathbf{S}} \to \hat{\mathbf{S}}_2$ لنحصل على

$$\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+\right) + \hat{L}_z\hat{S}_z, \tag{12.47}$$

لتصبح (12.46) كالتالي

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+ + 2\hat{L}_z\hat{S}_z. \tag{12.48}$$

الشكل (12.2) يوضح كيفية الترابط المداري المغزلي LS coupling في الفضاء للحصول على متجه الزخم الزاوي الكلي $\mathbf{J}$. لاحظ المخاريط التي يترنح على سطحها متجهات الزخم الزاوي والناتجة عن عدم قدرتنا على تحديد جميع مركبات الزخم الزاوي. فقط نختار المركبة بإتجاه محور z.

مرة أخرى، لدينا مجموعتين من الكِت المميزة: المجموعة الأولى $\{|l, m_l; s, m_s\rangle\}$ للمؤثرات $\hat{\mathbf{L}}^2$، $\hat{\mathbf{S}}^2$، $\hat{L}_z$، و $\hat{S}_z$، بحيث تتحقق المعادلات المميزة

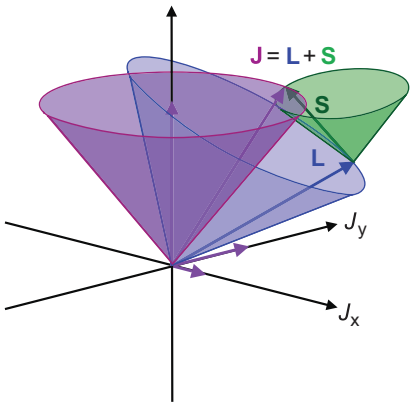
$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2|l, m_l; s, m_s\rangle &= l(l+1)\hbar^2|l, m_l; s, m_s\rangle,\\ \hat{L}_z|l, m_l; s, m_s\rangle &= m_l\hbar|l, m_l; s, m_s\rangle,\end{aligned} \tag{12.49}$$

---

[4] كلا المؤثران $\hat{\mathbf{L}}$ و $\hat{\mathbf{S}}$ مختلفان أيضاً في الأبعاد، الأول بعده $d_l = 2l+1$ بينما الثاني بعده $d_s = 2s+1$، حيث l و s الإعداد الكمية. لهذا الجمع يجب أن يتضمن ضبط الأبعاد بطريقة مشابهة للعلاقة (12.5). رسمياً، الزخم الزاوي الكلي يكتب بـ

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}\otimes\hat{\mathbf{1}}_{d_s\times d_s} + \hat{\mathbf{S}}\otimes\hat{\mathbf{1}}_{d_l\times d_l}.$$

سنكون أكثر إنفتاحاً سنحذف الضرب الموتر مع مصفوفات الوحدة من أجل ضبط الأبعاد حيث لن يؤثر وجودها أو عدما على العلاقات المميزة و القيم المميزة.



شكل (12.2): رسم توضيحي لإقتران LS. الزخم الزاوي الكلي J أرجواني، المداري L أزرق ، والمغزلي S أخضر.

و

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}^2|l,m_l;s,m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2|l,m_l;s,m_s\rangle,\\ \hat{S}_z|l,m_l;s,m_s\rangle &= m_s\hbar|l,m_l;s,m_s\rangle.\end{aligned} \tag{12.50}$$

المجموعة الثانية $\{|l,s,;j,m_j\rangle\}$ للمؤثرات $\hat{\mathbf{J}}^2$، $\hat{J}_z$، $\hat{\mathbf{L}}^2$، و $\hat{\mathbf{S}}^2$، بحيث تتحقق المعادلات المميزة

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2|l,s,;j,m_j\rangle &= j(j+1)\hbar^2|l,s,;j,m_j\rangle,\\ \hat{J}_z|l,s,;j,m_j\rangle &= m_j\hbar|l,s,;j,m_j\rangle,\end{aligned} \tag{12.51}$$

و

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2|l,s,;j,m_j\rangle &= l(l+1)\hbar^2|l,s,;j,m_j\rangle,\\ \hat{\mathbf{S}}^2|l,s,;j,m_j\rangle &= s(s+1)\hbar^2|l,s,;j,m_j\rangle.\end{aligned} \tag{12.52}$$

هنا $(m_j$ ،$j)$، $(m_l$ ،$l)$، و $(m_s$ ،$s)$ يمثل الأعداد الكمية و المساقط المغناطيسية بحيث تحقق

$$l+s \geq j \geq |l-s|; \qquad m_j = m_l + m_s. \tag{12.53}$$

أبعاد فضاء الزخم الزاوي الكلي dj يمكن أن تحسب بطريقة مماثلة لحسابنا لابعاد الجمع المغزلي في (12.14)، أي أن

$$d_j = \sum_{l-s}^{l+s} 2j+1 = (2l+1)(2s+1). \tag{12.54}$$

الجدول (12.2) يوضح جميع قيم كِت المميزة و الممكنة للعزم الزاوي الكلي.

يُمْكِن إيجاد مفكوك مجموعة الكت $\{|l,s,;j,m_j\rangle\}$ بمعلومية مجموعة الكت $\{|l,m_l;s,m_s\rangle\}$ حسب علاقة مشابهة للعلاقة (12.17)، أي

$$|l,s;j,m_j\rangle = \sum_{\substack{m_l,m_s\\ m_l+m_s=m_j}} \langle l,m_l;s,m_s|l,s;j,m_j\rangle\ |l,m_l;s,m_s\rangle, \tag{12.55}$$

حيث $\langle l,m_l;s,m_s|l,s;j,m_j\rangle$ معاملات كلبش-جوردن. لو ضربنا العلاقة (12.55) أعلاه بالبرا $\langle\theta,\phi|$ سنحصل على الدوال المميزة كالتالي

$$\mathcal{Y}_{j\,m_j}(\theta,\phi) = \langle\theta,\phi|l,s;j,m_j\rangle; \qquad Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)\,\chi_{s\,m_s} = \langle\theta,\phi|l,m_l;s,m_s\rangle, \tag{12.56}$$

جدول (12.2): **جميع قيم كت المميزة و الممكنة للعزم الزاوي الكلي $\hat{\mathbf{J}}$ الناتج عن جمع الغزلين $\hat{\mathbf{L}}$ و $\hat{\mathbf{S}}$.**

$m_j \downarrow$ ↱ j	$l+s$	$l+s-1$	$l+s-2$	$\cdots$	$l-s$
$l+s$	$\lvert l+s, l+s\rangle$				
$l+s-1$	$\lvert l+s, l+s-1\rangle$	$\lvert l+s-1, l+s-1\rangle$			
$l+s-2$	$\lvert l+s, l+s-2\rangle$	$\lvert l+s-1, l+s-2\rangle$	$\lvert l+s-2, l+s-2\rangle$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$l-s$	$\lvert l+s, l-s\rangle$	$\lvert l+s-1, l-s\rangle$	$\lvert l+s-2, l-s\rangle$	$\cdots$	$\lvert l-s, l-s\rangle$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$-(l+s-2)$	$\lvert l+s, -(l+s-2)\rangle$	$\lvert l+s-1, -(l+s-2)\rangle$	$\lvert l+s-2, -(l+s-2)\rangle$		
$-(l+s-1)$	$\lvert l+s, -(l+s-1)\rangle$	$\lvert l+s-1, -(l+s-1)\rangle$			
$-(l+s)$	$\lvert l+s, -(l+s)\rangle$				

لنكتب الكت المميز بمعلومية الدوال المميزة كالتالي

$$\mathcal{Y}_{j\,m_j}(\theta,\phi) = \sum_{\substack{m_l,m_s \\ m_l+m_s=m_j}} C^{l\,s\,j}_{m_l\,m_s\,m_j}\, Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)\,\chi_{s\,m_s}, \tag{12.57}$$

حيث أن $C^{l\,s\,j}_{m_l\,m_s\,m_j} = \langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j\rangle$ معاملات كلبش-جوردن.

في الحالة الخاصة $s = 1/2$ فإن $m_s = \pm 1/2$ لنحصل على

$$\mathcal{Y}_{j\,m_j}(\theta,\phi) = \sum_{m_l} \left[C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,\frac{1}{2}\,m_j}\, Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)\,\chi_{\uparrow} + C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,-\frac{1}{2}\,m_j}\, Y_{l\,m_l}(\theta,\phi)\,\chi_{\downarrow} \right], \tag{12.58}$$

حيث يتراوح العدد الكمي الزاوي الكلي j بين القيمتين $|l-1/2|$ و $l+1/2$. في المقابل فإن $j \geq m_j \geq -j$. حتى تتحقق العلاقة (10.34)، $m_l = l, l-1, \cdots, -l-1, -l$ فإنه في كلا الحالتين الممكنتين لـ j فإن $m_j = m_l \pm 1/2$. شرط المعايرة للعلاقة (12.58) ينص على أن

$$\sum_{m_l} \left[C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,\frac{1}{2}\,m_j} \right]^2 + \left[C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,-\frac{1}{2}\,m_j} \right]^2 = 1, \tag{12.59}$$

حسب العلاقة (12.20). نتذكر أن معاملات كلبش-جوردن حقيقية حسب ما أصطلحنا في العلاقة (12.18).

12.5.1 العلاقات التكرارية لمعاملات كلبش-جوردن
Recursion relations for the Clebsch-Gordon coeffecients

لو أثرنا بمؤثر الخفض و الرفع للزخم الزاوي الكلي $\hat{J}_\pm = \hat{L}_\pm + \hat{S}_\pm$ على الصيغة (12.55) وبتطبيق علاقات تأثير مؤثرات الخفض و الرفع للزخم الزاوي المداري (10.37) و الزخم الزاوي المغزلي (11.5) نحصل على

$$\hat{J}_\pm |l, s; j, m_j\rangle = (\hat{L}_\pm + \hat{S}_\pm) \sum_{m'_l,m'_s} \langle l, m'_l; s, m'_s | l, s; j, m_j\rangle\ |l, m'_l; s, m'_s\rangle,$$

أو

$$\begin{aligned} &\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)}\hbar |l, s; j, m_j \pm 1\rangle \\ &= \sum_{m'_l,m'_s} \langle l, m'_l; s, m'_s | l, s; j, m_j\rangle \\ &\times \begin{bmatrix} \sqrt{l(l+1) - m'_l(m'_l \pm 1)}\hbar |l, m'_l \pm 1; s, m'_s\rangle \\ +\sqrt{s(s+1) - m'_s(m'_s \pm 1)}\hbar |l, m'_l; s, m'_s \pm 1\rangle \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{12.60}$$

المعامل الناتج عن مؤثرات الخفض و الرفع يمكن أن تكتب على الصيغة

$$k(k+1) - m(m \pm 1) = (k \mp m)(k \pm m + 1), \tag{12.61}$$

و الذي سنستبدله في العلاقة (12.60). الخطوة الأخرى سنضرب العلاقة (12.60) بـ $\langle l, m_l; s, m_s|$ من اليسار و نطبق علاقات التعامد لنحصل على

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)}\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j \pm 1\rangle \\ &= \sum_{m'_l,m'_s} \langle l, m'_l; s, m'_s | l, s; j, m_j\rangle \\ &\times \begin{bmatrix} \sqrt{(l \mp m'_l)(l \pm m'_l + 1)}\,\delta_{m_l,m'_l \pm 1}\,\delta_{m_s,m'_s} \\ +\sqrt{(s \mp m'_s)(s \pm m'_s + 1)}\,\delta_{m_l,m'_l}\,\delta_{m_s,m'_s \pm 1} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

إعادة ترتيب المؤشرات تحت الجذر في الطرف الأيمن

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)}\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j \pm 1\rangle \\
&= \sum_{m_l', m_s'} \langle l, m_l'; s, m_s' | l, s; j, m_j\rangle \\
&\times \left[\begin{array}{c} \sqrt{(l \mp (m_l' \pm 1) + 1)(l \pm (m_l' \pm 1))}\, \delta_{m_l, m_l' \pm 1}\, \delta_{m_s, m_s'} \\ + \sqrt{(s \mp (m_s' \pm 1) + 1)(s \pm (m_s' \pm 1)}\, \delta_{m_l, m_l'}\, \delta_{m_s, m_s' \pm 1} \end{array} \right].
\end{aligned}$$

بتطبيق دلتا كرونكر نحصل على

$$\begin{aligned}
\sqrt{(j \mp m_j)(j \pm m_j + 1)}\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j \pm 1\rangle = \\
\sqrt{(l + 1 \mp m_l)(l \pm m_l)}\langle l, m_l \mp 1; s, m_s | l, s; j, m_j\rangle \\
+ \sqrt{(s + 1 \mp m_s)(s \pm m_s)}\langle l, m_l; s, m_s \mp 1 | l, s; j, m_j\rangle.
\end{aligned} \tag{12.62}$$

بسبب الإزاحة التي سببها المؤثر $\hat{J}_\pm$ لقيمة m_j في الطرف الأيسر، فإن معاملات كلبش جوردن غير الصفرية تلك التي تحقق

$$m_l + m_s = m_j \pm 1. \tag{12.63}$$

لهذا سنعوض عن $m_j = m_l + m_s \mp 1$ في علاقة التكرار (12.62) أعلاه، لنحصل على

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j \mp m_l \mp m_s + 1)(j \pm m_l \pm m_s)}\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_l + m_s\rangle \\
&= \sqrt{(l + 1 \mp m_l)(l \pm m_l)}\langle l, m_l \mp 1; s, m_s | l, s; j, m_l + m_s \mp 1\rangle \\
&+ \sqrt{(s + 1 \mp m_s)(s \pm m_s)}\langle l, m_l; s, m_s \mp 1 | l, s; j, m_l + m_s \mp 1\rangle.
\end{aligned}$$

بهذه الطريقة أخذنا القيم غير الصفرية لمعاملات كلبش-جوردن في الطرفين الأيسر و الأيمن. الآن نعاود كتابة المعادلة أعلاه لكن بإعتبار $m_j = m_l + m_s$، لن يتغير شيء، طالما بقينا في نفس النطاق غير الصفري للمعاملات. تصبح المعادلة أعلاه

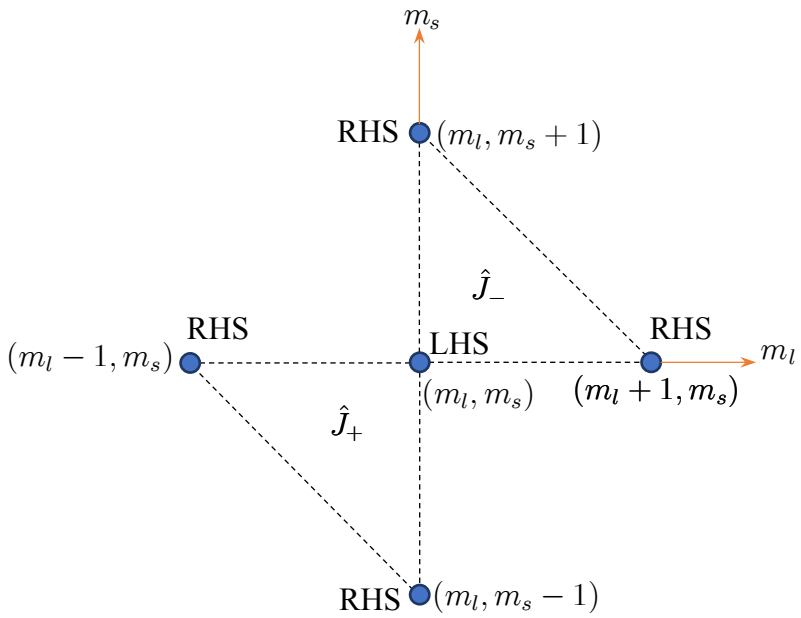
$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j \mp m_l \mp m_s + 1)(j \pm m_l \pm m_s)}\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j\rangle \\
&= \sqrt{(l + 1 \mp m_l)(l \pm m_l)}\langle l, m_l \mp 1; s, m_s | l, s; j, m_j \mp 1\rangle \\
&+ \sqrt{(s + 1 \mp m_s)(s \pm m_s)}\langle l, m_l; s, m_s \mp 1 | l, s; j, m_j \mp 1\rangle.
\end{aligned} \tag{12.64}$$

علاقة التكرار (12.64) عملية أكثر من (12.62) لحساب المعاملات، كما سنرى لاحقاً. لكن تبقى العلاقة (12.62) أساس شرحنا في الفقرة التالية.

يمكن فهم المغزى من علاقة التكرار (12.62) برسم الإزاحات الحاصلة في قيم m_l و قيم m_s على مستوى (m_l, m_s). هذا موضح في الشكل (12.3)، و الذي يوضح أثر $\hat{J}_+$ (الإشارات العليا) بإزاحة قيم (m_l, m_s) في الطرف الأيسر إلى $(m_l - 1, m_s)$ و $(m_l, m_s - 1)$ في الطرف الأيمن. في المقابل فإن أثر $\hat{J}_-$ (الإشارات السفلى) بإزاحة قيم (m_l, m_s) في الطرف الأيسر إلى $(m_l + 1, m_s)$ و $(m_l, m_s + 1)$ في الطرف الأيمن.

إن علاقة التكرار (12.62) مع علاقة المعايرة

$$\sum_{m_l, m_s} |\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j\rangle|^2 = 1, \tag{12.65}$$



شكل (12.3): مستوى-$m_l m_s$ والذي يوضح معاملات كلِبش-جوردن المتعلقة بصيغة التكرار (12.62). مصدر الشكل المرجع [4] بتصرف.

يحددان قيم فريدة لمعاملات كلبش-جوردن، تقريباً. إستخدمنا لفظ تقريباً لأنه توجد مصطلحات إشارة نحتاج إلى تحديدها. عند أي قيمة ثابتة للأعداد الكمية l (قيمة صحيحة)، s، و j، يمكن رسم النقاط الممكنة على مستوى-$m_l m_s$ و تحديد حدودها المسموحة من العلاقات

$$|m_s| \leq s; \qquad |m_l| \leq l; \qquad -j \leq m_s + m_l \leq j. \tag{12.66}$$

حدود هذه المنطقة على مستوى-$m_l m_s$ موضحة في الشكل (12.4). إن الإنتقال من أي نقطة إلى نقطة أخرى ضمن النطاق المحدد حسب الحدود المعطاة من العلاقة (12.66) يتم بإستخدام المؤثرات $\hat{J}_+$ أو الإشارات العليا في العلاقة (12.62) و التي تُعطي على مستوى-$m_l m_s$ بمجموعة المثلثات القائمة والتي أوتارها تمتد أسفل اليسار. كذلك يمكن الإنتقال من أي نقطة إلى نقطة أخرى ضمن النطاق المحدد بإستخدام المؤثرات $\hat{J}_-$ أو الإشارات السفلى في العلاقة (12.62) و التي تُعطي على مستوى-$m_l m_s$ بمجموعة المثلثات القائمة والتي أوتارها تمتد أعلى اليمين: كما هو موضح في الشكل (12.4). و بالتالي لو إبتدأنا من نقطة معروفة، يمكن بمعلوميتها تحديد جميع قيم معاملات كلبش-جوردن للنقاط الأخرى.

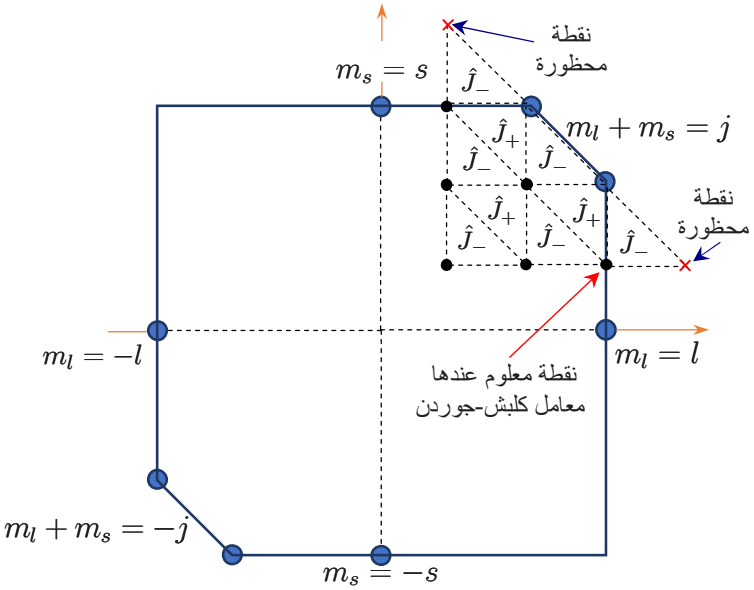
12.5.2 حساب معاملات كلبش-جوردن لنظام جمع الغزل-$\frac{1}{2}$ مع الزخم المداري
Clebsch-Gordon coeffecients for adding Spin-1/2 and orbital momentum system

نعود الآن للحالة الخاصة جمع الغزل-$\frac{1}{2}$ مع الزخم الزاوي المداري، تكلمنا عنه سابقاً من خلال العلاقة (12.58) وذكرنا أنه لمعرفة الدالة الموجية فإننا نحتاج لمعرفة معاملات كلبش-جوردن $C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,\frac{1}{2}\,m_j}$ و $C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,-\frac{1}{2}\,m_j}$ حيث أن

$$C^{l\,\frac{1}{2},j}_{m_l\,\pm\frac{1}{2}\,m_j} = \langle l, m_l; \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}; j, m_j \rangle, \tag{12.67}$$

حيث l عدد صحيح. إن قيم j المسموحة هي

$$j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0; \qquad\qquad j = \frac{1}{2}, \quad l = 0. \tag{12.68}$$



شكل (12.4): طريقة إستخدام علاقة التكرار (12.62) للحصول على معاملات كلبش-جوردن. مصدر الشكل المرجع [4] بتصرف.

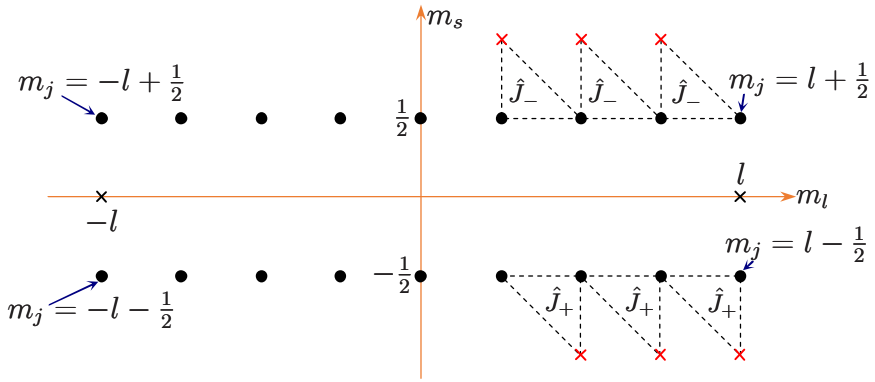
هذا يعني لكل قيمة معطاة l يوجد قيمتين ممكنتين لـ j. على سبيل المثال في حالة $l = 1$ (يرمز لها بالحالة الطيفية p) يوجد لدينا حالتين طيفيتين ممكنتين، $p_{3/2}$ و $p_{1/2}$، حيث أن المؤشر السفلي subscript يعود إلى قيمة j. لدينا طريقتيتن لحساب معاملات كلبش-جوردن $C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l\,\frac{1}{2}\,m_j}$ و $C^{l\,\frac{1}{2}\,j}_{m_l-\frac{1}{2}\,m_j}$ الأولى عامة و تتضمن إستخدام المؤثرات الخافضة و الرافعة في علاقة التكرار (12.62) لإنتاج جميع النقاط الممكنة لمعاملات كلبش- جوردن على المستوى $m_l m_s$ بمعلومية نقطة إبتدائية. الطريقة الثانية خاصة للغزل-$\frac{1}{2}$ مع الزخم الزاوي لكنها مباشرة و تتضمن حل اربع مجاهيل لمعادلات كلبش-جوردن.

طريقة المؤثرات الدرجية مع علاقة التكرار
The ladder operators within the recurrence relation method

على مستوى $m_l m_s$، كما هو موضح في الشكل (12.5)، المسألة بسيطة للغاية. المواقع المسموحة تشكل صفين فقط: الصف العلوي لـ $m_s = 1/2$ والصف السفلي لـ $m_s = -1/2$؛ انظر الشكل (12.5). على وجه التحديد، نحن نعمل على حل الحالة $j = l + 1/2$. بما أن m_s لا يمكن أن تتجاوز $\frac{1}{2}$، يمكننا استخدام التكرار الناتج عن $\hat{J}_-$ بطريقة تبقينا دائمًا في الصف العلوي ($m_s = 1/2$)، بينما تتغير قيمة m_l بمقدار وحدة واحدة في كل مرة نضيف فيها مثلث جديد لـ $\hat{J}_-$.

للتسهيل سنكتب معاملات كلبش جوردن على الصيغة $\langle l, m_l; s, m_s | j, m_j \rangle$ بدلاً عن $\langle l, m_l; s, m_s | l, s; j, m_j \rangle$. إذاً إبتداءً من أي نقطة m_l و $m_s = 1/2$ نستخدم $\hat{J}_-$ كي نتنبأ بالصف $m_j = m_l + 1/2$. بأخذ $m_l = m_j - 1/2$ و $j = l + 1/2$ في علاقة التكرار (12.64) (الإشارة السفلى) نحصل على

$$\sqrt{(l + \frac{1}{2} + m_j - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1)(l + \frac{1}{2} - m_j + \frac{1}{2} - \frac{1}{2})} \left\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j \right\rangle$$
$$= \sqrt{(l + 1 + m_j - \frac{1}{2})(l - m_j + \frac{1}{2})} \left\langle l, m_j - \frac{1}{2} + 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 1 \right\rangle$$
$$+ \sqrt{(\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2})(\frac{1}{2} - \frac{1}{2})} \left\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 1 | l + \frac{1}{2}, m_j + 1 \right\rangle.$$



شكل (12.5): طريقة إستخدام علاقة التكرار (12.64) للحصول على معاملات كلبش-جوردن للحالة $s = 1/2$. مصدر الشكل المرجع [4] بتصرف.

تلقائياً الحد الثاني في الطرف الايمن يساوي صفر لأن مقدار الجذر التربيعي يساوي صفر. فيزيائياً معامل كلبش-جوردن في الحد الثاني من الطرف الأيمن يقع في المنطقة المحظورة، في أعلى الصف العلوي من الشكل (12.5). و بالتالي نحصل على

$$\sqrt{(l + m_j + \frac{3}{2})(l - m_j + \frac{1}{2})} \left\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j \right\rangle$$
$$= \sqrt{(l + m_j + \frac{1}{2})(l - m_j + \frac{1}{2})} \left\langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 1 \right\rangle$$

بإعادة الترتيب نحصل على

$$\left\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + m_j + \frac{3}{2}}} \times \left\langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 1 \right\rangle \tag{12.69}$$

بدورنا يمكننا التعبير عن $\left\langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 1 \right\rangle$ بمعلومية $\left\langle l, m_j + \frac{3}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 2 \right\rangle$، وهكذا دواليك. نستمر في هذا الإجراء حتى تصل إلى $m_j + 1 = l + \frac{1}{2}$ (والتي عندها أيضاً $m_l = l$) و التي

تمثل أعلى قيمة غير صفرية ممكنة. عندما $m_j = l - 1/2$ نحصل على

$$\begin{aligned}
&\left\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j \right\rangle \\
= &\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + m_j + \frac{3}{2}}} \left\langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 1 \right\rangle, \\
= &\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + m_j + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{3}{2}}{l + m_j + \frac{5}{2}}} \left\langle l, m_j + \frac{3}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 2 \right\rangle, \\
= &\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + m_j + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{3}{2}}{l + m_j + \frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{5}{2}}{l + m_j + \frac{7}{2}}} \left\langle l, m_j + \frac{5}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j + 3 \right\rangle, \\
= &\ \vdots \\
= &\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{l + (l - \frac{1}{2}) + \frac{3}{2}}} \left\langle l, l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle.
\end{aligned}$$

المعامل $\left\langle l, l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle$ أعلى قيمة ممكنة يمكن أن نصل لها. عند تلكم القيم $m_l = l$ و $m_s = 1/2$ فإنه للحالة $j + 1/2$ تصبح $m_j = l + 1/2$. و بالتالي فإن المساواة التالية تتحقق ضمن طور ما δ أي

$$\left| l, l, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = e^{i\delta} \left| l, \frac{1}{2}; j = l + \frac{1}{2}, m_j = l + \frac{1}{2} \right\rangle.$$

بالضرب من اليسار بالبرا $\left\langle l, l, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right|$ نحصل على

$$\left\langle l, l, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l, \frac{1}{2}; l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = e^{-i\delta}.\right.$$

بما أنه أُصْطُلِح أن معاملات كلبش-جوردن حقيقية، فإن معامل الطور $e^{-i\delta}$ حقيقي. في المقابل لو أخذنا بالإصطلاح من المرجع [9] بأن أعلى قيمة للمعاملات $\left\langle l, l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle$ حقيقية موجبة، فإنه من المناسب أخذ معامل الطور حقيقي موجب. هذا يمثل الخاصية رقم 5 من خواص معاملات كلبش-جوردن حسب العلاقة (12.23). حسب هذا الإصطلاح فإن

$$\left\langle l, l, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l, \frac{1}{2}; l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = 1. \right. \tag{12.70}$$

كي ننتهي إلى

$$\left\langle l, m_j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j \right\rangle = \sqrt{\frac{(l + m_j + \frac{1}{2})}{2l + 1}}. \tag{12.71}$$

في المقابل لو قمنا بنفس العملية لكن بحساب الصف $(m_l - 1/2)$ و أستخدمنا المؤثر $\hat{J}_+$ لإنتاج النقاط السفلى في الشكل (12.5) إبتداءً من أي نقطة m_l و $m_s = -1/2$ نستخدم $\hat{J}_+$ كي نتنبأ بالصف $m_j = m_l - 1/2$. بأخذ $m_l = m_j + 1/2$ و $j = l + 1/2$ في علاقة التكرار (12.64) (الإشارة العليا) و إتباع إصطلاح الإشارة، نحصل منها على

$$\left\langle l, m_j + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_j \right\rangle = \sqrt{\frac{(l - m_j + \frac{1}{2})}{2l + 1}}. \tag{12.72}$$

التفاصيل ستترك للقاريء كتمرين. العلاقتان (12.71) و (12.72) تسردان نصف القصة. لتكملة الحسابات للحالات $j = l - 1/2$، نستخدم مصفوفة التحويل الدورانية. بما أن التناظر الدوراني في بعدين يتبع مجموعة التعامد

الخاصة special orthogonal group SO(3) فإننا يمكن إستخدام مصفوفة الدوران العمودية التي تحول من الأساسات $|l, m_l, s, m_s\rangle$ إلى $|j, m_j\rangle$، المعطاه بالمصفوفة

$$\begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}. \tag{12.73}$$

ما حصلنا عليه إلى الأن هو

$$\begin{aligned} \left|j = l + \frac{1}{2}, m_j\right\rangle = & \; C_+ \left|m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\right\rangle \\ & + \; C_- \left|m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\right\rangle, \end{aligned} \tag{12.74}$$

حيث أن

$$C_\pm = \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}. \tag{12.75}$$

بسبب أن قيمهم لاتتغير، أسقطنا l و $s = 1/2$ من الكت للإختصار. ما نريد معرفته هو

$$\begin{aligned} \left|j = l - \frac{1}{2}, m_j\right\rangle = & \; C'_+ \left|m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\right\rangle \\ & + \; C'_- \left|m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\right\rangle, \end{aligned} \tag{12.76}$$

و بالتحديد قيم المعاملات $C'_\pm$. لو إعتبرنا أن التحويل المتعامد

$$\begin{bmatrix} |j = l + \frac{1}{2}, m_j\rangle \\ \\ |j = l - \frac{1}{2}, m_j\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle \\ \\ |m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \end{bmatrix},$$

بالمقارنة نستنتج أن

$$C_+ = \cos\alpha = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}; \qquad C_- = \sin\alpha = \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}. \tag{12.77}$$

من الواضح أن العلاقة أعلاه تحقق $\sin^2\alpha + \cos^2\alpha = 1$. بناء عليه، نجد أن

$$C'_+ = -\sin\alpha = -\sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}; \qquad C_- = \cos\alpha = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}. \tag{12.78}$$

بهذه الطريقة حددنا نوعاً ما قيم معاملات كلبش-جوردن في العلاقة (12.58). الدالة الموجية إذا تصبح

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{j=l\pm\frac{1}{2}, m_j}(\theta, \phi) \; = \; & \pm \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}(\theta, \phi)\, \chi_\uparrow \\ & + \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}(\theta, \phi)\, \chi_\downarrow. \end{aligned} \tag{12.79}$$

من أهم تطبيقات العلاقة (12.79) إستخدامها كدالة موجية للإلكترون في ذرة الهيدروجين، لانها تُعطي دالة موجية أكثر واقعية من تلك التي حصلنا عليها سابقاً لأنها تتضمن حالات الغزل. هذه الدالة الموجية تستطيع تفسير بعض

الأنقسامات الطيفية، فيما يسمى أثر زيمان الشاذ anomalous Zeeman effect والتي فشلت الدالة الموجية العادية المنبثقة من معادلة شرودنجر من تفسيرها. لذلك إذا كان الهاميلتون يحوي حد تفاعل كولومي أو حد ناتج عن التفاعل مع مجال مغناطيسي ثابت و ضعيف فإن العلاقة (12.79) تصبح عملية من أجل حساب القيم الطيفية، خصوصاً الناتجة عن التفاعل الغزلي-المداري spin-orbit interaction لأن العلاقة (12.79) (أو الكت $|j = l\pm\frac{1}{2}, m_j\rangle$) دوال (أو مجموعة كت) مميزة لمؤثر الترابط الغزلي- المداري spin-orbit coupling operator و الذي يعطى بـ

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2\right), \tag{12.80}$$

والذي يمكن حساب قيمته المتوقعه مباشرة

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right], \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right],\end{aligned}$$

لننتهي إلى

$$\left\langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \right\rangle = \hbar^2 \begin{cases} l/2; & j = l + 1/2, \\ -(l+1)/2; & j = l - 1/2. \end{cases} \tag{12.81}$$

الطريقة المباشرة The direct method

في هذه الطريقة مباشرة لكن طويلة وهي قائمة على حقيقة أنه لدينا أربع مجاهيل $C_\pm$ و $C'_\pm$ في معادلتين (12.74) و (12.76) تمثلين حالتين متعامدتين. نحتاج إلى معادلتين إضافيتين من أجل حساب المجاهيل التي تمثل معاملات كلبش-جوردن. شرط المعايرة و التعامد orthonormal للحالتين (12.74) و (12.76) يتطلب

$$C_+^2 + C_-^2 = 1; \qquad C'^2_+ + C'^2_- = 1; \qquad C_+C'_+ + C_-C'_- = 0. \tag{12.82}$$

كل مانحتاجه هو قيد إضافي مثل النسبة C_+/C_- و الذي يمكن حسابه من المؤثر (12.48) و بتطبيق علاقة تأثير مؤثرات الخفض و الرفع للزخم الزاوي المداري (10.37) و الزخم الزاوي المغزلي (11.5) لنحصل على

$$\frac{C_+}{C_-} = \frac{\sqrt{l + m_j + \frac{1}{2}}}{\sqrt{l - m_j + \frac{1}{2}}}. \tag{12.83}$$

التفاصيل ستترك كتمرين للقاريء. بتطبيق شروط المعايرة و مصطلحات الإشارة نصل إلى العلاقات (12.77) و (12.78). لنحصل في النهاية على الحالة الكلية

$$\begin{aligned}\left|j = l \pm \frac{1}{2}, m_j\right\rangle &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left|l, m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left|l, m_j + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle.\end{aligned} \tag{12.84}$$

مثال (12.2): جسيمين في حالة إرتباط، غزل كل منهم $1/2$ يرتبطان بالغزل الكلي الحالة الثلاثية، أي $s = 1$. الرمز الطيفي للجسيمين هو $^3D_{3,0}$. أوجد الحالة الكلية للزخم الزاوي. ♠

حل مثال (12.2): من المتعارف عليه في الترميز الطيفي أنه يُكتب على الصيغة $^{2s+1}L_{j,m_j}$. حسب المعطيات، الغزل في الحالة الثلاثية يعني أن $s = 1$. الحالة الزاوية المدارية للمستوى D هو $l = 2$. بينمت العدد الكمي الزاوي الكلي حسب الرمز الطيفي $j = 3$ و مسقطة المغناطيسي هو $m_j = 0$. قيم (m_l, m_s) الممكنة بحيث

$$m_j = m_l + m_s = 0,$$

هي $(1, -1)$، $(-1, 1)$، و $(0, 0)$. حسب العلاقة (12.55) تصبح الحالة الزاوية الكلية

$$\begin{aligned} |2,1;3,0\rangle &= \sum_{m_l,m_s} \langle 2,m_l;1,m_s|2,1;3,0\rangle \, |2,m_l;1,m_s\rangle, \\ &= \langle 2,1;1,-1|2,1;3,0\rangle \, |2,1;1,-1\rangle + \\ &\quad \langle 2,-1;1,1|2,1;3,0\rangle \, |2,-1;1,1\rangle + \\ &\quad \langle 2,0;1,0|2,1;3,0\rangle \, |2,0;1,0\rangle. \end{aligned}$$

الشكل (12.6) يعطي معاملات كلبش-جوردن المطلوبة. نذهب إلى القطعة 1×2. في الصف الأول القيمة العليا هي لـ j و السفلى لـ m_j. نبحث عن العمود في الصف الأول الذي يحوي $\begin{matrix} 3 \\ 0 \end{matrix}$ أسفله نجد جميع المعاملات المطلوبة. قيم (m_l, m_s) الممكنة تقع على يسار كل معامل. بهذا نحصل على

$$|2,1;3,0\rangle = \frac{1}{5}|2,1;1,-1\rangle + \frac{1}{5}|2,-1;1,1\rangle + \frac{3}{5}|2,0;1,0\rangle.$$

يمكن كتابتها إختصاراً بـ

$$|3,0\rangle = \frac{1}{5}|2,1\rangle\,|1,-1\rangle + \frac{1}{5}|2,-1\rangle\,|1,1\rangle + \frac{3}{5}|2,0\rangle\,|1,0\rangle.$$

بالإمكان التعبير عن قيم $|l, m_l\rangle$ بإستخدام دالة التوافق الكروية. مثلاً $|2,1\rangle \doteq Y_{2,1}(\theta,\phi)$. أيضاً لاحظ أن معاملات كلبش-جوردن لايؤول مجموع مربعاتها إلى الوحدة، لان الحالة $|3,0\rangle$ تمثل $1/7$ الحالات الكلية عندما $j = 3$. ♣

12.6 أسئلة و تمارين

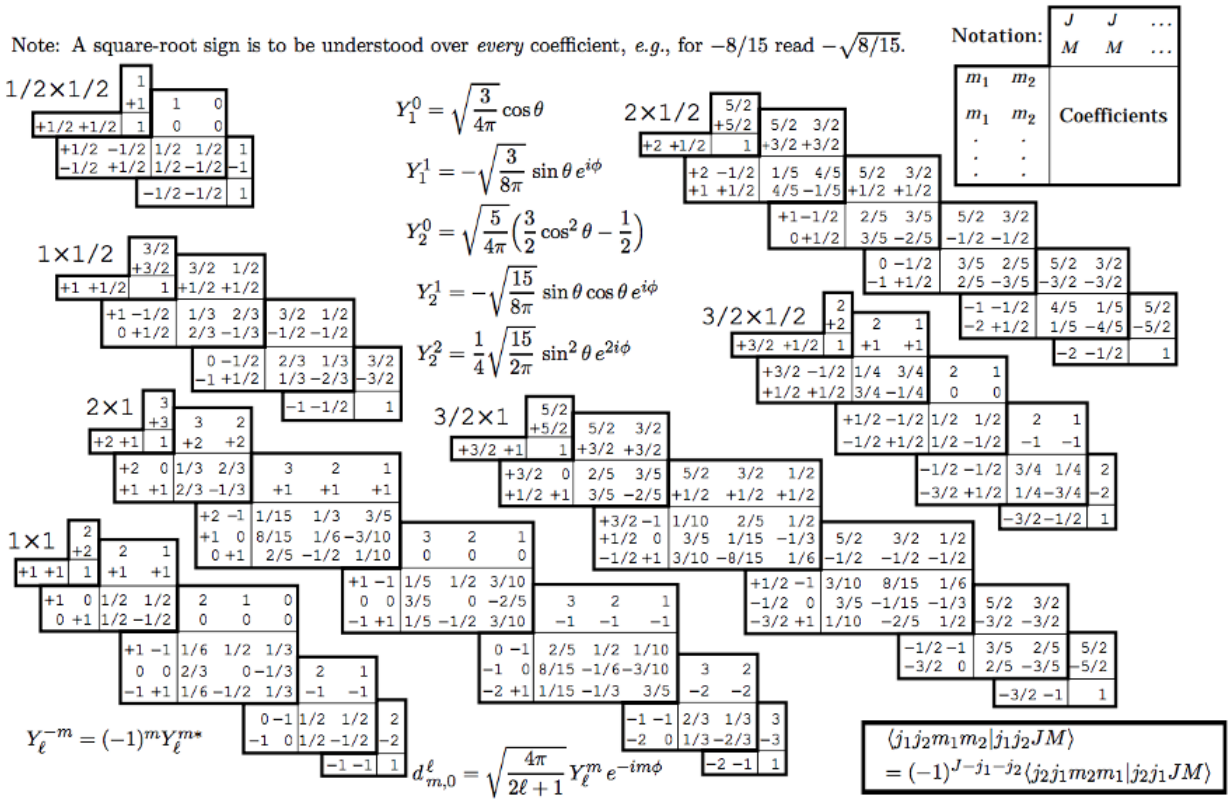
سؤال (12.1): بإستخدام علاقة المؤثر $\hat{\mathbf{S}}^2$ في (12.41)، أثبت صحة العلاقات التي تربط حالات الكِت الناتجة عن جمع الغزل لجسيمين غزلهما $\frac{1}{2}$ مع الأساسات في فضائات الجسيمين المعطاة من خلال العلاقات (12.29)، (12.30) و (12.35). ♢

سؤال (12.2): الكواركات جسيمات أساسية، تنبأ بها العالم موراي جيلمان Murray Gell-Mann عام 1964 و الذي رحل اليوم عن عالمنا أثناء كتابتي لهذه الأسطر في 24/5/2019. لهذه الجسيمات غزل $1/2$. حسب النموذج العياري للجسيمات الأساسية standard model الباريون baryons (مثل البروتون أو النيوترون) يحوي ثلاث كواركات في حالة إرتباط. في المقابل الميزون meson (مثل البيون pions) يحوي كوارك و كوارك مضاد. افترض أن الكواركات في الحالة الأرضية (وبالتالي فإن الزخم الزاوي المداري هو صفر).

(أ) ماهي قيم الغزل الممكنة للباريونات؟

(ب) ماهي قيم الغزل الممكنة للميزونات؟

معاملات كلبش - جوردن و دوال التوافق الكروية



شكل (12.6): جدول رقمي لأهم معاملات كلبش-جوردن و بعض قيم دوال التوافق الكروية.

هنا لدينا الربط بين 3 جسيمات. أبدأ بالربط بين جسيمين ثم أضف الجسيم الثالث لكل الحالات الممكنة للجسيمين. ♢

سؤال (12.3): أثبت العلاقتان (12.29) و (12.35) بإستخدام معاملات كلبش-جوردن المعطاة في الشكل (12.6). ♢

سؤال (12.4): جسيمان أحدهم غزله 1 والآخر غزله 2 في وضع السكون بحيث الغزل الكلي هو 3 و مركبة z للغزل الكلي قيمتها $\hbar$. إذا قمنا بقياس مركبة z للزخم الزاوي المغزلي للجسيم الذي غزله 2، ما القيم التي قد تحصل عليها، وما هو احتمال كل منها؟ تعليق: إن استخدام جدول Clebsch-Gordan يشبه قيادة السيارة ذات ناقل حركة يدوي. محبط و مخيف في البداية، لكن سهل عندما تتعود عليه [3]. ♢

سؤال (12.5): إلكترون إتجاه غزله إلى الأسفل في الحالة ψ_{510} في ذرة الهيدروجين. إذا كان في الإمكان قياس مربع الزخم الزاوي الكلي للإلكترون بمفرده (بإهمال غزل البروتون)، ما هي القيم التي قد تحصل، ما هو احتمال كل منها؟ ♢

سؤال (12.6): إعمل خلال النقاط في الصف السفلي من الشكل (12.5) للربط بين الزخم المغزلي-المداري لجسيم غزله $1/2$ بإستخدام مؤثر الرفع $\hat{J}_+$ بأخذ $m_l = m_j + 1/2$ و $j = l + 1/2$ في علاقة التكرار (12.64) (الإشارة العليا) ومنها أثبت العلاقة (12.72). ♢

سؤال (12.7): من العلاقتين (12.74) و (12.76) و بإستخدام خاصية التعامد العيارية أثبت جميع العلاقات في (12.82). كذلك إستخدم المؤثر المُعَرَّف في (12.48) بإيجاد معادلة قيد للمجاهيل $C_\pm$ و $C'_\pm$ و إحسب قيمهم. ♢

سؤال (12.8): إعتبر لديك جسيمان غزلهما $1/2$. إعتبر وحدة المتجه $\hat{\mathbf{r}}$ للمتجه المار بالجسيمين. لنعرف المؤثر التالي

$$\hat{S}_{12} = 3(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2.$$

أثبت أنه للحالة الأحادية $\hat{S}_{12}\chi_{\text{singlet}} = 0$. كذلك اثبت أنه للحالة الثلاثية $(\hat{S}_{12} - 2)(\hat{S}_{12} + 4)\chi_{\text{triplet}} = 0$. مساعدة: إختار $\hat{\mathbf{r}}$ بإتجاه محور z. ♢

سؤال (12.9): لنظام مكون من تفاعل بروتون-نيوترون عند طاقة منخفضة (حالة S وبالتالي الزخم الزاوي المداري يعتبر صفر) جهد التفاعل يُعطى من خلال العلاقة

$$V(r) = V_1(r) + \left[3\frac{(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}}{r^2}\right] V_2(r) + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)V_3(r),$$

حيث $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ المتجه الذي يربط الجسيمين، أنظر الشكل (7.6). إحسب طاقة الجهد لنظام البروتون-النيوترون أعلاه عندما يكون النظام في (أ) حالة الغزل الكلية الأحادية singlet state، و (ب) حالة الغزل الكلية الثلاثية triplet state. ♢

سؤال (12.10): جسيم غزله 1 يتحرك في جهد مركزي يُعطى بالصيغة

$$V(r) = V_1(r) + \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{\hbar^2}V_2(r) + \frac{(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})^2}{\hbar^4}V_3(r).$$

إحسب طاقة الجهد $V(r)$ في الحالة $j = l + 1$ ، و الحالة $j = l - 1$. $\diamondsuit$

سؤال (12.11): الديوترون يتكون من بروتون و نيوترون في حالة إرتباط واحدة فقط بدون أي حالات إثارة. عملياً وجد أن العدد الكمي للغزل النووي الكلي للديوترون يساوي 1. طبيعة الجهد النووي لنظام مكون من نيوكلونين تتطلب أن حالة الإرتباط تحدث لحالة الغزل الثلاثية triplet state. من المنطقي إعتبار أن العدد الكمي للزخم الزاوي المداري النسبي لحالة الإرتباط الوحيدة تحدث عند $l = 0$. عملياً وجد أن القوة النووية التي تربط البروتون و النيوترون لها مركبة موترة tensor component لاتحفظ الزخم الزاوي المداري. لذلك أُقترح أن الديوترون لايملك حالة زخم زاوي مداري وحيدة بل في حالة خلط. بما أن التماثل parity للديوترون موجب و بسبب علاقة التماثل $\psi(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi(\mathbf{r})$ فإن القيم الممكنة للعدد الكمي للزخم الزاوي المداري النسبي l يجب أن تكون زوجية. أجب على ما يلي

(أ) ناقش جميع القيم الممكنة للزخم الزاوي المداري و الذي تُعطي العدد الكمي للغزل النووي الكلي يساوي 1 عند حالة الغزل الكلية الثلاثية. إعتبر الزخم الزاوي النووي الكلي $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ وبالتالي فإن $|l - s| \leq j \leq l + s$. هنا $s = 1$ للحالة الثلاثية و $j = 1$ حسب النتائج العملية.

(ب) إذا إعتبرنا ان الدالة الموجية لكل حالة زخم زاوي تتكون من جزء قطري $R(r)$ و جزء زاوي $\mathcal{Y}(\theta, \phi)$، أي أن $\psi_{lsj}(\mathbf{r}) = R_{lm_l}(r)\, \mathcal{Y}_{l\,s\,j}(\theta, \phi)$. أوجد الجزء الزاوي من الدالة الموجية $\mathcal{Y}_{l\,s\,j}(\theta, \phi)$ لجميع القيم الممكنة لـ l.

لحل الفقرة (ب) تحتاج إلى إعتبار أن

$$\mathcal{Y}_{l\,s\,j} = \sum_{m_l, m_s} \langle l, m_l; s, m_s | j, m_j \rangle |l, m_l; s, m_s\rangle = \sum_{m_l, m_s} \langle l, m_l; s, m_s | j, m_j \rangle Y_{l\,m_l}(\theta, \phi) \chi_{s\,m_s}.$$

تحتاج إلى جدول معاملات كلبش-جوردن لحساب $\langle l, m_l; s, m_s | j, m_j \rangle$ المعطى في الشكل (12.6) $\diamondsuit$

13

التفاعلات الكهرومغناطيسية
Electromagnetic interactions

في الديناميكا الكهربائية الكلاسيكية [10]، القوة التي تؤثر على جسيم شحنته q يتحرك بسرعة v خلال المجالات الكهربائية $\mathbf{E}$ والمغناطيسية $\mathbf{B}$ تُعطى بقانون قوة لورنتز Lorentz force كالتالي

$$\mathbf{F} = q\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}\right). \tag{13.1}$$

بسبب إعتمادها الصريح على السرعات، فإنه من غير الممكن التعبير عن هذه القوة كتدرج لدالة جهد قياسية [11]، وبالتالي لا يمكن لمعادلة شرودنجر في شكلها الأصلي (3.13) أو حتى في الصيغة (7.1) من استيعابها. ولكن في صيغة أكثر تعقيداً، يمكن إستخدام معادلة شرودنجر (3.12)، حيث $\hat{H}$ مشتقة من معادلة هاميلتون $H(\{x_j\},\{p_j\})$ كدالة لمجموعة الإحداثيات المعممة $\{x_j\}$ و الزخم المعمم $\{p_j\}$. يبدو أننا عدنا إلى الميكانيكا التقليدية! لابأس بهذا، فليس من قبيل التراجع أن نتذكر سوياً الميكانيكا التقليدية قبل أن نشق طريقنا في ميكانيكا الكم حسب ما سنوضحه.

13.1 قاعدة الترابط الأدنى The minimal coupling rule

لنفرض جسيم كتلته m يحمل شحنة كهربائية مقدارها q و يتحرك بسرعة مقدارها v تحت تأثير مجال كهرومغناطيسي يُعطى بمتجه الجهد vector potential $\mathbf{A}$ و دالة الجهد Φ. نريد معرفة معادلة هاميلتون للنظام.

دالة الجهد في هذه الحالة تُعطى من خلال العلاقة

$$V = q(\Phi - \mathbf{A}\cdot\mathbf{v}), \tag{13.2}$$

حيث أن متجه الجهد $\mathbf{A}$ و دالة الجهد Φ ترتبطان بالمجالات الكهربائية $\mathbf{E}$ والمغناطيسية $\mathbf{B}$ من خلال علاقات ماكسويل

$$\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t; \qquad \mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}. \tag{13.3}$$

و بالتالي فإن اللاجرانجيان Lagrangian للنظام يصبح

$$\mathcal{L} = K - V = \frac{1}{2}mv^2 - q\Phi + q\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}. \tag{13.4}$$

من المناسب كتابة اللاجرانجيان (13.4) على الصيغة الموترة

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\sum_j \dot{x}_j\dot{x}_j - q\Phi + q\sum_j A_j\dot{x}_j,$$

حيث أن المؤشر $j = x, y, z$ في حالة الإحداثيات الكارتيزية. الهاميلتون يُعطى من تحويل ليجندر Legendre transformation و الذي يُعطى بـ

$$H\left(\{x_j\},\{p_j\}\right) = \sum_j \dot{x}_j p_j - \mathcal{L}\left(\{x_j\},\{\dot{x}_j\}\right). \tag{13.5}$$

هنا p_j الزخم المعمم generalized momentumو يُعطى بـ

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = \frac{1}{2} m \sum_j 2\dot{x}_j \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{x}_i} - 0 + q \sum_j A_j \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{x}_i}. \tag{13.6}$$

بأخذ

$$\frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial x_j}{\partial x_i} = \delta_{ji},$$

و بالتالي فإن الزخم المعمم للنظام يصبح

$$p_j = m\dot{x}_j + qA_j. \tag{13.7}$$

نعوض عن السرعات $\dot{x}_j = (p_j - qA_j)/m$ في (13.5) لنحصل على

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{m}\sum_j (p_j - qA_j)p_j - \left(\frac{1}{2}\sum_j \frac{(p_j - qA_j)^2}{m} - q\Phi + \frac{q}{m}\sum_j A_j(p_j - qA_j)\right), \\ &= \frac{1}{m}\sum_j \underbrace{(p_j - qA_j)}\, p_j - \frac{q}{m}\sum_j A_j \underbrace{(p_j - qA_j)} - \frac{1}{2}\sum_j \frac{(p_j - qA_j)^2}{m} + q\Phi, \\ &= \frac{1}{m}\sum_j (p_j - qA_j)^2 - \frac{1}{2}\sum_j \frac{(p_j - qA_j)^2}{m} + q\Phi. \end{aligned}$$

لننتهي إلى

$$H\left(\{x_j\},\{p_j\}\right) = \sum_j \frac{(p_j - qA_j)^2}{2m} + q\Phi. \tag{13.8}$$

بشكل أكثر عمومية، نستخدم تمثيل المتجهات، نحصل على

$$H\left(\mathbf{r},\mathbf{p}\right) = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi(\mathbf{r}). \tag{13.9}$$

و التي تُعْطي الهاميلتون التقليدي للنظام.

الإنتقال من الهاميلتون التقليدي إلى الهاميلتون الكمي يتم بتحويل الكميات الفيزيائية إلى مؤثرات. بأخذ الزخم $\mathbf{p} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ فإن الهاميلتون التقليدي (13.9) يصبح

$$\hat{H}\left(\mathbf{r},\hat{\mathbf{p}}\right) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi(\mathbf{r}). \tag{13.10}$$

نعوض عن $\hat{H}$ في معادلة شرودنجر (3.12)، بالصيغة

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t},$$

لنحصل على

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi(\mathbf{r})\right]\psi. \tag{13.11}$$

المعادلة (13.11) يطلق عليها إسم قاعدة الترابط الأدنى the minimal coupling rule وهي ترتبط بالمعالجة الشبه التقليدية في التفاعل بين الجسيم المشحون و المجالات الكهرومغناطيسية دون أي إعتبار لمساهمات العزوم متعددة الأقطاب multipole moments. فقط لدينا ترابط بين قطب واحد monopole مع المجالات.

13.2 أثر أهرونوف-بوهم Aharonov–Bohm effect

العلاقة (13.11) نفسها لاتتضمن المجالات بشكل صريح ضمن صيغتها. لكنها تعتمد على الجهود! هذا يعني أن الجسيم المشحون و المحصور في مناطق قيمة المجال فيها تساوي صفر يظل متفاعلاً مع المجالات طالما أن الجهود لاتساوي الصفر! هذا يُعرف بأثر أهرونوف-بوهم Aharonov–Bohm effect على إسم العالمين اللذين برهنا هذا الأثر عام 1959م [12] بعد أن أشار إليه كل من إرينبيرج و سيداي Ehrenberg and Siday عام 1949م [13]. على سبيل المثال إلكترون محصور داخل قشرة كروية مشحونة بشحنة سالبة، أو جسيم مشحون مقيد بالحركة في مسار يحيط بملف لولبي لانهائي solenoid يسري خلاله تيار مستقر مولداً مجالاً مغناطيسياً داخل الملف فيما يعرف بأثر ملف أهرونوف-بوهم the Aharonov–Bohm solenoid effect. تتمثل الآلية الأساسية في اقتران الجهد الكهرومغناطيسي مع الطور المركب للدالة الموجية للجسيم المشحون. كما سنوضح بعد قليل.

13.2.1 الملف اللولبي لأهرونوف Aharonov solenoid effect

في الكهروديناميكا التقليدية، الجهود Φ و $\mathbf{A}$ ليستا فريدتا القيمة uniquely determined، على عكس قيم المجالات $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$. تحديداً فإن التحويل التالي للجهود

$$\tilde{\Phi} \equiv \Phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}; \qquad \tilde{\mathbf{A}} \equiv \mathbf{A} + \boldsymbol{\nabla}\Lambda, \tag{13.12}$$

حيث Λ دالة عشوائية للموقع و الزمن، يُعطي جهود $\tilde{\Phi}$ و $\tilde{\mathbf{A}}$ لها نفس المجالات التي تعطيها الجهود Φ و $\mathbf{A}$. التحويل (13.12) يسمى التحويل القياسي Gauge transformation. بما أن المجالات $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ لاتتغير بالتحويل (13.12) فإننا نقول أن الكهروديناميكا التقليدية نظرية غير متغيرة بالقياس gauge invariant theory. من المناسب تحديد القياس gauge fixing للدالة العشوائية Λ بحيث نفرض الشرط $\nabla^2\Lambda = 0$ والذي يعني أن متجهات الجهد $\mathbf{A}$ و $\tilde{\mathbf{A}}$ غير متباعدة

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = 0, \tag{13.13}$$

فيما يُعرف بمقياس كولوم Coulomb gauge. ينتج عن هذا القياس تحويل المعامل $(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\mathbf{A})^2\psi$ في الطرف الأيمن من معادلة (13.11) إلى

$$\begin{aligned}
(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\mathbf{A})^2\psi &= (-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\mathbf{A})(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi - q\mathbf{A}\psi), \\
&= -\hbar^2\nabla^2\psi + q^2A^2\psi + i\hbar q\underbrace{\boldsymbol{\nabla}\cdot(\mathbf{A}\psi)}_{\psi\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi} + i\hbar q\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi, \\
&= (-\hbar^2\nabla^2 + q^2A^2 + 2i\hbar q\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla})\psi,
\end{aligned}$$

حيث إستخدمنا قياس كولوم (13.13) للتخلص من تباعد متجه الجهد. وعليه نكتب معادلة شرودنجر (13.11) على الصيغة

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + q^2A^2 + 2i\hbar q\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}) + q\Phi(\mathbf{r})\right]\psi. \tag{13.14}$$

المعادلة (13.14) عملية أكثر لإجراء الحسابات التي تتضمن تفاعل الجسيم المشحون مع مجالات مغناطيسية أو كهربائية متغيرة مع الزمن.

في ميكانيكا الكم، حتى نضمن أن النظرية غير متغيرة القياس بتحويل الدالة الموجية $\psi \to \tilde{\psi}$ (أو الأساسات $|\alpha_j\rangle \to |\tilde{\alpha}_j\rangle$ حيث $\psi(\mathbf{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\langle\mathbf{r}|\alpha_j\rangle$)، فإننا نتطلب أن يتحقق

$$\langle\alpha_j|\mathbf{r}|\alpha_j\rangle = \langle\tilde{\alpha}_j|\mathbf{r}|\tilde{\alpha}_j\rangle; \qquad \langle\alpha_j|\mathbf{p} - q\mathbf{A}|\alpha_j\rangle = \langle\tilde{\alpha}_j|\mathbf{p} - q\tilde{\mathbf{A}}|\tilde{\alpha}_j\rangle. \tag{13.15}$$

بالإضافة إلى ذلك فإننا نتطلب، كما هي العادة دائماً، أن المعيار أو النظيم norm للكت لايتغير، أي

$$\langle\alpha_j|\alpha_j\rangle = \langle\tilde{\alpha}_j|\tilde{\alpha}_j\rangle. \tag{13.16}$$

لذلك يجب أن نبني مؤثر القياس $\hat{\mathcal{G}}$ gauge operator والذي يربط الأساسات $|\tilde{\alpha}_j\rangle$ بـ $|\alpha_j\rangle$ بحيث يتحقق

$$|\tilde{\alpha}_j\rangle = \hat{\mathcal{G}}|\alpha_j\rangle. \tag{13.17}$$

من الخصائص عدم التغيير في التحويل (13.15) نجد التالي

$$\hat{\mathcal{G}}^\dagger \mathbf{r}\, \hat{\mathcal{G}} = \mathbf{r}, \tag{13.18}$$

و

$$\hat{\mathcal{G}}^\dagger \left(\mathbf{p} - q\tilde{\mathbf{A}}\right) \hat{\mathcal{G}} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}. \tag{13.19}$$

نقول أن المؤثر التالي

$$\hat{\mathcal{G}}(\mathbf{r}) = e^{iq\Lambda(\mathbf{r})/\hbar}, \tag{13.20}$$

سيحقق المهمة. أولاً: $\hat{\mathcal{G}}$ واحدي unitary أي أن علاقة المعيار (13.16) ستتحقق تلقائياً. ثانياً: من الواضح أن علاقة التحويل (13.18) ستتحقق لأن المؤثر $\mathbf{r}$ إبدالي مع أي دالة لـ $\mathbf{r}$. وأخيراً، بالنسبة لعلاقة التحويل (13.19) نلاحظ أن

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}^\dagger \mathbf{p} \hat{\mathcal{G}} &= \hat{\mathcal{G}}^\dagger (\mathbf{p}\hat{\mathcal{G}} - \hat{\mathcal{G}}\mathbf{p} + \widehat{\mathcal{G}}\mathbf{p}), \\ &= \hat{\mathcal{G}}^\dagger \underbrace{[\mathbf{p}, \hat{\mathcal{G}}]}_{-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\hat{\mathcal{G}}} + \mathbf{p}. \end{aligned}$$

لكن

$$-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\hat{\mathcal{G}} = -i\hbar(\frac{iq}{\hbar}\hat{\mathcal{G}}\boldsymbol{\nabla}\Lambda) = q\hat{\mathcal{G}}\boldsymbol{\nabla}\Lambda,$$

لننتهي إلى

$$\hat{\mathcal{G}}^\dagger \mathbf{p}\, \hat{\mathcal{G}} = \mathbf{p} + q\boldsymbol{\nabla}\Lambda. \tag{13.21}$$

بالتعويض في معادلة التحويل (13.19) و إستخدام تحويل المقياس (13.12) للتعويض عن $\tilde{\mathbf{A}}$، تتحقق علاقة التحويل (13.19).

نتيجة للتحويل (13.17)، فإن الدالة الموجية تتحول أيضاً كالتالي

$$\tilde{\psi} = e^{iq\Lambda/\hbar}\psi. \tag{13.22}$$

حسب نقاشنا أعلاه، الدالة الموجية $\tilde{\psi}$ هي حل لمعادلة شرودنجر (13.11) للجهود $\tilde{\Phi}$ و $\tilde{\mathbf{A}}$، كما أن الدالة الموجية ψ هي حل لمعادلة شرودنجر (13.11) للجهود Φ و $\mathbf{A}$. إثبات هذه الجملة مباشر وسيترك للقاريء كتمرين في السؤال (3). نلخص بالقول أنه عند استخدام جهود متجهة عند مقاييس gauges مختلفة لتوصيف نفس الحالة الفيزيائية، فإن حالات الكِت المقابلة (أو الدوال الموجية) ستختلف بالضرورة. مع ذلك، هناك حاجة لتغيير بسيط فقط؛ يمكننا الانتقال من مقياس مُحَدَّد بواسطة $\mathbf{A}$ إلى آخر مُحَدَّد بواسطة $\mathbf{A} + \boldsymbol{\nabla}\Lambda$ بمجرد ضرب الكِت القديم (أو الدالة الموجية القديمة) بالمعامل $e^{iq\Lambda/\hbar}$. إن الزخم القانوني the canonical momentum ، الذي يُعرّف بأنه مولد الإنتقال، يعتمد بشكل جَلِي على المقياس، ناتج عن إعتماد قيمته المتوقعة على المقياس المحدد الذي تم اختياره، حسبما توضحه المعادلة (13.21). في حين أن الزخم الحركي لا يتغير بالمقياس، حسب العلاقة (??).

نظرًا لأن $\tilde{\psi}$ تختلف عن ψ بمعامل الطور فقط، فإنها تمثل نفس الحالة الفيزيائية. بهذا المعنى، نقول أن النظرية غير متغيرة بالقياس gauge invariant. لفترة طويلة كان من المسلم به أنه لا يمكن أن يكون هناك أي تأثيرات كهرومغناطيسية في المناطق التي تكون فيها المجالات $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ صفرا – تماماً كما هو الحال في النظرية الكلاسيكية. لكن في عام 1959، أظهر أهرونوف وبوهم أن متجه الجهد يمكن أن يؤثر على السلوك الكمي للجسيم المشحون، حتى عندما يكون الجسيم محصوراً في منطقة يكون المجال فيها صفراً.

للتوضيح، نفرض جسيماً ما مقيد كي يتحرك في مسار دائري نصف قطره b (كخرزة في سلك دائري). على طول المحور العمودي على المسار الدائري ملف لولبي مثالي solenoid نصف قطره $a < b$، وعدد لفاته لكل وحدة الطول n، ويحمل تيار كهربائي I، كما هو موضح في الشكل (13.1). الملف اللولبي طويل جدا، بمعنى أن المجال المغناطيسي داخل الملف منتظم و خارج الملف يساوي صفر. لكن متجه الجهد لايساوي الصفر داخل أو خارج الملف. من قانون أمبير يمكن حساب قيمة المجال المغناطيسي داخل الملف [10] والذي يعطى بـ

$$\mathbf{B} = \begin{cases} \mu_0 n I\, \hat{\mathbf{k}} & r < a, \\ 0 & r > a, \end{cases}$$

حيث r مقاسة من مركز المسار الدائري و يمثل كذلك المسافة القطرية العمودية من محور الملف. متجه الجهد يرتبط مع المجال المغناطيسي من خلال معادلة ماكسويل

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}.$$

لو كاملنا الطرفين على مساحة دائرية S نصف قطرها r متحدة المركز مع مسار الجسيم ها نحصل على

$$\begin{aligned} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} &= \int_S \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{a}, \\ &= \oint_l \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}. \end{aligned}$$

حيث إستخدمنا قانون ستوك بتحويل التكامل على المساحة S إلى تكامل خطي مغلق للمسار l المنغلق على الدائرة S. من الكهروديناميكا، ومن مقياس كولوم (13.13) فإن $\mathbf{A}$ بإتجاه التيار $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ حسب الإحداثيات الإسطوانية. قيمة $\mathbf{A}$ تعتمد على المسافة القطرية r. و بالتالي التكامل أعلاه يصبح

$$\Phi_B = 2\pi r A; \qquad \Rightarrow \qquad A = \frac{\Phi_B}{2\pi r}, \tag{13.23}$$

حيث Φ_B يمثل الفيض المغناطيسي عبر S و يساوي

$$\Phi_B = \begin{cases} \pi r^2 B = \pi \mu_0 n I r^2 & r < a, \\ \pi a^2 B = \pi \mu_0 n I a^2 & r > a, \end{cases}$$

وبالتالي فإن متجه المجال يصبح

$$\mathbf{A} = \begin{cases} \frac{1}{2}\mu_0 n I r \hat{\boldsymbol{\phi}} & r < a, \\ \\ \frac{\mu_0 n I a^2}{2r} \hat{\boldsymbol{\phi}} & r > a. \end{cases}$$

في كلا الحالات فإن متجه الجهد لايختفي إلى عندما $r \to \infty$. عند الجسيم ($r = b$) فإن متجه الجهد يصبح

$$\mathbf{A} = \frac{\mu_0 n I a^2}{2b} \hat{\boldsymbol{\phi}}. \tag{13.24}$$

نعوض في (13.14) لنحصل على

$$\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2mb^2} \frac{d^2}{d\phi^2} + \frac{q^2}{2m} A^2 + iA \frac{\hbar q}{mb} \frac{d}{d\phi} \right),$$

حيث أن الدالة الموجية ψ للجسيم المقيد على المسار الدائري بنصف قطر b تعتمد فقط على الزاوية السمتية ϕ. لذلك عوضنا عن $\boldsymbol{\nabla} \rightarrow \frac{\hat{\boldsymbol{\Phi}}}{b}\frac{d}{d\phi}$. نعوض عن قيمة A بإستخدام العلاقة (13.24) نحصل على

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mb^2}\frac{d^2}{d\phi^2} + +i\frac{\hbar\mu_0 nqIa^2}{2mb^2}\frac{d}{d\phi} + \frac{1}{2mb^2}\left(\frac{\mu_0 nqIa^2}{2}\right)^2,$$

بإستخدام معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن $\hat{H}\psi = E\psi$ نحصل على

$$-\frac{\hbar^2}{2mb^2}\frac{d^2\psi}{d\phi^2} + i\frac{\hbar\mu_0 nqIa^2}{2mb^2}\frac{d\psi}{d\phi} + \frac{1}{2mb^2}\left(\frac{\mu_0 nqIa^2}{2}\right)^2\psi = E\psi,$$

بالتبسيط نحصل على

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} - 2i\frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar}\frac{d\psi}{d\phi} + \left[\frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \left(\frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar}\right)^2\right]\psi = 0. \tag{13.25}$$

نعرف المعاملات عديمة الأبعاد التالية

$$\beta = \frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar}; \qquad \varepsilon = \frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \beta^2, \tag{13.26}$$

لتصبح المعادلة (13.25) كالتالي

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} - 2i\beta\frac{d\psi}{d\phi} + \varepsilon\psi = 0. \tag{13.27}$$

حل المعادلة (13.27) أعلاه هو

$$\psi(\phi) = A_+ e^{(m_+)\phi} + A_- e^{(m_-)\phi},$$

حيث $m_\pm$ جذور المعادلة المساعدة auxiliary equation roots تعطى بـ

$$\begin{aligned} m_\pm &= \frac{(2i\beta) \pm \sqrt{(2i\beta)^2 - 4\varepsilon}}{2} = \frac{2i\beta \pm \sqrt{4\beta^2 - 4\left(\frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \beta^2\right)}}{2}, \\ &= \frac{2i\beta \pm 2i\sqrt{\frac{2mb^2E}{\hbar^2}}}{2} = i(\beta \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE}). \end{aligned}$$

لنعرف المعامل n كالتالي

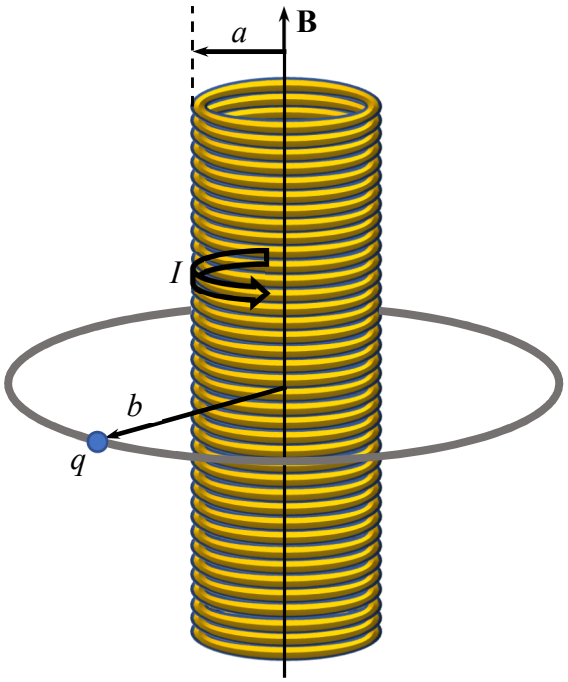
$$n = \beta \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE} = \frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar} \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE}, \tag{13.28}$$

مما يساعد على إختصار الحل للدالة الموجية ليصبح

$$\psi(\phi) = Ae^{in\phi}. \tag{13.29}$$

إن إستمرارية الدالة الموجية عند $\phi = 2\pi$ يُحَتِّم أن تكون n أعداد صحيحة integers و بالتالي

$$n - \frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar} = \pm\frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE} \qquad \Rightarrow \left(n - \frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar}\right)^2 = \frac{b^2}{\hbar^2}2mE,$$



شكل (13.1): جسيم مشحون q مقيد الحركة على حلقة دائرية نصف قطرها b يمر خلالها ملف لولبي solenoid طويل.

وبالتالي نحصل على القيم المميزة للطاقة

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2}\left(n - \frac{\mu_0 nqIa^2}{2\hbar}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2mb^2}\left(n - \frac{qBa^2}{2\hbar}\right)^2, \qquad \forall n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots. \tag{13.30}$$

الملف اللولبي أزال الإنحلال degeneracy المزدوج للخرزة المقيدة على الحلقة: n الموجبة تمثل جسيماً يتحرك في نفس اتجاه التيار في الملف اللولبي، و لديها طاقة أقل إلى حد ما (بافتراض أن q موجبة) من n السالبة التي تصف جسيم يتحرك في الاتجاه المعاكس للتيار المار في الحلقة. الأهم من ذلك ، تعتمد الطاقات المسموح بها بشكل صريح على المجال المغناطيسي داخل الملف اللولبي، على الرغم من أن المجال في موقع الجسيم يساوي صفر!

بشكل أكثر عمومية، لنفرض أن جسيم مشحون يتحرك خلال منطقة المجال المغناطيسي فيها صفر، أي أن $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} = 0$ ، لكن $A \neq 0$. بفرض أن A لاتعتمد على الزمن static معادلة شرودنجر تُعطى من خلال العلاقة (13.14). بو قمنا بالتحويل التالي للدالة الموجية

$$\psi = e^{ig}\tilde{\psi}, \tag{13.31}$$

حيث أن

$$g(\mathbf{r}) \equiv \frac{q}{\hbar}\int_{\mathcal{O}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}', \tag{13.32}$$

حيث $\mathcal{O}$ نقطة مرجع عشوائية. ينتج عن التعريف (13.33) قيم التفاضلات التالية

$$\boldsymbol{\nabla} g = \frac{q}{\hbar}\mathbf{A}; \qquad \nabla^2 g = \frac{q}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = 0. \tag{13.33}$$

بالتالي فإن

$$\begin{aligned} \nabla^2\psi = \nabla^2\left(e^{ig}\tilde{\psi}\right) &= e^{ig}\left[2i\boldsymbol{\nabla} g\cdot\boldsymbol{\nabla}\tilde{\psi} + i\tilde{\psi}\left(\nabla^2 g + i(\boldsymbol{\nabla} g)^2\right) + \nabla^2\tilde{\psi}\right], \\ &= e^{ig}\left[2i\frac{q}{\hbar}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\tilde{\psi} - \tilde{\psi}\frac{q^2}{\hbar^2}A^2 + \nabla^2\tilde{\psi}\right]. \end{aligned}$$

لننتهي إلى أن

$$-\hbar^2\nabla^2\psi = e^{ig}\left[-2iq\hbar\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\tilde{\psi} + q^2A^2\tilde{\psi} - \hbar^2\nabla^2\tilde{\psi}\right].$$

و

$$\begin{aligned} 2i\hbar q\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi &= 2i\hbar q\left(i\tilde{\psi}e^{ig}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}g + e^{ig}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\tilde{\psi}\right), \\ &= e^{ig}\left(-2q^2\tilde{\psi}A^2 + 2i\hbar q\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\tilde{\psi}\right). \end{aligned}$$

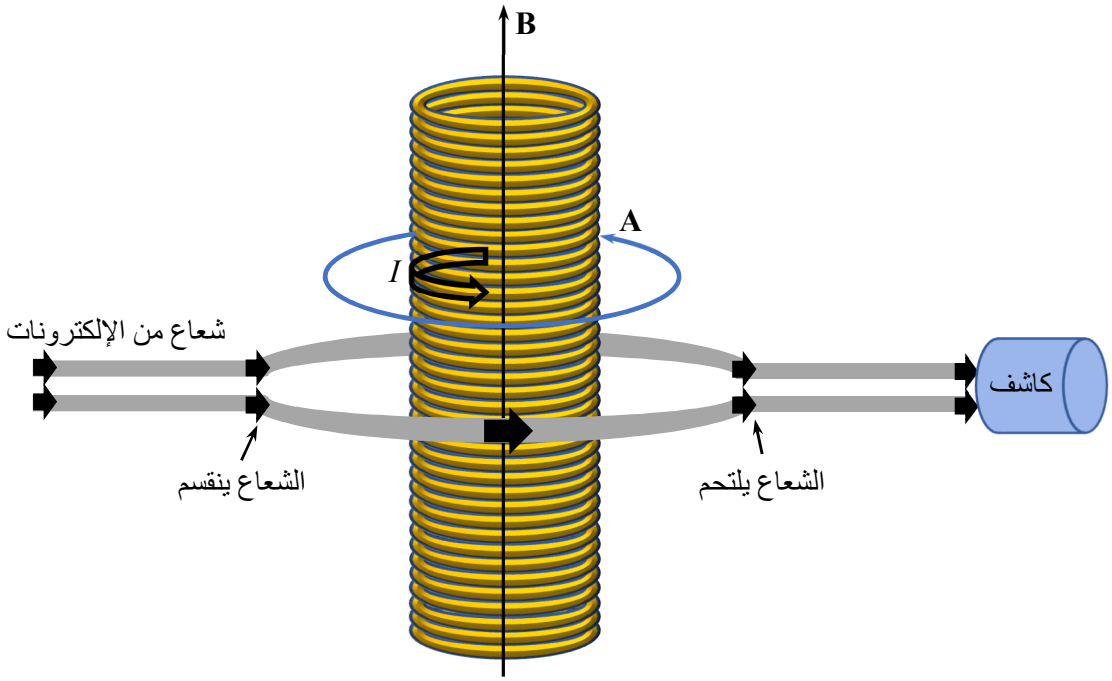
وبالتالي الطرف الأيمن من (13.14) يصبح

$$(-\hbar^2\nabla^2 + q^2A^2 + 2i\hbar q\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla})\psi = e^{ig}\nabla^2\tilde{\psi}$$

لتصبح معادلة شرودنجر (13.14) بالصيغة

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\tilde{\psi} + V(\mathbf{r})\tilde{\psi}. \tag{13.34}$$

حيث عوضنا عن طاقة الجهد القياسية $q\phi(\mathbf{r})$ بـ $V(\mathbf{r})$ للتعميم. العلاقة (13.34) تمثل معادلة شرودنجر للـ $\tilde{\psi}$ بدون متجه الجهد $\mathbf{A}$. المهمة أصبحت سهلة، كل ماهو مطلوب هو حل المعادلة (13.34) و إيجاد $\tilde{\psi}$ ومن ثم ضربها بمعامل الطور e^{ig} لحساب ψ في حالة وجود متجه الجهد عديم الدوران.



شكل (13.2): تجربة لأثر أهرونوف-بوهم Aharonov-Bohm شعاع من الإلكترونات ينشق إلى شعاعين. الشعاعان يمران على جانبي الملف اللولبي الطويل و من ثم يلتحمان بفرق طور. الكاشف يقيس التداخلات بين الشعاعين.

13.2.2 تجربة أهرونوف و بوهم Aharonov and Bohm experiment

لقد إقترح أهرونوف و بوهم تجربة يتم فيها تقسيم شعاع من الإلكترونات إلى شعاعين، كلاهما يمران من على جانبي الملف اللولبي الطويل قبل أن يتحدا مع بعضهما، كما يوضح الشكل (13.2). يتم الحفاظ على الشعاعين بعيدا عن الملف اللولبي نفسه، مما يعني أن الشعاعين يواجهان فقط المناطق التي يكون فيها $\mathbf{B} = 0$. لكن A المعطاة في المعادلة (13.23) ليست صفرية. الشعاعان يصلان إلى الكاشف بفرق في الأطوار

$$g = \frac{q}{\hbar}\int \mathbf{A}(\mathbf{r}')\cdot d\mathbf{r}' = \frac{q}{\hbar}\int_0^{\pi}\frac{\Phi_B}{2\pi r'}\hat{\boldsymbol{\phi}}\cdot(\pm\hat{\boldsymbol{\phi}}\, r' d\phi') = \pm\frac{q\Phi_B}{2\hbar} = \pm\frac{q\pi B a^2}{2\hbar}. \tag{13.35}$$

الإشارة الموجبة تمثل طور شعاع الإلكترونات بنفس إتجاه $\mathbf{A}$ (بمعنى أنه بنفس إتجاه التيار المار بالملف). و بالتالي فإن الشعاعين يصلان إلى الكاشف بفرق طور يساوي $q\pi Ba^2/\hbar$. فرق الطور هذا يؤدي إلى تداخل قابل للقياس حسب العلاقتين (2.39) و (2.40). لقد تم إجراء هذه التجربة و إثباتها عملياً على يد شامبرز و آخرون [14].

يجب التأكيد على أن أثر التداخل هنا هو ميكانيكي كمِّي بحت. من الناحية الكلاسيكية، يتم تحديد حركة الجسيم المشحون فقط بموجب قانون نيوتن الثاني الذي يسببه قوة لورنتز (13.1). هنا لا يمكن للجسيم الدخول مطلقًا إلى المنطقة التي تكون فيها $\mathbf{B}$ له قيمة محددة؛ وبالتالي قوة لورنتز هي صفر في جميع المناطق التي تكون فيها الدالة الموجية للجسيمات محددة. ومع ذلك، هناك نمط تدخل لافت يعتمد على وجود أو عدم وجود مجال مغناطيسي داخل الملف اللولبي التي لا يمكن اختراقها. هذه النقطة دفعت بعض العلماء إلى استنتاج أنه في ميكانيكا الكم $\mathbf{A}$ وليست $\mathbf{B}$ تُعتبر الكمية الفيزيائية الأساسية. تجدر الإشارة إلى أن التأثيرات الملحوظة في كلا المثالين تعتمد فقط على Φ_B، والتي يُعبَّر عنها مباشرة بمعلومية $\mathbf{B}$. تم إجراء تجارب للتحقق من تأثير Aharonov-Bohm باستخدام فتيلة حديدية ممغنطة رقيقة تسمى شعيرات السنور whisker [15].

13.3 أسئلة و تمارين

سؤال (13.1):

(أ) بإستخدام العلاقة (13.10) وعلاقة إيرنفيست المعممة (4.33)، اثبت أن

$$\frac{d\langle\mathbf{r}\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle\mathbf{p} - q\mathbf{A}\rangle. \tag{13.36}$$

مساعدة: إستخدم التحليل الموتر لحساب العلاقة لأحد المركبات ثم عمم إلى ثلاث أبعاد.

(ب) أثبت أن

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = q\langle\mathbf{E}\rangle + \frac{q}{2m}\langle\mathbf{p}\times\mathbf{B} - \mathbf{B}\times\mathbf{p}\rangle - \frac{q^2}{m}\langle\mathbf{A}\times\mathbf{B}\rangle \tag{13.37}$$

(ج) في الحالة الخاصة المجالات $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ منتظمة uniform في الحجم الذي يحوي الحزمة الموجية، أثبت أن

$$m\frac{d\langle\mathbf{v}\rangle}{dt} = q\left(\mathbf{E} + \langle\mathbf{v}\rangle\times\mathbf{B}\right). \tag{13.38}$$

هذا يعني أن القيمة المتوقعة للسرعة تتغير بفعل قانون قوة لورنتز كما نتوقع من نظرية إيرنفيست. ♢

سؤال (13.2): إفترض أن

$$\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}(x\hat{\mathbf{j}} - y\hat{\mathbf{i}}); \quad q\Phi = \frac{1}{2}\kappa z^2,$$

حيث B_0 و κ ثوابت.

(أ) إحسب متجه المجالات $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$.

(ب) أوجد قيم الطاقات الممكنة لجسيم كتلته m و شحنته q، يتحرك خلال المجالات.

مستوى الطاقات سيعطى بـ

$$E_{n_1,n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2; \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \cdots, \tag{13.39}$$

حيث أن $\omega_1 \equiv qB_0/m$ و $\omega_2 \equiv \sqrt{\kappa/m}$. في بعدين عندما $\kappa = 0$ هذه تقابل الحركة السيكلوترونية الكمية cyclotron motion، بتردد سيكلتروني cyclotron frequency يعطي بـ ω_1 و $\omega_2 = 0$. مستويات الطاقة المسموحة $\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1$ يسمى مستويات لانداو Landau Levels. ♢

سؤال (13.3): أثبت أن الدالة الموجية $\tilde{\psi}$ المعطاه في (13.22) تحقق معادلة شرودنجر (13.11) للجهود $\tilde{\Phi}$ و $\tilde{\mathbf{A}}$ في (13.12). ♢

14

طرق تقريبية Approximation Methods

القليل من المسائل في ميكانيكا الكم – والتي قد تتضمن هاميلتون مستقل أو معتمد على الزمن- يمكن حلها بشكل تام، وقد ناقشنا معظمهم. في المقابل العديد من المسائل، قد تتضمن جهوداً تفاعلية أكثر تعقيداً أو أنظمة متعددة الجسيمات و تتبادل التفاعلات ... الخ، لايمكن حلها بشكل تام. هنا نحن حتماً مُجْبَرُون للجوء إلى شكل من أشكال التقريب. قد يجادل البعض أنه مع ظهور أجهزة الحاسوب فائقة الأداء و عالية السرعة، من الممكن دائماً الحصول على الحل المطلوب عددياً إلى درجة الدقة المطلوبة؛ ومع ذلك، حتى مع توفر البرمجيات المتعددة المهام و الحواسيب فائقة الأداء لا يزال من الهام معرفة الفيزياء الأساسية للحلول التقريبية. هذا الباب سنناقش بشكل منهجي الحلول التقريبية لمسائل الحالات المرتبطة.

14.1 نظرية الاضطراب المستقلة عن الزمن
Time-Independent perturbation theory

تُعرف بنظرية الإضطراب لرايل-شوردنجر Rayleigh-Schrodinger perturbation theory وهي تتضمن حل معادلة شرودنجر لهاميلتون غير معتمد على الزمن يحوي حد تفاعل إضافي $\hat{H}_1$ مقارنة مع الهاميلتون الأصلي $\hat{H}_0$ حسب العلاقة

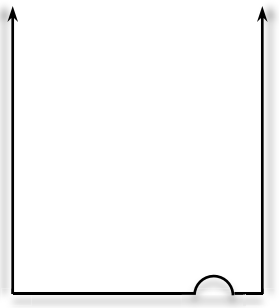
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1, \tag{14.1}$$

حيث λ معامل حقيقي و مستمر، تُسْتَخْدَم من أجل تتبع عدد المرات التي تدخل فيها الاضطرابات. في نهاية الحسابات، نأخذ $\lambda = 1$ للعودة إلى حالة القوة الكاملة للهاميلتون. بمعنى آخر، سنفترض أنه بالإمكان التحكم في قوة الاضطراب. يمكن تصور قيمتها تتراوح في المدى $0 \geq \lambda \geq 1$. الحالة $\lambda = 0$ تقابل المسئلة غير المضطربة و $\lambda = 1$ تقابل مسئلة القوة الكاملة للهاميلتون. لو إعتبرنا أن $\hat{H}_0$ حلها محدد و هي مجموعة الحالات المميزة eigenstates $|\psi_n^{(0)}\rangle$ حسب المعادلة المميزة التالية

$$\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle, \tag{14.2}$$

حيث أن مجموعة القيم المميزة $E_n^{(0)}$ تمثل قيم الطاقة المميزة لحالة الإرتباط للهاميلتون غير المضطرب $\hat{H}_0$. مجموعة الحالات المميزة $|\psi_n^{(0)}\rangle$ يمكن التعبير عنها في فضاء الموقع بـ $\psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\psi_n^{(0)}\rangle$. لكن في هذه المرحلة سنستخدم ترميز ديراك من أجل العمومية. نحن مطالبين بحل المعادلة المميزة

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1\right)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \tag{14.3}$$



شكل (14.1): جهد البئر غير النهائي مع إضطراب صغير.

حيث أن $|\psi_n\rangle$ و E_n تمثل الحالات و القيم المميزة التامة للهاميلتون المضطرب $\hat{H}$. لاحظ أنه عندما $\lambda \to 0$ فإن $|\psi_n\rangle \to |\psi_n^{(0)}\rangle$ و $E_n \to E_n^{(0)}$. وبالتالي تؤول المعادلة (14.3) إلى (14.2). لو نظرنا إلى الهاميلتون $\hat{H}$ كمصفوفة، فإن عنصر المصفوفة matrix element H_{mn} يُكتب كالتالي

$$H_{mn} \equiv \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_m^{(0)}\delta_{mn} + \langle\psi_m^{(0)}|\lambda\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

الحد الأول من آخر الطرف الأيمن يمثل عنصر مصفوفة قطرية. الحد الثاني (حد الإضطراب) يمثل عناصر مصفوفة خارج القطر off-diagonal elements. في الفضاء ذو البعد المتناهي N، فإن قطرنة diagonalizing المصفوفة تتضمن حل مجموعة من N معادلة جبرية. لكن في حالة المصفوفات غير المنتهية، نحتاج إلى نظرية الإضطراب.

بشكل عام، لا يمكن إيجاد حل تام للمعادلة (14.3)، إلا إذا كنا محظوظين للغاية، بسبب التعقيد الذي يضفيه الحد الإضطرابي. لهذا، تُعتبر نظرية الاضطراب خطوات منهجية للحصول على حلول تقريبية للهاميلتون المضطرب، من خلال الاعتماد على الحلول التامة للهاميلتون غير المضطرب. على سبيل المثال الجهد اللانهائي الموضح في الشكل (14.1) لايمكن حله بشكل تام. لكن يمكننا اللجوء إلى نظرية الإضطراب من أجل إيجاد حل تقريبي قائم على الحل التام للهاميلتون غير المضطرب، المعطى في (4.4).

لدينا نوعان من نظرية الإضطراب: (1) نظرية الإضطراب المستقلة عن الزمن للمستويات غير المنحلة non-degenerate time-independent perturbation theory و (2) نظرية الإضطراب المستقلة عن الزمن للمستويات المنحلة degenerate time-independent perturbation theory . سنبدأ في الحالة الأولى.

14.1.1 الإضطراب للحالات غير المنحلة
Perturbation of non-degenerate states

نبدأ بإيجاد مفكوك الحالات المميزة $|\psi_n\rangle$ و القيم المميزة E_n كمتسلسلات قوى لـ λ، كالتالي

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \cdots, \tag{14.4}$$

و

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots, \tag{14.5}$$

حيث أن $\psi_n^{(k)}$ تمثل التصحيح من الرتبة k order correction k^{th} للحالة المميزة eigenstate رقم n، و $E_n^{(k)}$ تمثل التصحيح من الرتبة k لطاقة المستوى المميزة eigenenergy رقم n. بتعويض المعادلتين (14.4) و (14.5) في (14.3) نحصل على

$$\begin{aligned}\hat{H}|\psi_n\rangle &= \left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1\right)\left(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \cdots\right) \\ &= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots\right)\left(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \cdots\right),\end{aligned}$$

بترتيب الحدود كقوى لـ λ نحصل على

$$\begin{aligned}&\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda\left(\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle\right) + \lambda^2\left(\hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle\right) + \cdots \\ = \;& E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda\left(E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle\right) + \lambda^2\left(E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle\right) + \cdots .\end{aligned}$$

نطبق واحدية التمثيل لمتسلسلات القوى[1] the uniqueness of the power series لمقارنة معاملات الحدود والتي لها λ مرفوعة إلى نفس القوة. نحصل لأقل رتبة λ^0 على $\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$ وهي ليست سوى العلاقة (14.2). للرتبة الأولى (معاملات λ^1) نحصل على

$$\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle. \tag{14.6}$$

بمقارنة معاملات الرتبة الثانية (معاملات λ^2) نحصل على

$$\hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle. \tag{14.7}$$

نستمر بنفس الطريقة بمقارنة معاملات λ^3، λ^4، ... إلخ حتى نصل إلى الرتبة المطلوبة تحقيقاً للدقة المستهدفة. بعد تحديد الرتبة المطلوبة ينتهي هنا دور المعامل λ، عند هذه المرحلة يمكن أخذ $\lambda = 1$. الخطوة التالية هو إيجاد التصحيح من الرتبة الأولى، و من ثم نذلف إلى التصحيح من الرتبة الثانية.

التصحيح من الرتبة الأولى First-order correction

نضرب المعادلة (14.6) بالبرا $\langle\psi_n^{(0)}|$ من اليسار، نحصل على

$$\begin{aligned}\langle\psi_n^{(0)}|\underleftarrow{\hat{H}_0}|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle &= \langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle, \\ E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(1)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1} + E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle.\end{aligned}$$

بسبب هيرميشية $\hat{H}_0$ فإنه يؤثر على البرا $\langle\psi_n^{(0)}|$. كذلك الحد $E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$ يلغي بعضه البعض في الطرف الأيسر و الأيمن، لنصل إلى

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle. \tag{14.8}$$

العلاقة (14.8) تعني أن التصحيح من الرتبة الأولى للطاقة ليس سوى القيمة المتوقعة لهاميلتون الإضطراب $\hat{H}_1$ للحالة غير المضطربة $\langle\psi_n^{(0)}|$. وتُعتبر العلاقة الأساسية لنظرية الإضطراب من الرتبة الأولى و هي من أكثر المعادلات استخداماً في ميكانيكا الكم.

لإيجاد التصحيح من الرتبة الأولى للحالة المميزة $\langle\psi_n^{(1)}|$، نقوم بإعادة تجميع الحدود في العلاقة (14.6) كالتالي

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right)|\psi_n^{(1)}\rangle = -\left(\hat{H}_1 - E_n^{(1)}\right)|\psi_n^{(0)}\rangle. \tag{14.9}$$

الطرف الأيمن من المعادلة (14.9) أعلاه محدد كم خلال معرفتنا بـ $\langle\psi_n^{(0)}|$ و $E_n^{(1)}$ من خلال العلاقة (14.8). بما أن مجموعة الحالات المميزة غير المضطربة $\langle\psi_n^{(0)}|$ تُشَكِّل مجموعة كاملة من الكِت المستقلة خطياً و المتعامدة، فبالإمكان التعبير عن الكِت المضطرب $\langle\psi_n^{(1)}|$ كمجموع خطي لـ $\langle\psi_n^{(0)}|$ كالتالي

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} c_{nm}|\psi_m^{(0)}\rangle, \tag{14.10}$$

[1] أنظر إلى المرجع [1] صفحة 364.

هنا إستبعدنا الحالة $n = m$ من المجموع في الطرف الأيمن، لأنه إذا حققت $|\psi_n^{(1)}\rangle$ المعادلة (14.9)، فإن

$$|\psi_n^{(1)}\rangle + a|\psi_n^{(0)}\rangle,$$

أيضاً تحقق (14.9)، حيث a ثابت عشوائي. لهذا سنشتغل هذه الحرية بطرح الحدود التي تحوي $n = m$. كل ما نحتاجه هو تحديد المعاملات c_{nm} (لا! أعلم بما فكر القاريء نكتب $c_{nm} = \langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$، لكن هذا أعطى c_{nm} بمعلومية $|\psi_n^{(1)}\rangle$ وهي مجهولة أصلاً). تحديد المعاملات يتم بالتعويض عن $|\psi_n^{(1)}\rangle$ في (14.9) بإستخدام العلاقة (14.10)، مع الأخذ بالإعتبار أن $|\psi_m^{(0)}\rangle$ تحقق معادلة شرودنجر غير المضطربة (14.2)، لنحصل على

$$\sum_{m\neq n} c_{nm}\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|\psi_m^{(0)}\rangle = -\left(\hat{H}_1 - E_n^{(1)}\right)|\psi_n^{(0)}\rangle. \tag{14.11}$$

نضرب المعادلة (14.11) بالبرا $\langle\psi_k^{(0)}|$ من اليسار، نحصل على

$$\sum_{m\neq n} c_{nm}\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\langle\psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = -\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

لاحظ في حالة أن $k = n$ فإن $\langle\psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = \langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = \delta_{nm}$ الطرف الأيسر يساوي صفر ومن ثَم نستعيد العلاقة الأساسية (14.8). نختار إذاً $k \neq n$ لنحصل على

$$c_{nk}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\langle\psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = -\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle,$$

أو

$$c_{nm} = -\frac{\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}; \qquad \forall n \neq m. \tag{14.12}$$

نعوض عن c_{nm} من (14.12) في (14.10)، نكتب التصحيح من الرتبة الأولى للحالة المميزة $|\psi_n^{(1)}\rangle$ ليصبح

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}|\psi_m^{(0)}\rangle. \tag{14.13}$$

العلاقة أعلاه سليمة طالما أنه لايوجد إنحلال في الطاقة قد تجعل المقام يختفي. في حالة الإنحلال سنحتاج أن نطور نظرية الإضطراب المنحلة degenerate perturbation theory في القسم التالي.

تصحيح الطاقة من الرتبة الثانية Second-order energy correction

للحصول على تصحيح الطاقة من الدرجة الثنية نضرب المعادلة (14.7) بالبرا $\langle\psi_n^{(0)}|$ من اليسار، مع التذكير أنه بسبب هيرميشية $\hat{H}_0$ فإن $\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_0$، لنحصل على

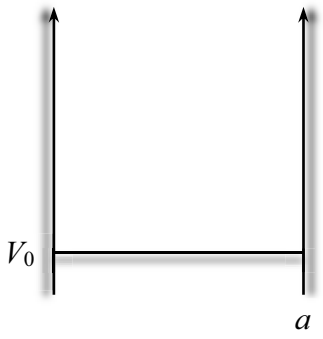
$$E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1}.$$

الحد الأول في الطرف الأيسر يلغي الحد الأول في الطرف الأيمن لنصل إلى

$$E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(1)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=0}.$$

الحد الثاني في الطرف الأيسر يختفي، حتى نبرهن على ذلك، نستخدم مفكوك $|\psi_n^{(1)}\rangle$ في العلاقة (14.10) لنحصل على

$$\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} c_{nm}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = 0,$$



شكل (14.2): جهد البئر غير النهائي مع إضطراب ثابت على كل البئر.

حيث طبقنا علاقة التعامد للحالتين $n \neq m$. إذاً التصحيح في الطاقة من الرتبة الثانية يصبح

$$E_n^{(2)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(1)} \rangle.$$

نعوض عى $|\psi_n^{(1)}\rangle$ من العلاقة (14.13) لنحصل على

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_m^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \tag{14.14}$$

حيث إعتبرنا أن $\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_m^{(0)} \rangle = {}^*\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle$. هذه العلاقة تعتبر العلاقة الأساسية لنظرية الإضطراب من الرتبة الثانية. أهميتها تنبع من حقيقة أن تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى عادة ما يختفي إعتماداً على التناظرات. يمكننا إستنتاج بعض النقاط الهامة هنا:

1. إذا كانت الحالة $|\psi_n^{(0)}\rangle$ تمثل الحالة الأرضية، أي أقل مستوى ممكن للطاقة، فإن المقام في العلاقة (14.14) سالب دائماً مما يعني أن تصحيح الطاقة من الرتبة الثانية دائماً يخفض طاقة الحالة الأرضية.

2. في حالة أن قيم عناصر المصفوفة $\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle$ لها نفس رتبة القيمة order of magnitude فإن المساهمات الهامة تأتي من المستويات القريبة من المستوى n. حيث أن المستويات $k > n$ تخفض طاقة المستوى n إلى الأسفل و المستويات الأقل $k < n$ ترفع طاقة المستوى n إلى الأعلى. إذاً نقول أن تصحيح الطاقة من الرتبة الثانية يجعل المستويات تتنافر مع بعضها البعض و يؤدي بالتالي إلى زيادة فجوات الطاقة.

مثال (14.1): الدالة الموجية غير المضطربة للجسيم المحصور في جهد البئر غير المتناظر يُعْطى من العلاقة

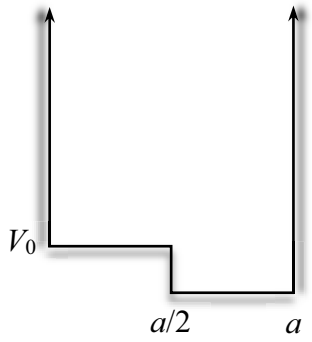
$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right); \qquad \forall\, 0 < x < a,$$

حيث $n = 1, 2, 3, \cdots$. قيم الطاقة المميزة هي

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}; \qquad n = 1, 2, 3, \cdots.$$

لو فرضنا أننا قمنا بعمل إضطراب للنظام برفع أرضية الجهد من صفر إلى قيمة ثابتة V_0 كما هو موضح في الشكل (14.2). أوجد تصحيح الرتبة الأولى. ♠

حل مثال (14.1): نلاحظ أن الإضطراب المضاف للهاميلتون عبارة عن قيمة ثابتة $\hat{H}_1 = V_0$. من العلاقة



شكل (14.3): جهد البئر غير النهائي مع إضطراب ثابت على نصف البئر.

(14.8) نجد أن تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | V_0 | \psi_n^{(0)} \rangle = V_0.$$

لاحظ أن

$$\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle = V_0 \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 0,$$

طالما أن $n \neq m$. وبالتالي لا تصحيح للدالة الموجية في (14.13). كذلك تصحيح الطاقة من الرتبة الثانية في (14.14) يساوي صفر. وعليه مستويات الطاقة المصححة

$$E_n \approx E_n^{(0)} + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + V_0,$$

أي أن قيم الطاقة رُفِعَت (أو أُزيحت للأعلى) بمقدار V_0. الإجابة ليست منطقية فقط، بل تامة! يتضح إذاً أنه في حالة الإضطراب الثابت فإن التصحيح من الرتبة الأولى سيكون كافياً للحصول على قيم تامة لأن التصحيحات من الرتب العليا تختفي. في المقابل، لو فرضنا أن الإضطراب يمتد إلى منتصف البئر كما هو موضح في الشكل (14.3)، فإن التصحيح من الرتبة الأولى يصبح

$$E_n^{(1)} = \frac{2}{a} V_0 \int_0^{a/2} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) dx = \frac{V_0}{2}.$$

النتيجة في هذه الحالة تعني أن مستويات الطاقة إرتفعت بمقدار $V_0/2$. هذه النتيجة ليست تامة، لكن تبدو منطقية، كتقريب من الرتبة الأولى. ♣

مثال (14.2): إعتبر جسيم كتلته m ومشحون بشحنة q يتذبذب في بعد واحد بفعل جهد مهتز توافقي بسيط بتردد ω. الهاميلتون الأساسي

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2.$$

إذا تعرض الجسيم إلى مجال كهربائي خارجي ضعيف $|\mathbf{E}|$. حيث أن تفاعل المجال مع الجسيم يظهر كحد إضطرابي يُعطى بـ

$$\hat{H}_1 = q|\mathbf{E}|x.$$

إحسب إزاحة الطاقة للرتبة الأولى و الثانية لأي مستوى n. ♠

حل مثال (14.2): يمكن التعبير عن قيمة x في هاميلتون الإضطراب بإستخدام المؤثرات الدرجية كما في العلاقة

(6.40)، لنحصل على

$$\hat{H}_1 = q|\mathbf{E}| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}^-).$$

تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى يُعْطِي من العلاقة (14.8)، لنحصل على

$$E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}_1|n\rangle = q|\mathbf{E}| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\langle n|\hat{a}^+|n\rangle + \langle n|\hat{a}^-|n\rangle\right] = 0, .$$

حيث إستخدمنا العلاقة (6.33).

تصحيح الطاقة من الرتبة الثانية، نستخدم العلاقة (14.14)، لنحصل على

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle m|\hat{H}_1|n\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = q^2|\mathbf{E}|^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|\hat{a}^+|n\rangle + \langle m|\hat{a}^-|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

نستخدم العلاقة (6.31)، $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ و العلاقة (6.32)، $\hat{a}^-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ مع تطبيق علاقة التعامد، نصل إلى

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= q^2|\mathbf{E}|^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{m\neq n} \frac{\left|\sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle + \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \\ &= q^2|\mathbf{E}|^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{m\neq n} \frac{\left[\begin{array}{l}(n+1)\left|\langle m|n+1\rangle\right|^2 + n\left|\langle m|n-1\rangle\right|^2 \\ +2n(n+1)\left|\langle m|n+1\rangle\langle m|n-1\rangle\right|\end{array}\right]}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \end{aligned}$$

لدينا حالتين. الحالة الأولى لمستويات الطاقة أعلى الحالة n، عندما $m = n+1$ عندئذٍ $\langle m|n+1\rangle = 1$ و $\langle m|n-1\rangle = 0$. الحالة الثانية لمستويات الطاقة أسفل الحالة n، عندما $m = n-1$ عندئذٍ $\langle m|n+1\rangle = 0$ و $\langle m|n-1\rangle = 1$. في كلا الحالتين الحد المتقاطع داخل المجموع $|\langle m|n+1\rangle\langle m|n-1\rangle| = 0$. وعليه يصبح تصحيح الطاقة

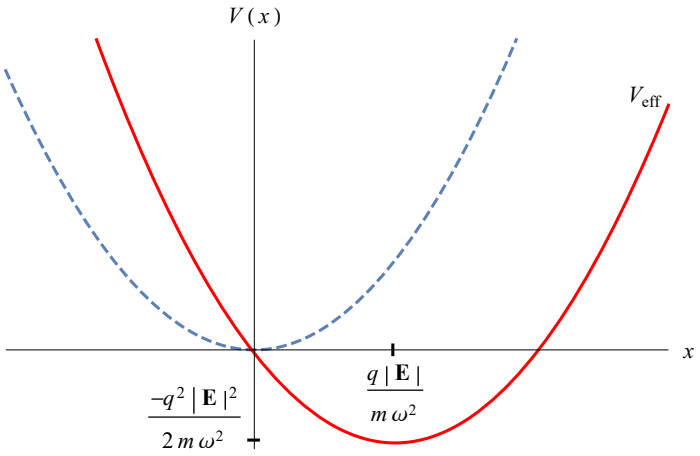
$$E_n^{(2)} = q^2|\mathbf{E}|^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\frac{(n+1)}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{n}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}}\right].$$

الحد الأول طاقة المستوى n تنزاح إلى الأسفل بفعل المستويات ذات الطاقة الأعلى لأن المقام سالب (يساوي $-\hbar\omega$). الحد الثاني طاقة المستوى n تنزاح إلى الأعلى بفعل المستوى ذو الطاقة الأقل لأن المقام موجب (يساوي $\hbar\omega$). وعليه يصبح تصحيح الطاقة

$$E_n^{(2)} = q^2|\mathbf{E}|^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{\hbar\omega} \left[-(n+1) + n\right] = -\frac{q^2|\mathbf{E}|^2}{2m\omega^2}.$$

نتيجة الإزاحة هي خفض الطاقة بالقيمة أعلاه. الإزاحة في الطاقة لاتعتمد على العدد الكمي n. هذا يعني أن مركز الجهد ستحدث له إزاحة يمكن حسابها لو إعتبرنا أن الإضطراب $\hat{H}_1 = q|\mathbf{E}|x$ يغير الجهد $V(x)$ إلى الجهد الفعال effective potential $V_{\text{eff}}(x)$، كالتالي

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(x) &= V(x) + \hat{H}_1 = \frac{1}{2}m\omega x^2 + q|\mathbf{E}|x = \frac{1}{2}m\omega^2\left[x^2 + \frac{2q|\mathbf{E}|}{m\omega^2}\right], \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2\left[x^2 + \frac{2q|\mathbf{E}|}{m\omega^2} + \frac{q^2|\mathbf{E}|^2}{m^2\omega^4} - \frac{q^2|\mathbf{E}|^2}{m^2\omega^4}\right] = \frac{1}{2}m\omega^2\left[\left(x + \frac{q|\mathbf{E}|}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2|\mathbf{E}|^2}{m^2\omega^4}\right], \end{aligned}$$



شكل (14.4): جهد الحركة التوافقية البسيطة (المنحنى المتقطع) و الجهد الفعال المُزَاح (المنحنى المستمر) و الناتج عن تفاعل حسيم مشحون مع مجال كهربائي خارجي.

لنصل أخيراً إلى أن

$$V_{\rm eff}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \frac{q|\mathbf{E}|}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2|\mathbf{E}|^2}{2m\omega^2}.$$

الحد الأول في الطرف الأيمن يمثل جهد المتذبذب التوافقي البسيط حول نقطة الإتزان $q|\mathbf{E}|/(m\omega^2)$ بسبب المجال الكهربائي الخارجي $|\mathbf{E}|$. الحد الثاني في الطرف الأيمن هو الإزاحة الناتجة في الطاقة $E_n^{(2)}$. شكل (14.4) يوضح شكل الجهد الأصلي و الجهد الفعال بسبب الإضطراب. ♣

في المثال السابق قد يتبادل للذهن السؤال التالي: طالما أن أثر المجال الخارجي $|\mathbf{E}|$ على جهد التفاعل هو إزاحة في الموقع بمقدار $\Delta x = q|\mathbf{E}|/m\omega^2$، فكيف يمكن حساب الدالة الموجية التامة exact wave function (أو الحالات المميزة التامة) دون الحاجة إلى حل الهاميلتون $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ حلاً تاماً؟ الإجابة هي طالما أن نقطة الإتزان الجهد الجديد أزيح بمقدار تبدل Δx، فإن الحل التام يصبح $\psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x + \Delta x)$. هذا يتحقق بإستخدام مؤثر الإنتقال $\hat{T}(\Delta x)$ في العلاقة (8.127)، أي

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \psi_n^{(0)}(x + \Delta x) = \hat{T}(\Delta x)\psi_n^{(0)}(x),\\ &= e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar}\psi_n^{(0)}(x) = e^{-iq|\mathbf{E}|\hat{p}_x/m\omega^2\hbar}\psi_n^{(0)}(x),\end{aligned}$$

حيث $\psi_n^{(0)}(x)$ الحل غير المضطرب و المُعْطى من العلاقة (6.10).

14.1.2 الإضطراب للحالات المنحلة Perturbation of degenerate states

إذا كانت الحالات غير المضطربة تحوي إنحلال degeneracy - أي إذا كانت حالتان مميزتان (أو أكثر) $|\psi_n^{(0)}\rangle$ و $|\psi_m^{(0)}\rangle$، حيث $n \neq m$ تشتركان في نفس الطاقة - فإن نظرية الاضطراب العادية تفشل: لأن المعاملات c_{nm} في المعادلة (14.12) و تصحيح الطاقة من الرتبة الثانية $E_n^{(2)}$ في المعادلة (14.14) يتباعد (ما لم يختفي البسط، $\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$ هذه ثغرة ستكون مهمة بالنسبة لنا لاحقًا). لذلك، فإنه في حالة الإنحلال لا يوجد سبب يدفعنا للثقة حتى بتصحيح الرتبة الأولى للطاقة في المعادلة (14.8)، وبالتالي يجب أن نبحث عن طريقة أخرى لمعالجة المشكلة. لاحظ أن هذه ليست مشكلة بسيطة؛ تقريبا جميع تطبيقات نظرية الاضطراب تنطوي على إنحلال.



(ب) (أ)

شكل (14.5): الحالات التامة $|\psi_n\rangle$ بالنسبة إلى (أ) الحالات غير المضطربة المنحلة $|\psi_n^{(0)}\rangle$ والتي تشير إلى إتجاه غير دقيق، و (ب) الحالات غير المضطربة الحميدة $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$ والتي تكون قريبة الإتجاه مع $|\psi_n\rangle$.

الحالات الكمية الحميدة Good quantum states

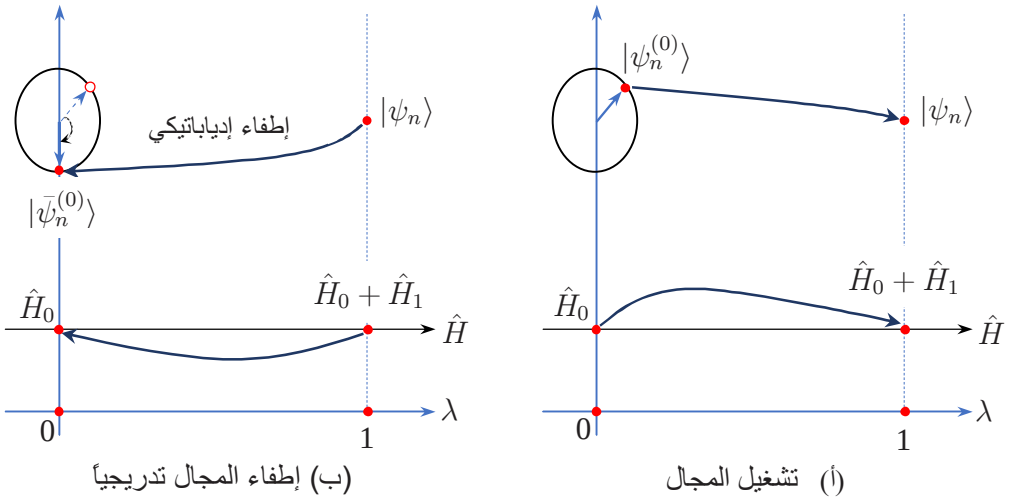
لننظر بدايةً إلى حالة عدم الإنحلال لـ $\hat{H}_0$ أو $\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$. لنعتبر أن $\lambda\hat{H}_1$ ناتج عن مجال خارجي يمكن تغيره بشكل مستمر من الصفر إلى القيمة الكاملة. هذا يقابله نظرياً تغيير λ من 0 إلى 1. مع زيادة قيمة λ من 0 إلى 1 يزداد الهاميلتون من $\hat{H}_0$ إلى $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$، تتغير الأساسات المميزة بشكلeigenstates مستمر من $|\psi_n^{(0)}\rangle$ إلى $|\psi_n\rangle$، كما هو موضح في الجزء (أ) من الشكل (14.6). إن هذا التغيير المستمر أو التحليلي للحالات المميزة مع الاضطراب هو الذي يمكننا من تحديد $|\psi_n\rangle$ إبتداءً من $|\psi_n^{(0)}\rangle$ كما فعلنا سابقاً في نظرية الإضطراب، وهي نفس الطريقة التي نحسب فيها قيمة بعض الدوال التحليلية عند النقطة $x + a$ بداية من النقطة x باستخدام مفكوك تايلور.

الآن، دعنا نفترض فضاءً جزئياً منحلاً لـ $\hat{H}_0$ degenerate subspace هذا الفضاء الجزئي يفقد الإنحلال في $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ بسبب الإضطراب. نقول إذاً أن الإضطراب أزال الإنحلال[2] the perturbation lifts the degeneracy. (يمكننا التعامل مع الحالات العامة بنفس الطريقة.) لو تخيلنا أننا بدأنا من الحالة المميزة $|\psi_n\rangle$ وقمنا بإطفاء الإضطراب تدريجياً (أو بالأحرى إدياباتيكياً) بجعل $\lambda \to 0$ ببطء. سنصل في نهاية المطاف إلى الحالات $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$ من $\hat{H}_0$، كما هو موضح في الجزء (ب) من الشكل (14.6).

نظرًا لأن $\hat{H}_0$ تحوي إنحلال، فلو قمنا بإختيار عشوائي للحالات $|\psi_n^{(0)}\rangle$ وقمنا بتشغيل المجال الخارجي بقيمة متناهية في الدقة (λ تتغير بشكل متناهي في الدقة)، فإن التغيير في الأساسات سيكون كبيراً. هذا السلوك غير التحليلي نستدل عليه بتباعد عنصر المصفوفة من الدرجة الأولى. يمكن مقارنة ذلك بتباعد المشتقة الأولى في مفكوك تايلور عندما تكون $f(x)$ غير متصلة. لذا، يجب أن نبدأ بالأساس الصحيح في الفضاء المنحل. السبب يعود إلى أن الأساسات المنحلة غير المضطربة $|\psi_n^{(0)}\rangle$ لاتشير بشكل كافٍ إلى الحالات التامة $|\psi_n\rangle$، كما هو موضح في (أ) من الشكل (14.5) وبالتالي أي تغيير طفيف في الإضطراب سيُنْتِج حالات بعيدة لاتمثل حالة النظام. على عكس الحالات الحميدة $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$، و الموضحة تخطيطياً schematically في (ب) من الشكل (14.5) و التي تحوي جمع خطي للحالات $|\psi_n^{(0)}\rangle$ بحيث تشير قدر الإمكان بإتجاه الحالات التامة $|\psi_n\rangle$.

إذاً نلخص الشكل (14.6) بالقول أن التحكم في الإضطراب نظرياً من خلال تغيير قيمة المعامل λ و عملياً عن طريق التحكم بمجال خارجي مستمر. في الحالة (أ) الإنتقال من حالة عدم الإضطراب للهاميلتون $\hat{H}_0$ المنحل جزئياً أو كلياً إلى الهاميلتون المضطرب لكن غير المنحل $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$. نقول أن الإضطراب أزال الإنحلال و النظام أُسقط على الحالة $|\psi_n\rangle$. في الحالة (ب) من الشكل (14.6) إطفاء الأضطراب تدريجياً (أدياباتيكياً)، نظرياً بأخذ $\lambda \to 0$ بشكل دقيق و عملياً بإطفاء المجال الخارجي تدريجياً ليسقط النظام على الحالات الحميدة الموصوفة بالأساسات $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$. هذه الأساسات تجعل عناصر المصفوفة خارج القطر off-diagonal matrix elements $\langle\bar{\psi}_m^{(0)}|\hat{H}_1|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle = 0$ تختفي في البسط مع مقام الطاقة $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$ للحالات n و m المنتميان إلى الفضاء المنحل عندما $n \neq m$ وبالتالي المعامل c_{nm} في المعادلة (14.12) لا يتباعد. مما يعني إمكانية إستخدام هذه الأساسات الحميدة لقطرنة $\hat{H}_1$ diagonalize. لاحظ من الشكل (14.6) العلاقة بين الأساسات الحميدة $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$ و الأساسات المنحلة $|\psi_n^{(0)}\rangle$

[2] من وجهة نظر التناظر، الإنحلال ينتج عادة عن التناظر في الهاميلتون symmetric Hamiltonian. دور الإضطراب هنا هو كسر هذا التناظر break the symmetry و بالتالي تتم إزالة الإنحلال.



شكل (14.6): تغيير الإضطراب في (أ) بزيادة المجال الخارجي (نظرياً زيادة قيمة λ). في (ب) تقليل المجال الخارجي تدريجياً لإسقاط النظام على الحالات الحميدة.

ناتج عن دوران، أي أن $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle = \hat{\mathcal{R}}|\psi_n^{(0)}\rangle$، حيث $\hat{\mathcal{R}}$ مؤثر الدوران و الذي يغير إتجاه (وبالتالي الحالة الفيزيائية) للأساسات.

تجدر الإشارة إلى أنه لإيجاد نقطة البداية المناسبة، نحتاج إلى إيجاد الأساس الذي يقطرن $\mathbf{H}_1$ ضمن الفضاء المنحل فقط وليس فضاء هيلبرت بالكامل. وبالتالي ، حتى لو تعاملنا مع مصفوفات بأبعاد غير متناهية، فإن القطرنة التامة exact diagonalization تتم في الأبعاد المتناهية و التي تمثل الفضائات الجزئية المنحلة. عل سبيل المثال لو كان $\hat{H}_0$ يُمثل بالمصفوفة التالية

$$\mathbf{H}_0 = \begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & E_k^{(0)} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_k^{(0)} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_k^{(0)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix},$$

مايهمنا هنا هو الفضاء الجزئي والذي يتضمن الحالات $n = k$، $n = k+1$، و $n = k+2$ المحددة بالمربع والذي يمثل الفضاء المنحل من $\hat{H}_0$ نرمز له بـ $\hat{H}_0^k$ و يمكن أن يكتب بمعلومية مصفوفة الوحدة $\mathbf{H}_0^k = E_k^{(0)}\mathbf{I}$ حيث $\mathbf{I}$ يمثل مصفوفة الوحدة والتي ابعادها 3×3 على عدد الإنحلالات. مؤثر المصفوفة الجزئية يحقق المعادلة المميزة

$$\hat{H}_0^k|\psi_n^{(0)}\rangle = E_k^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle, \qquad \forall\, n = k, k+1, \text{ and } k+2. \tag{14.15}$$

مع وجود الإضطراب، المعادلة المميزة تصبح

$$\hat{H}^k|\psi_n\rangle = E_k|\psi_n\rangle; \qquad \forall\, n = k, k+1, \text{ and } k+2, \tag{14.16}$$

حيث $\hat{H}^k = \hat{H}_0^k + \hat{H}_1^k$ يمثل الهاميلتون المضطرب. يبقى فقط أن نتعلم كيفية حساب الأساسات الحميدة $|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$ كي نتمكن من حل المعادلات (14.15) و (14.16)، والتي سنتناولها في القسم التالي بعد هذا المثال.

مثال (14.3): إعتبر جسيم كتلته m يتذبذب في بعدين x و y بفعل جهد مهتز توافقي بسيط بتردد ω. الهاميلتون الأساسي

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2+y^2\right).$$

يمكن التعامل مع هذا النظام على أساس أنه تراكب لمتذبذبين مستقلين في بعد واحد بسبب إمكانية حل المعادلة أعلاه عن طريق فصل المتغيرات لنحصل على الحل

$$|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle,$$

حيث $n_1 = 0, 1, 2, \cdots$ يمثل الحالات الكمية للذبذبة على محور x، و $n_2 = 0, 1, 2, \cdots$ يمثل الحالات الكمية للذبذبة على محور y. القيم المميزة تصبح

$$\begin{aligned} E_{n_1,n_2} &= E_{n_1} + E_{n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \\ &= (n_1 + n_2 + 1)\,\hbar\omega \end{aligned}$$

الحالة الأرضية $|0,0\rangle$ فريدة، لها طاقة $\hbar\omega$. لكن حالة الإثارة الأولي منحلة $|0,1\rangle$ أو $|1,0\rangle$، وكلا الحالتين لها طاقة $2\hbar\omega$. بتمثيل الدوال، حالة الإثارة الأولى تُكتب

$$\langle x, y|0,1\rangle = \psi_0^{(0)}(x)\psi_1^{(0)}(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{m\omega}{\hbar}ye^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)},$$

و

$$\langle x, y|1,0\rangle = \psi_1^{(0)}(x)\psi_0^{(0)}(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{m\omega}{\hbar}xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}.$$

إذا تفاعل الجسيم بفعل حد إضطرابي يُعطى بـ

$$\hat{H}_1 = \epsilon m\omega^2 xy.$$

المطلوب هو معرفة الحالات الحميدة التي يمكن أن تستخدم لإيجاد التصحيح في مستويات الطاقة نتيجة للإضطراب. ♠

حل مثال (14.3): لمعرفة الحالات الحميدة يلزمنا أن نوجد الحالات المميزة eigenstates الكاملة للهاميلتون $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ ثم أخذ النهاية $\epsilon \to 0$ كي نصل للحالات الحميدة غير المضطربة. لكن الحل التام للهاميلتون $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ معقد! لايمكن أن نستخدم فصل المتغيرات هنا بسبب الإقتران coupling في الحد الإضطرابي الذي يحوي الضرب xy. لكن من الممكن من نقاشنا السابق معرفة الحالات الحميدة بتطبيق مؤثر الدوران $\hat{\mathcal{R}}$ على الإحدثيات والذي يُعطى من العلاقة (12.73). لو أخذنا التحويل

$$\begin{bmatrix} x \\ \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ \\ y' \end{bmatrix},$$

هنا $\hat{\mathcal{R}}$ مصفوفة واحدية، $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathcal{R}}^{-1}$. إختيارنا لهذا التحويل سببه بأنه سيزيل الإقتران decouple في الحد الإضطرابي. إذاً

$$x' = \frac{x+y}{\sqrt{2}}; \qquad y' = \frac{x-y}{\sqrt{2}},$$

بتطبيق قاعدة السلسلة في المشتقة، نحصل على

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial x'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial y'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y'} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial y'}\right); \qquad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial}{\partial y'}\right).$$

نعوض في الهاميلتون لنحصل على

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) + \frac{1}{2}m(1+\epsilon)\omega^2 x'^2 + \frac{1}{2}m(1-\epsilon)\omega^2 y'^2,$$

حيث تؤول إلى المعادلة التفاضلية الأصلية عندما $\epsilon \to 0$. المعادلة التفاضلية أعلاه قابلة للحل بإستخدام فصل المتغيرات. حلها التام يُعطي متذبذبين مستقلين لبعد واحد

$$\Psi_{n_+,n_-}(x',y') = \psi_{n_+}(x')\psi_{n_-}(y'),$$

حيث أن $\psi_{n_\pm}$ حالة المتذبذب في بعد واحد بتردد $\omega_\pm = \sqrt{1 \pm \epsilon}\,\omega$، على الترتيب. مستويات الطاقة التامة exact energy eigenvalues تُعطى كالتالي

$$E_{n_+,n_-} = \left(n_+ + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_+ + \left(n_- + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_-,$$

و الموضحة في الشكل (14.7). الشكل يوضح أنه مع زيادة ϵ الإنحلال يزول عن حالة الإثارة الأولى $2\hbar\omega$ لينبثق عنها حالتين: المستوى في الأسفل $n_+ = 0$ و $n_- = 1$ $(E_{0,1})$ و المستوى في الأعلى $n_+ = 1$ و $n_- = 0$ $(E_{1,0})$. حالة الإثارة الثانية $3\hbar\omega$ لها ثلاث إنحلالات تزول مع زيادة ϵ لنحصل على الطاقات من الأسفل إلى الأعلى: $E_{0,2}$، $E_{1,1}$، و$E_{2,0}$. لاحظ أن الحالة الأرضية فريدة، لكن مع زيادة ϵ تنزاح مستويات الطاقة إلى الأسفل مما يتفق مع إستنتاجاتنا المتعلقة بتصحيح الرتبة الثانية للطاقة.

في المستويين المنبثقين عن حالة الإثارة الأولى المنحلة مع زيادة ϵ، لو إقتفينا أثر هذه الحالات عندما $\epsilon = 0$، حيث يصبح $\omega_+ = \omega_- = \omega$، نجد أن الحل

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon\to 0}\Psi_{n_+=0,n_-=1}(x',y') &= \lim_{\epsilon\to 0}\psi_{n_+=0}(x')\psi_{n_-=1}(y') = \psi_0\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)\psi_1\left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right), \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{m\omega}{\hbar}\left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}, \\
&= \frac{-\psi_1^{(0)}(x)\psi_0^{(0)}(y) + \psi_0^{(0)}(x)\psi_1^{(0)}(y)}{\sqrt{2}}.
\end{aligned}$$

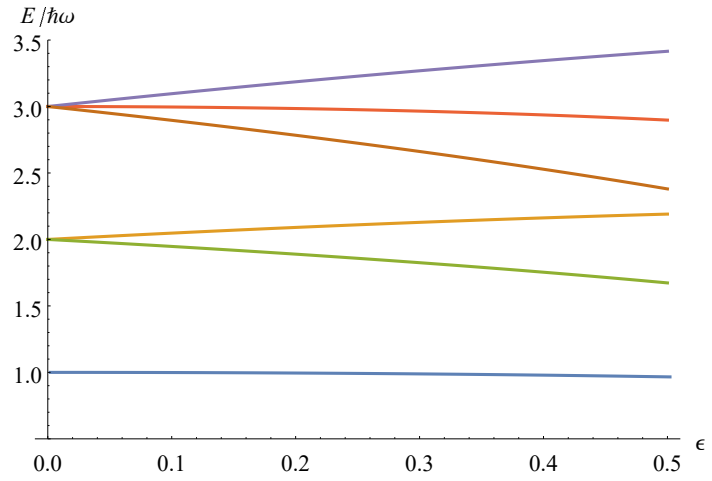
يمكننا القول أن الأساس الحميد للأساس $|0,\bar{1}\rangle$ يكتب

$$|0,\bar{1}\rangle = \frac{|0,1\rangle - |1,0\rangle}{\sqrt{2}},$$

بنفس الطريقة فإن الأساس الحميد $|1,\bar{0}\rangle$ يوجد بنفس الطريقة أعلاه، لنصل إلى

$$|1,\bar{0}\rangle = \frac{|0,1\rangle + |1,0\rangle}{\sqrt{2}}.$$

إذا في هذا المثال حسبنا الحلات المميزة التامة لـ $\hat{H}$ ثم أطفئنا الإضطراب كي نرى الأساس الحميد الذي تطور الإضطراب منه. هذه الأساسات الحميدة ليست سوى الجمع الخطي لأساسات $\hat{H}_0$! لكن مايهمنا هنا هو كيف نحسب الأساسات الحميدة لو لم نتمكن من حل النظام مع الإضطراب حلاً تاماً؟ ♣



شكل (14.7): أول 3 مستويات طاقة تامة exact levels للمتذبذب التوافقي البسيط في بعدين مع الإضطراب المقترن coupled perturbation، كدالة لـ ϵ.

States of two-fold degeneracy الحالات ثنائية الإنحلال

لنفترض أن الحالتين $n = j$ و $n = k$ منحلتين، أي أن

$$\hat{H}_0|\psi_j^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi_j^{(0)}\rangle; \qquad \hat{H}_0|\psi_k^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi_k^{(0)}\rangle; \qquad \langle\psi_k^{(0)}|\psi_j^{(0)}\rangle = 0. \tag{14.17}$$

بإعتبار أن الحالتين $|\psi_k^{(0)}\rangle$ و $|\psi_j^{(0)}\rangle$ معايرتان، فإننا نأخذ الحالة الحميدة كجمع خطي للحالتين

$$|\bar{\psi}^{(0)}\rangle \equiv a_j|\psi_j^{(0)}\rangle + a_k|\psi_k^{(0)}\rangle, \tag{14.18}$$

والتي لاتزال بدورها حالة مميزة لـ $\hat{H}_0$: كالتالي

$$\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle. \tag{14.19}$$

نحتاج إلى حل معادلة شرودنجر

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \tag{14.20}$$

حيث أن $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$. نأخذ مفكوك الحالات المميزة بمعلومية الحالات الحميدة و مفكوك القيم المميزة

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\bar{\psi}^{(0)}\rangle + \lambda|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \lambda^2|\bar{\psi}^{(2)}\rangle + \cdots, \\ E &= E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots. \end{aligned} \tag{14.21}$$

كما فعلنا سابقاً، نعوض العلاقات (14.21) في (14.20)، نحصل على

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi\rangle &= \left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1\right)\left(|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + \lambda|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \lambda^2|\bar{\psi}^{(2)}\rangle + \cdots\right) \\ &= \left(E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots\right)\left(|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + \lambda|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \lambda^2|\bar{\psi}^{(2)}\rangle + \cdots\right), \end{aligned}$$

بترتيب الحدود كقوى لـ λ نحصل على

$$\begin{aligned} &\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + \lambda\left(\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|\bar{\psi}^{(0)}\rangle\right) + \lambda^2\left(\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|\bar{\psi}^{(1)}\rangle\right) + \cdots \\ = \;& E^{(0)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + \lambda\left(E^{(1)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + E^{(0)}|\bar{\psi}^{(1)}\rangle\right) + \lambda^2\left(E^{(0)}|\bar{\psi}^{(2)}\rangle + E^{(1)}|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + E^{(2)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle\right) + \cdots. \end{aligned}$$

من معادلة (14.19) الحد الأول في الطرف الأيسر يلغي الحد الأول في الطرف الأيمن. نأخذ معاملات λ^1 فقط، لنحصل على

$$\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|\bar{\psi}^{(0)}\rangle = E^{(1)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + E^{(0)}|\bar{\psi}^{(1)}\rangle. \tag{14.22}$$

بضرب الطرفين بالبرا $\langle\psi_j^{(0)}|$، نحصل على

$$\langle\psi_j^{(0)}|\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \langle\psi_j^{(0)}|\hat{H}_1|\bar{\psi}^{(0)}\rangle = E^{(1)}\langle\psi_j^{(0)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + E^{(0)}\langle\psi_j^{(0)}|\bar{\psi}^{(1)}\rangle. \tag{14.23}$$

من هيرميشية $\hat{H}_0$ الحد الأول في الطرف الأيسر من المعادلة (14.23) يُعطي $E^{(0)}\langle\psi_j^{(0)}|\bar{\psi}^{(1)}\rangle$ و الذي يلغي الحد الثاني من الطرف الأيمن في نفس المعادلة. نستخدم العلاقة (14.18) للتعويض عن $|\bar{\psi}^{(0)}\rangle$ في المعادلة (14.23)، نحصل على

$$a_j\langle\psi_j^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_j^{(0)}\rangle + a_k\langle\psi_j^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_k^{(0)}\rangle = a_j E^{(1)}. \tag{14.24}$$

لو عرفنا عنصر مصفوفة الإضطراب

$$W_{nm} \equiv \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_m^{(0)}\rangle, \tag{14.25}$$

وهي كمية معروفة و معطاه. نعوض في المعادلة (14.24) لنحصل على صيغة أكثر إندامجاً

$$a_j W_{jj} + a_k W_{jk} = a_j E^{(1)}. \tag{14.26}$$

لو ضربنا طرفي المعادلة (14.22) بالبرا $\langle\psi_k^{(0)}|$ و قمنا بنفس الخطوات السابقة نصل إلى

$$\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_0|\bar{\psi}^{(1)}\rangle + \langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\bar{\psi}^{(0)}\rangle = E^{(1)}\langle\psi_k^{(0)}|\bar{\psi}^{(0)}\rangle + E^{(0)}\langle\psi_k^{(0)}|\bar{\psi}^{(1)}\rangle,$$

مع إلغاء الحدود المتشابهة في الطرفين بعد أستغلال الهيرميشية لـ $\hat{H}_0$، والتعويض عن $|\bar{\psi}^{(0)}\rangle$ نصل إلى

$$a_j\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_j^{(0)}\rangle + a_k\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_k^{(0)}\rangle = a_k E^{(1)},$$

أو

$$a_j W_{kj} + a_k W_{kk} = a_k E^{(1)}. \tag{14.27}$$

يمكن جمع المعادلتين (14.26) و (14.27) بصيغة المصفوفات كالتالي

$$\begin{bmatrix} W_{jj} & W_{jk} \\ W_{kj} & W_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_j \\ a_k \end{bmatrix} = E^{(1)} \begin{bmatrix} a_j \\ a_k \end{bmatrix}. \tag{14.28}$$

أو

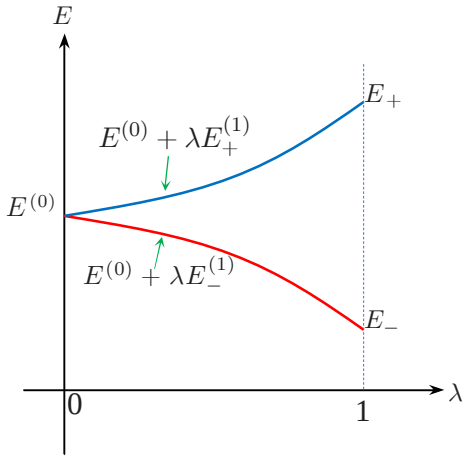
$$\mathbf{W}\cdot\mathbf{a} = E^{(1)}\mathbf{a} \quad \Rightarrow \quad \left(\mathbf{W} - E^{(1)}\mathbf{I}\right)\cdot\mathbf{a} = 0. \tag{14.29}$$

هذا يعني أن القيم المميزة للمصفوفة $\mathbf{W}$ تُعطي تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى $E^{(1)}$، و المتجهات المميزة eigenvectors تُعطي المعاملات a_j و a_k والتي بدورها تُعطينا الحالات الحميدة. حتى نحصل على حل غير صفري لابد من أن المحدد يحقق

$$\left|\mathbf{W} - E^{(1)}\mathbf{I}\right| = 0, \tag{14.30}$$

أو

$$\begin{vmatrix} W_{jj} - E^{(1)} & W_{jk} \\ W_{kj} & W_{kk} - E^{(1)} \end{vmatrix} = \left(W_{jj} - E^{(1)}\right)\left(W_{kk} - E^{(1)}\right) - |W_{jk}|^2 = 0, \tag{14.31}$$



شكل (14.8): مستوى الطاقة ثنائي الإنحلال $E^{(0)}$. لاحظ أن الإنحلال يزول مع زيادة λ بوجود الإضطراب.

حيث إستخدمنا شرط الهيرميشية للمصفوفة **W** و بالتالي $W_{kj} = W_{jk}^*$. حل هذه المعادلة التربيعية ينتج

$$E_\pm^{(1)} = \frac{1}{2}\left[W_{jj} + W_{kk} \pm \sqrt{(W_{jj} - W_{kk})^2 + 4\,|W_{jk}|^2}\right]. \tag{14.32}$$

هذه هي العلاقة الأساسية لنظرية الإضطراب المنحلة. جذري المعادلة (14.32) يمثلان الطاقات المضطربة و الذي تزيل الإنحلال في الطاقة $E^{(0)}$ كما هو موضح في الشكل (14.8).

من الجدير بالذكر أن الحالات المنحلة تكون عموماً متتابعة. أي أنه يمكن أخذ $k = j + 1$، لتصبح العلاقة (14.28) كالتالي

$$\begin{bmatrix} W_{j,j} & W_{j,j+1} \\ W_{j+1,j} & W_{j+1,j+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_j \\ a_{j+1} \end{bmatrix} = E^{(1)} \begin{bmatrix} a_j \\ a_{j+1} \end{bmatrix}. \tag{14.33}$$

للحالات ثلاثية الإنحلال فإننا نحصل على مصفوفة 3×3 و المطلوب حل معادلة تكعيبية لإيجاد 3 تصحيحات للطاقة بالإضافة إلى ثلاث معاملات للجمع الخطي للحالات المنحلة للحصول على الحالة الحميدة.

مثال (14.4): نعود الآن إلى المثال (3). أثبت أن قطرنة diagonalizing المصفوفة **W** تُعطي الحالات الحميدة و التي أوجدناها سابقاً من الحل التام للمسألة. ♠

حل مثال (14.4): نستخدم الأساسات $|n_1, n_2\rangle$ حيث n_1 هو العدد الكمي للمتذبذب بإتجاه x، و n_2 هو العدد الكمي للمتذبذب بإتجاه y. نعبر عن قيمة x و y في هاميلتون الإضطراب بإستخدام المؤثرات الدرجية كما في العلاقة (6.40)، لنحصل على

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \epsilon m\omega^2 xy = \epsilon m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_1^+ + \hat{a}_1^-)(\hat{a}_2^+ + \hat{a}_2^-), \\ &= \frac{\epsilon}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_2^- + \hat{a}_1^-\hat{a}_2^+ + \hat{a}_1^-\hat{a}_2^-\right), \end{aligned}$$

حيث $\hat{a}_1^\pm$ يمثل المؤثرات الدرجية للمتذبذب بإتجاه x و الذي يؤثر على العدد الكمي n_1، و $\hat{a}_2^\pm$ يمثل المؤثرات الدرجية للمتذبذب بإتجاه y و الذي يؤثر على العدد الكمي n_2. نريد إذاً إيجاد القيم المميزة و المتجهات المميزة للمصفوفة

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \langle 0,1|\hat{H}_1|0,1\rangle & \langle 0,1|\hat{H}_1|1,0\rangle \\ \\ \langle 1,0|\hat{H}_1|0,1\rangle & \langle 1,0|\hat{H}_1|1,0\rangle \end{bmatrix}.$$

نستخدم العلاقة (6.31)، $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ و العلاقة (6.32)، $\hat{a}^-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ مع تطبيق علاقة التعامد، كي نحسب عناصر المصفوفة $\mathbf{W}$. لتصبح

$$\langle 0,1|\hat{H}_1|0,1\rangle = \frac{\epsilon}{2}\hbar\omega\left\langle \hat{a}_1^+\hat{a}_2^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_2^- + \hat{a}_1^-\hat{a}_2^+ + \hat{a}_1^-\hat{a}_2^-\right\rangle_{(0,1)} = 0,$$

بنفس الطريقة

$$\langle 1,0|\hat{H}_1|1,0\rangle = \frac{\epsilon}{2}\hbar\omega\left\langle \hat{a}_1^+\hat{a}_2^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_2^- + \hat{a}_1^-\hat{a}_2^+ + \hat{a}_1^-\hat{a}_2^-\right\rangle_{(1,0)} = 0,$$

أي أن العناصر القطرية أصفار. العناصر خارج القطر off-diagonal elements تصبح

$$\langle 0,1|\hat{H}_1|1,0\rangle = \frac{\epsilon}{2}\hbar\omega\,[\underbrace{\langle 0,1|\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+|1,0\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0,1|\hat{a}_1^+\hat{a}_2^-|1,0\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0,1|\hat{a}_1^-\hat{a}_2^+|1,0\rangle}_{=1} + \underbrace{\langle 0,1|\hat{a}_1^-\hat{a}_2^-|1,0\rangle}_{=0}\,] = \frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega.$$

في المقابل

$$\langle 1,0|\hat{H}_1|0,1\rangle = \frac{\epsilon}{2}\hbar\omega\,[\underbrace{\langle 1,0|\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+|0,1\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 1,0|\hat{a}_1^+\hat{a}_2^-|0,1\rangle}_{=1} + \underbrace{\langle 1,0|\hat{a}_1^-\hat{a}_2^+|0,1\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 1,0|\hat{a}_1^-\hat{a}_2^-|0,1\rangle}_{=0}\,] = \frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega.$$

لتصبح $\mathbf{W}$ كالتالي

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

نحسب المتجهات المميزة لـ $\mathbf{W}$ بنفس الطريقة التي تعلمناها سابقاً، أنظر مثال (3)، لنحصل على المتجهات المميزة المعايرة، و القيم المميزة، على الترتيب

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}; \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}; \qquad E_\pm^{(1)} = \pm\frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega.$$

القيم المميزة يمكن أن تُحسب مباشرة من العلاقة (14.32) و هي تُعطي تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى. أما المتجهات المميزة فهي تعطي المعاملات الخطية لأساسات الحميدة، كما في العلاقة

$$\frac{|0,1\rangle \pm |1,0\rangle}{\sqrt{2}}.$$

و التي أوجدناها سابقاً في المثال (3). ♣

لو حدث أن المصفوفة $\mathbf{W}$ قطرية، أي أن $W_{jk} = 0$، فإن المتجهات المميزة ليست سوى

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \qquad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

و عناصر القطر هي القيم المميزة

$$E_+^{(1)} = W_{jj} = \langle\psi_j^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_j^{(0)}\rangle; \qquad E_-^{(1)} = W_{kk} = \langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_k^{(0)}\rangle,$$

تمثل تماماً تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى في نظرية الإضطراب الغير منحلة في العلاقة الاساسية (14.8). و بالتالي فإن الأساسات $|\psi_j^{(0)}\rangle$ و $|\psi_k^{(0)}|$ أساسات حميدة. لكن هل من الممكن أن نخمن الحالات و الأساسات الحميدة من البداية لنقفز إلى إلى نظرية الإضطراب غير المنحلة وحساب التصحيحات؟ هذا ماسنجيب عليه في النظرية التالية:

نظرية Theorem: إعتبر المؤثر الهيرميشي $\hat{A}$ والإبدالي مع كل من الهاميلتون غير المضطرب $\hat{H}_0$ و الهاميلتون المضطرب $\hat{H}_1$. إذا إعتبرنا $|\psi_j^{(0)}\rangle$ و $|\psi_k^{(0)}|$ (حيث $j \neq k$ حالتان منحلتان لـ $\hat{H}_0$) حالات مميزة eigen-state للمؤثر $\hat{A}$، بقيم مميزة مختلفة،

$$\hat{A}|\psi_j^{(0)}\rangle = A_j|\psi_j^{(0)}\rangle; \qquad \hat{A}|\psi_k^{(0)}\rangle = A_k|\psi_j^{(0)}\rangle, \quad \forall\, j \neq k,$$

إذاً $|\psi_j^{(0)}\rangle$ و $|\psi_k^{(0)}|$ تمثلان حالات حميدة، يمكن إستخداهما بنظرية الإضطراب.

البرهان Proof: بما أن الهاميلتون $\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$ إبدالي مع المؤثر الهيرميشي $\hat{A}$، إذاً يوجد مجموعة حالات مميزة متزامنة $|\psi_n^{\lambda}\rangle$، بحيث

$$\hat{H}|\psi_n^{\lambda}\rangle = E_n^{\lambda}|\psi_n^{\lambda}\rangle; \qquad \hat{A}|\psi_n^{\lambda}\rangle = A_n^{\lambda}|\psi_n^{\lambda}\rangle. \tag{14.34}$$

نضرب المعادلة الثانية من (14.34) بالبرا $\langle\psi_j^{(0)}|$ مع تطبيق خاصية الهيرميشية لـ $\hat{A}$، لنحصل على

$$\langle\psi_j^{(0)}|\hat{A}|\psi_n^{\lambda}\rangle = A_n^{\lambda}\langle\psi_j^{(0)}|\psi_n^{\lambda}\rangle, \quad \Rightarrow \quad A_j^{*}\langle\psi_j^{(0)}|\psi_n^{\lambda}\rangle = A_n^{\lambda}\langle\psi_j^{(0)}|\psi_n^{\lambda}\rangle,$$

أو

$$\left(A_n^{\lambda} - A_j\right)\langle\psi_j^{(0)}|\psi_n^{\lambda}\rangle = 0, \tag{14.35}$$

حيث إعتبرنا A_j حقيقية بسبب هيرميشية $\hat{A}$. العلاقة (14.35) صالحة لأي قيمة لـ λ. بأخذ $\lambda \to 0$ تؤول $|\psi_n^{\lambda}\rangle \to |\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle$، الحلات الحميدة، لنحصل على

$$(A_n - A_j)\,\langle\psi_j^{(0)}|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle = 0, \tag{14.36}$$

هذا يعني أن $\langle\psi_j^{(0)}|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle = 0$ إلا إذا $n = j$. بنفس الخطوات نجد أن $\langle\psi_k^{(0)}|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle = 0$ إلا إذا $n = k$. الحالات الحميدة ناتجة عن الجمع الخطي للحالات المنحلة غير المضطربة $|\psi_j^{(0)}\rangle$ و $|\psi_k^{(0)}|$، أي

$$|\bar{\psi}_n^{(0)}\rangle = a_j|\psi_j^{(0)}\rangle + a_k|\psi_k^{(0)}\rangle, \qquad j \neq k.$$

الآن، إذا حدث أن $n = j$، فإن $n \neq k$ هذا يؤدي إلى أن $a_k = \langle\bar{\psi}_n^{(0)}|\psi_k^{(0)}\rangle = 0$ هذا يعني أن $|\psi_j^{(0)}\rangle$ حالة حميدة. لو أن $n = k$، فإن $n \neq j$ هذا يؤدي إلى أن $a_j = \langle\bar{\psi}_n^{(0)}|\psi_j^{(0)}\rangle = 0$ هذا يعني أن $|\psi_k^{(0)}\rangle$ حالة حميدة. في كلا الحالتين الغير معتمدتين mutually exclusive تعني أنه إما $|\psi_j^{(0)}\rangle$ أو $|\psi_k^{(0)}\rangle$ حالة حميدة.

بمجرد تحديد الحالات "الحميدة" ، إما عن طريق حل المعادلة (14.28) أو عن طريق تطبيق هذه النظرية، يمكننا استخدام هذه الحالات "الجيدة" كحالات غير مضطربة لدينا وتطبيق نظرية الاضطراب العادية غير المنحلة. في كثير من الأحيان، المؤثر $\hat{A}$ يُخمَّن بناء على التناظر الذي يحكم النظام. التناظر يرتبط بالمؤثرات الإبدالية مع الهاميلتون والمطلوبة لتحديد الحالات الحميدة.

مثال (14.5): أوجد المؤثر $\hat{A}$ الذي يحقق الشروط المطلوبة في النظرية السابقة للحصول على الحالات الحميدة في المثالين (3) و(4). ♠

حل مثال (14.5): من الواضح أن هاميلتون الحركة التوافقية البسيطة $\hat{H}_0$ في بعدين متناظر دورانياً حول محور z. لكن هاميلتون الإضطراب $\hat{H}_1$ أضعف التناظر، لأن الهاميلتون الكلي $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ لايتغير بالدوران حول محور z بزاوايا تساوي مضاعفات صحيحة لـ π. لو إعتبرنا المؤثر $\hat{\mathcal{R}}$ هو مبتغانا، حيث قاعدة تأثيره على الحالات المنحلة كالتالي

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{R}}(\pi)\langle x,y|0,1\rangle = \hat{\mathcal{R}}(\pi)\Psi_{01}(x,y) &= \Psi_{01}(-x,-y) = -\Psi_{01}(x,y),\\ \hat{\mathcal{R}}(\pi)\langle x,y|1,0\rangle = \hat{\mathcal{R}}(\pi)\Psi_{10}(x,y) &= \Psi_{10}(-x,-y) = -\Psi_{10}(x,y).\end{aligned}$$

من الواضح أن الحالات $\langle x,y|0,1\rangle$ و $\langle x,y|1,0\rangle$ حالات مميزة بنفس القيم المميزة للمؤثر $\hat{\mathcal{R}}(\pi)$. لكن في الواقع نحتاج إلى مؤثر بحالات مميزة و قيم مميزة مختلفة. لكن ماذا عن المؤثر الذي يبادل x و y؟ هذا يتم عن طريق الإنعكاسية حول قطر يصنع زاوية 45° على مستوى $x-y$. لنطلق على هذا المؤثر التبادلي $\hat{D}$. المؤثر $\hat{D}$ إبدالي مع $\hat{H}_0$ و $\hat{H}_1$، لأن تبديل x مع y لايغير أي من الهاميلتون. الآن

$$\begin{aligned}\hat{D}\langle x,y|0,1\rangle &= \langle y,x|0,1\rangle = \langle x,y|1,0\rangle,\\ \hat{D}\langle x,y|1,0\rangle &= \langle y,x|1,0\rangle = \langle x,y|0,1\rangle.\end{aligned}$$

الحالات المنحلة $\langle x,y|0,1\rangle$ و $\langle x,y|1,0\rangle$ لـ $\hat{H}_0$ لم تعد منحلة بـ $\hat{D}$ لكنها أيضاً ليست حالات مميزة له! لكن الجمع الخطي التالي $\pm\langle x,y|0,1\rangle + \langle x,y|1,0\rangle$ هي حالات مميزة لـ $\hat{D}$ بقيمة مميزة ± 1 مختلفة. وبالتالي هذا الجمع الخطي تعتبر الحالات الحميدة. حتى نحصل على نفس الحل السابق يلزمنا فقط إجراء معايرة كي نحصل على المعامل $1/\sqrt{2}$. ♣

نلخص و نقول أنه إذا واجهنا حالات منحلة فالأفضل البحث عن مؤثر هيرميشي إبدالي مع كلاً من الهاميلتون غير المضطرب $\hat{H}_0$ و الهاميلتون المضطرب $\hat{H}_1$. نختار الحالات غير المضطربة و التي تكون مميزة لكل من هذا المؤثر و الهاميلتون $\hat{H}_0$ مع قيم مميزة مختلفة ثم نطبق نظرية الإضطراب العادية. إذا تعذر هذا المؤثر، فإنه يتوجب علينا حل المعادلة (14.28). عملياً، الخطوة الأخيرة نادراً ما تستخدم.

485 SHANK 373 Griffiths

306 SAk P190 GAS

ملـــــحق A

الدوال الخاصة Special functions

الدوال الخاصة عادة تمثل بكثيرات حدود polynomials و تُعْتبر حلاً للمعادلات التفاضلية الخطية المتجانسة من الرتبة الثانية و التي تنتج عن نمذجة الأنظمة الفيزيائية. سنهتم في هذا الباب بنوع من التفاصيل بدوال ليجندر Legendre functions و دوال ليجندر المزاملة associate Legendre functions و من ثم ننتقل إلى دوال التوافق الكروي spherical harmonics. هذه الدوال تظهر في مسائل الفيزياء عموماً لدى حل الجزء الزاوي من معادلة هيلمهولتز Helmholtz equation و في ميكانيكا الكم خصوصاً لدى حل الجزء الزاوي من معادلة شرودنجر و ذلك في نظام الإحداثيات القطبية الكروية spherical polar coordinate system. هذه الدوال هامة جداً لدراسة حركة الجسيم المدارية تحت تأثير الجهود المركزية، حيث تُمَثّل حلولها الدوال المميزة للعزوم الزاوية. كذلك سنسلط الضوء على دوال بسل Bessel functions و دوال بسل الكروية spherical Bessel functions نظراً لأهميتها في حل المعادلة القطرية radial equation للجسيم المحصور في جهود إسطوانية أو كروية لانهائية، على الترتيب. و من ثم سندرس دوال لاجوير Laguerre polynomials و دوال لاجوير المزاملة و التي منها نحصل على الحل العام للدالة القطرية للأنظمة تحت تأثير جهد متناظر كروياً، كالجهود المركزية central potentials. و منها يمكن إستخراج طيف الطاقة لذرة الهيدروجين. و أخيراً سنسلط الضوء على دوال هيرميت Hermite polynomials بسبب أهميتها في حل نظام المتذبذب التوافقي البسيط simple harmonic oscillator.

A.1 دوال ليجندر Legendre functions

من الدوال الهامة جداً في الفيزياء، و التي تظهر في المعالجات النظرية في معظم فروع الفيزياء. تُعْطى الدالة المولدة لدوال ليجندر من العلاقة التالية

$$g(x,t) = (1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l; \quad |t| < 1, \tag{A.1}$$

حيث هنا $P_l(x)$ تمثل مجموعة دوال ليجندر. المتسلسلة أعلاه في (A.1) تتقارب converges طالما أن $|t| < 1$. كذلك تتقارب المتسلسلة أعلاه في حالة $|t| = 1$ و $|x| < 1$. عموماً شرط التقارب ليس اساسياً من أجل إيجاد تعبير رياضي لدالة ليجندر. لو إعتبرنا أن $(2xt - t)$ حد و قمنا بعمل مفكوك ذو الحدين binomial expansion مرتين، مرة لـ$(1 - 2xt + t^2)^{-1/2}$ بإستخدام المؤشر index n و مع تطبيق علاقات المضروب المزدوج (مذكورة لاحقاً

في العلاقات (A.103) و (A.104) ، لنحصل على

$$\left(1-2xt+t^2\right)^{-1/2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n-1)!!}{2n!!}\left(2xt-t^2\right)^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}t^n\left(2x-t\right)^n,$$

و مرة ثانية لـ $(2x-t)^n$ بإستخدام نظرية مفكوك ذوالحدين للمؤشر index k، لنحصل على

$$\begin{aligned}\left(1-2xt+t^2\right)^{-1/2} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}t^n\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{n!}{k!(n-k)!}(2x)^{n-k}t^k,\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(2n)!}{2^{2n}k!n!(n-k)!}(2x)^{n-k}t^{n+k}.\end{aligned}$$

أي أننا حصلنا على متسلسلة مزدوجة لمجموعين $\sum_n$ و $\sum_k$. حتى نستطيع أن نقارن معاملات t في المتسلسلة المزدوجة مع معاملات t في مفكوك الدالة المولدة (A.1) فإننا نحتاج $n+k=l$. نتيجة لذلك نأخذ $n=l-k$، و بإستخدام الحقيقة التالية[1]

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}a_{k,n-k}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{[l/2]}a_{k,l-2k},$$

حيث أن $[l/2]=l/2$ إذا كانت قيمة l زوجية، و $[l/2]=(l-1)/2$ إذا كانت l فردية. المفكوك المزدوج يُكتَب إذاً كالتالي

$$\left(1-2xt+t^2\right)^{-1/2}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{[l/2]}(-1)^k\frac{(2l-2k)!}{2^{2l-2k}k!(l-k)!(l-2k)!}(2x)^{l-2k}t^l.$$

و بالمقارنة مع المتسلسلة في (A.1) نحصل على صيغة صريحة لـ $P_l(x)$ لتصبح

$$P_l(x)=\sum_{k=0}^{[l/2]}(-1)^k\frac{(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k)!}x^{l-2k}. \tag{A.2}$$

نلاحظ أيضاً أن

$$\frac{(2l-2k)!}{(l-2k)!}x^{l-2k}=\frac{d^l}{dx^l}x^{2l-2k},$$

لتصبح معادلة (A.2) بالشكل التالي

$$P_l(x)=\sum_{k=0}^{[l/2]}(-1)^k\frac{1}{2^l k!(l-k)!}\frac{d^l}{dx^l}x^{2l-2k}=\frac{1}{2^l}\frac{d^l}{dx^l}\sum_{k=0}^{[l/2]}(-1)^k\frac{1}{k!(l-k)!}x^{2l-2k}.$$

لكن من السهل أن نجد أن إشتقاق x^{2l-2k} بالنسبة لـ x بتكرار يساوي l مرة يساوي الصفر إذا كانت $k>[l/2]$. أي أن

$$\frac{d^l}{dx^l}x^{2l-2k}=0;\qquad k>[l/2].$$

لهذا يمكن أن نمدد المجموع من $\sum_{k=0}^{[l/2]}$ إلى $\sum_{k=0}^{l}$ لنحصل على

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l}\frac{d^l}{dx^l}\sum_{k=0}^{l}(-1)^k\frac{1}{k!(l-k)!}x^{2l-2k},$$

لو ضربنا و قسمنا $l!$ نحصل على

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}\sum_{k=0}^{l}\frac{(-1)^k l!}{k!(l-k)!}(x^2)^{l-k},$$

داخل المجموع حصلنا على متسلسلة مفكوك ذو الحدين لـ $(x^2-1)^l$، أي أن

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l, \tag{A.3}$$

هذه صيغة رودريجز Rodrigues' formula و المفيدة جداً في إثبات العديد من خواص دوال ليجندر، كالتعامد مثلاً.

لو قمنا بإشتقاق الدالة المولدة (A.1) بالنسبة لـ t نحصل على

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial t} = \frac{x-t}{(1-2xt+t^2)^{3/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} l P_l(x) t^{l-1}, \tag{A.4}$$

و بالتعويض من العلاقة (A.1) و إستخدام خاصية تغيير المؤشرات التالية

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n b_{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1} b_n,$$

لنحصل على متسلسلة قوى لـ power series of t و مساواة المعاملات لكل قوة لـ t تساوي الصفر، نحصل على العلاقة التكرارية recurrence relation التالية

$$(2l+1)xP_l(x) = (l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x), \tag{A.5}$$

و التي من خلالها يمكن أن نبني دوال ليجندر عند الرتب العليا. يمكن بسهولة أن نحدد من علاقة (A.2) أن: $P_0(x) = 1$ و أن $P_1(x) = x$. بأخذ $l = 1$ في العلاقة التكرارية (A.5) نحصل على

$$3xP_1(x) = 2P_2(x) + P_0(x),$$

و بالتعويض عن قيم $P_0(x)$ و $P_1(x)$ نحصل على

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1).$$

و هكذا نستطيع بناء الجدول (A.1) و رسم الدوال في الشكل (A.1).

لو أخذنا قيمة $x = 1$ في الدالة المولدة (A.1) نحصل على

$$g(1,t) = \frac{1}{\sqrt{1-2t+t^2}} = \frac{1}{1-t} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l.$$

بمقارنة النتيجة أعلاه مع الدالة المولدة (A.1) نستنتج أن

$$P_l(1) = 1. \tag{A.6}$$

بنفس الطريقة لو أخذنا $x = -1$ في الدالة المولدة (A.1) سنحصل على

$$g(-1,t) = \frac{1}{\sqrt{1+2t+t^2}} = \frac{1}{1+t} = \sum_{l=0}^{\infty}(-t)^l = \sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l(t)^l,$$

جدول (A.1): كثيرات حدود ليجندر حتى الرتبة السادسة.

كثيرات حدود ليجندر Legendre polynomials
$P_0(x) = 1$
$P_1(x) = x$
$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$
$P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$

و الذي يعني أن

$$P_l(-1) = (-1)^l. \tag{A.7}$$

لو أخذنا الآن $x = -1$ و $t = -1$ في الدالة المولدة (A.1) فإن قيمتها لن تتغير، أي أن

$$g(-x,-t) = [1 - 2(-x)(-t) + (-t)^2]^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(-x)(-t)^l = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)t^l,$$

و التي تُعْطي علاقة التماثل parity relation لدالة ليجندر، لنحصل على

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x). \tag{A.8}$$

لنأخذ الآن قيمة $x = 0$ في الدالة المولدة (A.1). هذا يؤدي إلى أن

$$g(0,t) = (1 + t^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(0)t^l,$$

لكن نعلم أن مفكوك ذو الحدين يمكن أن يكتب بالشكل

$$(1 + t^2)^{-1/2} = 1 - \frac{1}{2}t^2 + \frac{3}{8}t^4 + \cdots + (-1)^l \frac{1 \cdot 3 \ldots (2l-1)}{2^l l!} t^{2l} + \ldots,$$

و الذي يعني أن الحدود ذوت المؤشرات الفردية $(2l+1)$ تساوي صفر و تبقى فقط الحدود ذوت المؤشرات الزوجية $2l$، إذاً

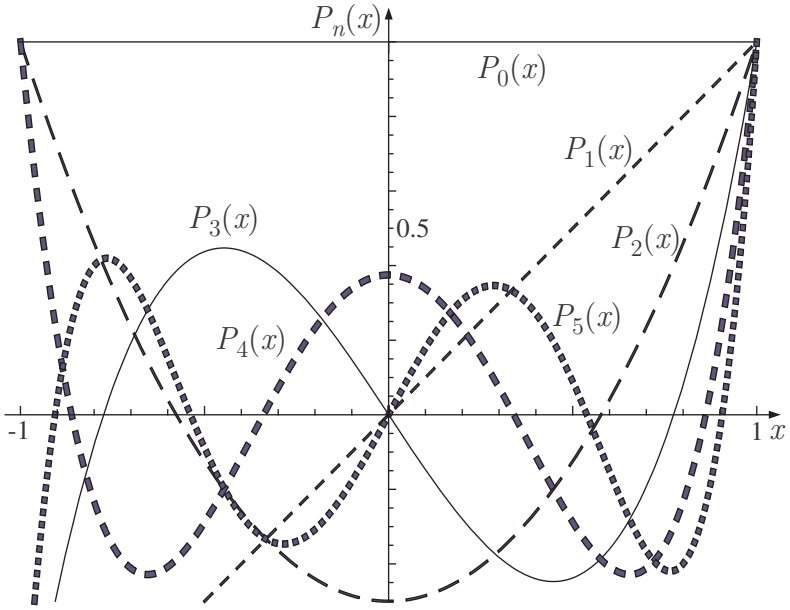
$$P_{2l}(0) = (-1)^l \frac{1 \cdot 3 \ldots (2l-1)}{2^l l!} = (-1)^l \frac{(2l-1)!!}{(2l)!!}, \tag{A.9}$$

و

$$P_{2l+1}(0) = 0. \tag{A.10}$$

بالمقابل لو قمنا بإشتقاق الدالة المولدة (A.1) بالنسبة لـ x نحصل على

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial x} = \frac{t}{(1 - 2xt + t^2)^{3/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l'(x)t^l. \tag{A.11}$$



شكل (A.1): دوال ليجندر Legendre plynomials حتى الرتبة الخامسة.

أو يمكن أن يكتب كالتالي

$$(1-2xt+t^2)\sum_{l=0}^{\infty}P_l'(x)t^l - t\sum_{l=0}^{\infty}P_l(x)t^l = 0.$$

بنفس الطريقة السابقة من مساواة المعاملات لكل قوة لـ t للصفر نحصل على

$$P_{l+1}'(x) - P_{l-1}'(x) = (2l+1)P_l(x). \tag{A.12}$$

بالتعويض من العلاقة المتكررة (A.5) في العلاقة المتكررة (A.12) نحصل على عدة علاقات تكرارية كالتالي

$$P_{l-1}'(x) = xP_l'(x) - lP_l(x), \tag{A.13}$$

و

$$(1-x^2)P_l'(x) = lP_{l-1}(x) - lxP_l(x). \tag{A.14}$$

بإشتقاق معادلة (A.14) مرة آخرى بالنسبة لـ x و تعويضها في (A.13) للتخلص من $P_{l-1}'(x)$ نحصل على معادلة تفاضلية خطية من الرتبة الثانية

$$(1-x^2)P_l''(x) - 2xP_l'(x) + l(l+1)P_l(x) = 0. \tag{A.15}$$

المعادلة التفاضلية (A.15) تُسمى معادلة ليجندر التفاضلية. حصولنا على الرتبة الثانية في المعادلة التفاضلية (A.15) ناتج عن الثمن الذي دفعناه لجعل المؤشرات كلها متساوية في حدود المعادلة. يمكن كتابة معادلة ليجندر على الشكل التالي

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)P_l'(x)\right] + l(l+1)P_l(x) = 0, \tag{A.16}$$

و الذي يبين بوضوح أن المعادلة التفاضلية ذاتية الترافق self-adjoint أو هيرمشية Hermitian و الذي يعني أنه عند شروط حدية معينة فإن مجموعة الحل لهذه المعادلة $\{P_l(x)\}_l$ عبارة عن دوال متعامدة. لإثبات ذلك نضرب

المعادلة (A.16) بـ $P_n(x)$ و نطرحها من نفس المعادلة (A.16) للمؤشر n مضروبة بـ $P_l(x)$، و نكامل في الفترة من -1 إلى $+1$ لنحصل على

$$\begin{aligned}&\int_{-1}^{+1}\left\{P_n(x)\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)P_l'(x)\right]+P_l(x)\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)P_n'(x)\right]\right\}dx\\ =\;&[n(n+1)-l(l+1)]\int_{-1}^{+1}P_l(x)P_n(x)dx.\end{aligned}$$

لو كاملنا الطرف الأيسر بالتجزيء فإنه يساوي صفر دائماً لأن $(1-x^2)_{x=\pm1}=0$ و بالتالي نجد أن الطرف الأيمن يُعْطي

$$[n(n+1)-l(l+1)]\int_{-1}^{+1}P_l(x)P_n(x)dx=0. \tag{A.17}$$

في حالة أن $n\neq l$ فإن

$$\int_{-1}^{+1}P_l(x)P_n(x)dx=0;\qquad n\neq l, \tag{A.18}$$

و الذي يؤكد التعامد. لتحديد قيمة التكامل عندما $n=l$، فإننا أولاً نربع الدالة المولدة (A.1) لنحصل على

$$[g(x,t)]^2=(1-2xt+t^2)^{-1}=\left[\sum_{l=0}^{\infty}P_l(x)t^l\right]^2=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n\sum_{m=0}^{\infty}P_m(x)t^m,$$

نكامل مربع الدالة المولدة في الفترة من -1 إلى $+1$ لنحصل على

$$\int_{-1}^{+1}\frac{dx}{1-2xt+t^2}=\sum_{n,m}t^{n+m}\int_{-1}^{+1}P_n(x)P_m(x)dx.$$

من علاقة التعامد (A.18) نستنتج أن الحدود و التي فيها $n\neq m$ تساوي صفر. فقط الحدود $n=m$ هي التي تبقى، إذاً

$$\int_{-1}^{+1}\frac{dx}{1-2xt+t^2}=\sum_{n}t^{2n}\int_{-1}^{+1}\left[P_n(x)\right]^2dx.$$

لكن التكامل في الطرف الأيسر يمكن أن يُحْسَب لنحصل على

$$\int_{-1}^{+1}\frac{dx}{1-2xt+t^2}=\frac{1}{2t}\int_{(1-t)^2}^{(1+t)^2}\frac{dy}{y}=\frac{1}{t}\ln\left(\frac{1+t}{1-t}\right)=2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{2n}}{2n+1},$$

حيث أن $\ln(1-t)$ و $\ln(1+t)$ حسبتا من تكامل المتسلسلة الهندسية المتقاربة بسبب $|t|<1$، كالتالي

$$\begin{aligned}\ln\left(\frac{1+t}{1-t}\right)&=\ln(1+t)-\ln(1-t)=\int_0^t\frac{du}{1+u}+\int_0^t\frac{du}{1-u},\\ &=\int_0^t du\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^nu^n+\int_0^t du\sum_{n=0}^{\infty}u^n,\\ &=[(-1)^n+1]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{n+1}}{n+1}=2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^{2n+1}}{2n+1}.\end{aligned}$$

بما أن متسلسلة القوى وحيدة، إذاً بمقارنة النتيجة أعلاه مع الطرف الأيمن، نستنتج أن

$$\int_{-1}^{+1}\left[P_n(x)\right]^2dx=\frac{2}{2n+1}. \tag{A.19}$$

يمكن التعميم من علاقة التعامد (A.18) و علاقة التكامل (A.19) لنحصل على العلاقة العيارية المتعامدة -or thonormality كالتالي

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2l+1}\delta_{nl}. \tag{A.20}$$

من علاقة التعامد أعلاه نستنتج تمام completeness مجموعة دوال ليجندر. لذلك أي دالة $f(x)$ معرفة على الفترة $x \in [-1,1]$ يمكن أن تكتب بدلالة دوال ليجندر، كما فعلنا في الباب الثالث.

A.2 دوال ليجندر المزاملة Associated Legendre functions

تُعَرّف دوال ليجندر المزاملة بالعلاقة التالية

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x), \tag{A.21}$$

لاحظ أن أكبر قوة لـ x في للدالة $P_l(x)$ هي x^l، لذلك يجب أن يكون $m \leq l$ و إلا دفع الإشتقاق في (A.21) الدالة $P_l(x)$ إلى الصفر. قد نستنتج من الوهلة الأولى من (A.21) أن قيمة m يجب ان تكون موجبة. لكن لو عوضنا عن $P_l(x)$ بإستخدام صيغة رودريجز (A.3) لحصلنا على

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l, \tag{A.22}$$

و التي نستنتج أن قيم m يمكن أن تكون سالبة و لكن يجب أن لا تقل عن $-l$. لهذا نستنتج أن

$$-l \leq m \leq l. \tag{A.23}$$

إن دوال ليجندر المزاملة حل للمعادلة التفاضلية الخطية العامة التالية

$$(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}P_l^m(x) - 2x\frac{d}{dx}P_l^m(x) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{(1-x^2)}\right]P_l^m(x) = 0, \tag{A.24}$$

أو ممكن أن تكتب كالتالي

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}P_l^m(x)\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{(1-x^2)}\right]P_l^m(x) = 0. \tag{A.25}$$

ترتبط $P_l^m(x)$ مع $P_l^{-m}(x)$ من خلال العلاقة

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(x). \tag{A.26}$$

من الواضح أنه عندما $m = 0$ فإن المعادلة التفاضلية المصاحبة (A.24) تكافيء المعادلة التفاضلية (A.15). وعليه فإن

$$P_l^0(x) = P_l(x).$$

من السهل أن نستنتج أن

$$\frac{d^m}{dx^m}P_l(x) \sim P_{l-m}(x),$$

منها يمكن تحديد علاقة التماثل parity relation لدالة ليجندر المزاملة مع إستخدام (A.8) و (A.21). حيث أننا نعلم أن المعامل $(1-x^2)$ في (A.21) زوجي و بالتالي مساهمة الإشارة تأتي من التفاضل. و عليه فإن $P_l^m(-x) \sim P_{l-m}(-x)$. من (A.8) نستنتج إذاً

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x). \tag{A.27}$$

إن مجموعة دوال ليجندر المزاملة متعامدة. في حالة تساوي المؤشر العلوي upper index، فإنها تتبع علاقة التعامد التالية

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(x) P_n^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{nl}, \tag{A.28}$$

و هي علاقة مُعَممة لعلاقة التعامد (A.20)، حيث تتساويان عندما $m = 0$. من الممكن أيضاً أن نشتق علاقة تعامد لدوال ليجندر المزاملة لها نفس المؤشر السفلي lower index لكن مختلفة في المؤشر العلوي upper index. حيث نجد أن

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(x) P_l^n(x) (1-x^2)^{-1} dx = \frac{(l+m)!}{m(l-m)!} \delta_{mn}. \tag{A.29}$$

لاحظ معامل الوزن المُضاف في علاقة التعامد $(1-x^2)^{-1}$ و السبب سيتضح لاحقاً لدى إعادة تمثيل دوال ليجندر المزاملة في الإحداثيات الكروية. حيث سنعتبر أن

$$x = \cos\theta, \tag{A.30}$$

و عليه تصبح جميع دوال ليجندر دوال لـ $\cos\theta$. أي أننا نحصل على $P_l(\cos\theta)$ أو $P_l^m(\cos\theta)$. حيث أن المشتقة بالنسبة لـ x يمكن أن تُحَول إلى مشتقة بالنسبة لـ θ بإستخدام قاعدة السلسلة chain rule، اي أن

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\theta}{dx}\frac{d}{d\theta} = \frac{-1}{\sqrt{1-x^2}}\frac{d}{d\theta} = \frac{-1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta},$$

لتصبح المعادلة (A.25) على الشكل

$$\frac{-1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin^2\theta \frac{-1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos\theta)\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right] P_l^m(\cos\theta) = 0.$$

بالتبسيط، نحصل على معادلة ليجندر المصاحبة بشكلها القطبي

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta \frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos\theta)\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right] P_l^m(\cos\theta) = 0. \tag{A.31}$$

بنفس الطريقة سنجد أن معادلات التعامد (A.28) و (A.29) تصبحان، على الترتيب، كالتالي

$$\int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta) P_n^m(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{nl}, \tag{A.32}$$

و

$$\int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta) P_l^n(\cos\theta) (\sin\theta)^{-1} d\theta = \frac{(l+m)!}{m(l-m)!} \delta_{mn}. \tag{A.33}$$

القاريء الخبير سيتنبه إلى حقيقة المعادلة (A.31) من إنها تمثل مؤثر لابلاس Laplace operator ∇^2 في الإحداثيات الكروية لو إعتبرنا أن المقدار $l(l+1)$ يمثل الجزء القطري من ∇^2 ، و مقدار m^2 يمثل الجزء الزاوي السمتي $-\partial^2/\partial\phi^2$.

A.3 التوافق الكروي Spherical harmonics

لو بدأنا من معادلة لابلاس Lapalce equation (أو حتى من معادلة هيلمهولتز) حيث يؤثر ∇^2 على دالة مُمَثلة بالإحداثيات الكروية $f(r,\theta,\phi)$، أي أن

$$\nabla^2 f(r,\theta,\phi) = 0.$$

في هذه الحالة نقول أن $f(r,\theta,\phi)$ هارمونية أو توافقية. بالإحداثيات القطبية الكروية فإن ∇^2 تُكتب كالتالي

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}, \tag{A.34}$$

و بالتالي تُصبْح معادلة لابلاس

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f(r,\theta,\phi)}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f(r,\theta,\phi)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f(r,\theta,\phi)}{\partial\phi^2} = 0.$$

من أجل الإبتعاد عن نقطة التفرد singularity point عند $r=0$ سنعتبر في معادلتنا أن المركز ليس ضمن نطاقها. لذلك يمكننا التخلص من المعامل $1/r^2$ في معادلتنا أعلاه. كذلك نستخدم تقنية فصل المتغيرات لكتابة الدالة $f(r,\theta,\phi)$ كالتالي

$$f(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \tag{A.35}$$

نعوض في معادلة لابلاس و نقسم بنفس الوقت على $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ لنحصل على

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) + \frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right) + \frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = 0.$$

الحد الأول و الذي يمثل الدالة القطرية radial function منفصل عى الحدود الزاوية (الحد الثاني و الثالث) لكن مجموعه معهم يساوي صفر. هذا يعني أن الحد القطري ثابت. سنختار القيمة الثابتة تساوي $l(l+1)$ حيث $l = 0, 1, 2, \ldots$، لسبب لايجهله القاريء لدى العودة إلى المعادلة (A.31). أي أن

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) = l(l+1),$$

لنحصل على

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right) + \frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + l(l+1) = 0. \tag{A.36}$$

لو قارنا معادلة (A.36) مع المعادلة التفاضلية (A.31)، سنجد أن

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -m^2, \tag{A.37}$$

حيث أن: $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$. حل المعادلة التفاضلية (A.37) يعطي الموجة المستوية $e^{\pm im\phi}$. لكن قيم m تتراوح بين القيم السالبة و القيم الموجبة. و عليه فإن حلاً واحداً سيكون كافياً لتمثيل جميع مجموعة الدوال المُعْتَمدة على زاوية السمت azimuthal functions، أي أن

$$\Phi_m(\phi) = Ne^{im\phi},$$

حيث N ثابت يُحدد من المعايرة. هذه المجموعة متعامدة لأن المعادلة التفاضلية (A.37) ذاتية الترافق self-adjoint أو هيرميشية. إذاً من المعايرة نجد أن

$$1 = \int_0^{2\pi} |\Phi_m(\phi)|^2 d\phi = |N|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = |N|^2(2\pi) \quad \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

ليصبح حل الجزء السمتي azimuthal part بشكله المعاير

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \tag{A.38}$$

يمكننا إثبات التعامد للحل (A.38) بإجراء التكامل للحل عند القيمتين m و m' بحيث أن $m \neq m'$ لنحصل على

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*_{m'}(\phi)\Phi_m(\phi)d\phi = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi}d\phi = \frac{e^{2\pi i(m-m')}-1}{2\pi i(m-m')}.$$

لاحظ أن $m - m' \neq 0$ عدد صحيح، و بالتالي فإن $e^{2\pi i(m-m')} = 1$ دائماً. و عليه نحصل على

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*_{m'}(\phi)\Phi_m(\phi)d\phi = 0; \qquad m \neq m'.$$

يمكن أن نعمم إذاً و نكتب علاقة التعامد العيارية للحل (A.38) بإستخدام دالة كرونكر Kronecker delta كالتالي

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*_{m'}(\phi)\Phi_m(\phi)d\phi = \delta_{m'm}. \tag{A.39}$$

هذا يعني أي دالة معرفة على الفترة $[0, 2\pi]$ يمكن أن تُكتب بدلالة مجموعة الحل التام (A.38).

نعود الآن إلى المعادلة التفاضلية (A.36)، نعوض عن الجزء السمتي فيها بإستخدام (A.37) لنصل إلى

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta) = 0. \tag{A.40}$$

من الواضح أن المعادلة التفاضلية (A.40) تُطابق المعادلة التفاضلية (A.31). الحل المعتمد على الزاوية القطبية polar angle $\Theta(\theta)$ ليس سوى دالة ليجندر المزاملة $P_l^m(\cos\theta)$ و التي تُعْطى من علاقة رودريجز (A.22). إذاً نكتب

$$\Theta_{lm}(\theta) = NP_l^m(\cos\theta).$$

مرة أخرى، N هنا ثابت المعايرة يمكن تحديده مباشرة من علاقة التعامد العيارية (A.32)، لنحصل على الحل الكامل و المعاير للمعادلة (A.40)

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta). \tag{A.41}$$

من الواضح أيضاً أن مجموعة الدوال $\{\Theta_{lm}(\theta)\}_{lm}$ مجموعة تامة أو كاملة complete set of orthonormal functions، لذلك أي دالة معرفة على الفترة $[0, 2\pi]$ يمكن أن تُكتب بدلالة مجموعة الدوال $\{\Theta_{lm}(\theta)\}_{lm}$.

إلى الآن نحن أثبتنا أن مجموعة الدوال $\{\Phi_m(\phi)\}_m$ عيارية متعامدة orthonormal بالنسبة لزاوية السمت azimuthal angle ϕ، بالمقابل فإن مجموعة الدوال $\{\Theta_{lm}(\theta)\}_{lm}$ أيضاً عيارية متعامدة بالنسبة للزاوية القطبية

العمودية zenithual polar angel θ. لو أخذنا حاصل ضرب الدالتين $\Phi_m(\phi)$ بـ $\Theta_{lm}(\theta)$ فإننا نصل إلى مايسمى الدالة التوافقية الكروية spherical harmonics $Y_{lm}(\theta,\phi)$ بحيث أن

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi), \tag{A.42}$$

أو بشكل أساسي

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{A.43}$$

و الذي يعطينا مجموعة دوال تعتمد على زاويتين و على مؤشرين و تكون عيارية متعامدة خلال السطح الكروي.

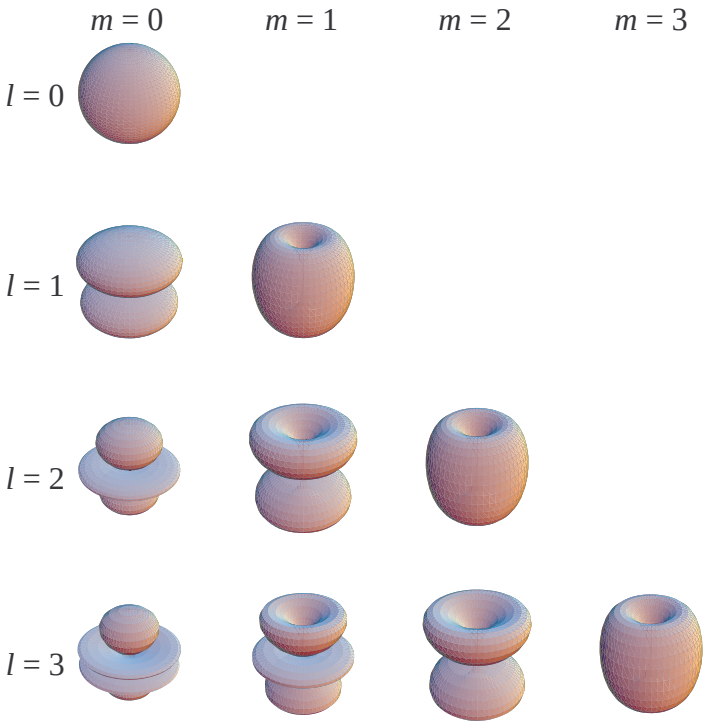
هنا نؤكد مرة أخرى أن: $l = 0, 1, 2, \ldots$ بينما تتراوح $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$. المُعامل المُضاف $(-1)^m$ يسمى طور كوندون-شورتلي Condon-Shortley phase، هذا الطور قانوني بسبب خطية معادلة لابلاس. أهميته ستظهر لدى دراستنا للعزوم الزاوية، حيث سيسهل علينا الصيغ الرياضية لدى قيامنا بإشتقاق تمثيلات رياضية للمؤثرات الدرجية الخاصة بالعزوم. إن تسمية $Y_{lm}(\theta,\phi)$ بالدالة التوافقية الكروية spherical harmonics يعود إلى أنها مُعَرّفة على سطح كرة بزاوية قطبية عمودية θ و زاوية سمتية ϕ ، لذلك عُرِفَت بأنها كروية، و هي تتبع معادلة لابلاس، وكل دالة تتبع معادلة لابلاس تسمى توافقية أو هارمونية harmonic. في الجدول (A.2) أوائل الرتب لتمثيلات التوافقية الكروية عند قيم مختلفة لـ l و m. بينما الشكل (A.2) يوضح الأشكال الهندسية للقيمة المطلقة لدوال التوافق الكروية.

جدول (A.2): أوائل الرتب لدوال التوافق الكروي، $Y_{lm}(\theta,\phi)$.

$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
$Y_{11}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}$
$Y_{1,-1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\phi}$
$Y_{20}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$
$Y_{21}(\theta,\phi) = -3\sqrt{\frac{5}{24\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi}$
$Y_{22}(\theta,\phi) = 3\sqrt{\frac{5}{96\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}$

مجموعة الدوال التوافقية هي حل لمعادلة ليجندر التفاضلية المزاملة بشكلها الزاوي القطبي و السمتي، و التي تُعْطى بـ

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)Y_{lm}(\theta,\phi) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}Y_{lm}(\theta,\phi) + l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi) = 0. \tag{A.44}$$



شكل (A.2): الأشكال الهندسية للقيمة المطلقة لدوال التوافق الكروية spherical harmonics $|Y_{lm}(\theta,\phi)|$ لقيم $l = 0,1,2,3$ و $0 \leq m \leq l$. محور z إلى أعلى الصفحة.

هذه المعادلة التفاضلية ذاتية الترافق أو هيرميشية، كما ذكرنا آنفاً، نقول إذاً أن مجموعة الدوال التوافقية دوال عيارية متعامدة تتبع علاقة التعامد

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l'm'}(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{A.45}$$

كذلك هي دوال كاملة تتبع علاقة الكمالية أو علاقة التمام التالية

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(\theta',\phi')Y_{lm}(\theta,\phi) = \delta(\cos\theta'-\cos\theta)\delta(\phi'-\phi). \tag{A.46}$$

لاحظ أنه من خصائص دالة ديراك يمكن أن نثبت

$$\delta(\cos\theta'-\cos\theta) = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta'-\theta),$$

حيث أن دالة ديراك معرفة داخل التكامل و تكاملها يعطي الوحدة. لو أخذنا الدالة $\delta(x-x')$ و كاملنا على الفضاء بالنسبة لـ x فإن هذا يساوي التكامل فيما لة أخذنا $x=\cos\theta$ بالنسبة لـ $\sin\theta d\theta$.

A.4 دوال بِسل من النوع الأول Bessel functions of the 1st kind

تُعتبر من الدوال الهامة في الفيزياء و تظهر كثيراً في المسائل التي تتضمن حل معادلة لابلاس أو معادلة هولمهولتز في الإحداثيات الإسطوانية. لنبدأ من الدالة المولدة و التي تُعَرف كالتالي

$$g(x,t) = e^{(x/2)(t-1/t)} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(x)t^n, \tag{A.47}$$

حيث تُعْرف معاملات t^n بدوال بسل من النوع الأول Bessel functions of the first kind لقيم صحيحة من n. لو قمنا بإيجاد مفكوك الأس في الدالة المولدة (A.47) و من ثم أوجدنا مفكوك ماكلورين لحاصل ضرب أساسين لحصلنا على

$$e^{xt/2}\cdot e^{-x/2t} = \sum_{r=0}^{\infty}\left(\frac{x}{2}\right)^r\frac{t^r}{r!}\sum_{s=0}^{\infty}(-1)^s\left(\frac{x}{2}\right)^s\frac{t^{-s}}{s!}.$$

عند قيمة ما لـ s نحصل على t^n، حيث أن $n\geq 0$، من عند $r=n+s$ نحصل على

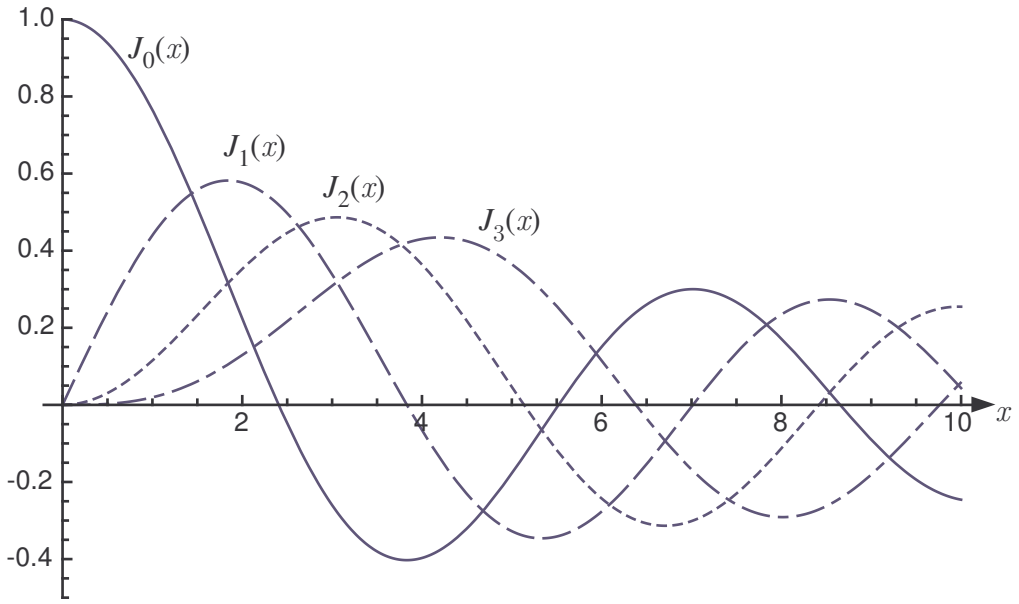
$$\left(\frac{x}{2}\right)^{n+s}\frac{t^{n+s}}{(n+s)!}(-1)^s\left(\frac{x}{2}\right)^s\frac{t^{-s}}{s!},$$

لتصبح معاملات t^n و التي يمثل دوال بسل كالتالي

$$J_n(x) = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-1)^s}{s!(n+s)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{n+2s}. \tag{A.48}$$

معادلة (A.48) صالحة أيضاً في حالة $n<0$، فقط بتبديل n بـ $-n$ نحصل على

$$J_{-n}(x) = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-1)^s}{s!(s-n)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2s-n},$$



شكل (A.3): دوال بسل من النوع الأول Bessl functions of the 1st kind حتى الرتبة الثالثة.

في المتسلسلة أعلاه واضح أنه في المقام المقدار $(s-n)! \to \infty$ عندما تكون قيم $s-n<0$، أي عندما: $s=0,1,\ldots(n-1)$. لذلك فإن هذه المتسلسلة لها حدود غير صفرية عندما تبدأ $s=n$. لهذا يمكننا إستبدال المؤشر s بـ $s+n$ لنحصل على

$$J_{-n}(x)=\sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-1)^{s+n}}{s!(s+n)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2s+n}. \tag{A.49}$$

لدى مقارنة (A.49) مع (A.48) نستنتج مباشرة أن $J_{-n}(x)$ و $J_n(x)$ عند قيم صحيحة من n ترتبطان من خلال علاقة التماثل التالية

$$J_{-n}(x)=(-1)^n J_n(x). \tag{A.50}$$

شكل (A.3) يوضح دوال بسل عند عدة قيم من n. يتضح من الشكل أن دوال بسل تتذبذب لكنها غير دورية إلا عندما $x\to\infty$. كذلك سعة $J_n(x)$ ليست ثابتة، بل تنخفض تقاربياً كـ $x^{-1/2}$.

كما فعلنا تماماً مع دوال ليجندر، لو قمنا بإشتقاق الدالة المولدة بالنسبة لـ t و بالتعويض عن الأسس بإستخدام الدالة المولدة (A.47) و مساوة المعاملات عند نفس مقدار القوة لـ t، نحصل على

$$J_{n-1}(x)+J_{n+1}(x)=\frac{2n}{x}J_n(x), \tag{A.51}$$

و التي تُعْطي علاقة تكرارية لثلاث رتب متتابعة من دوال بسل. بنفس الطريقة السابقة لو قمنا بالإشتقاق بالنسبة لـ x نحصل على العلاقة التكرارية التالية

$$J_{n-1}(x)-J_{n+1}(x)=2J_n'(x), \tag{A.52}$$

مع وجود حالة خاصة للعلاقة التكرارية أعلاه عند $n=0$، ألا و هي

$$-J_1(x)=J_0'(x). \tag{A.53}$$

لو جمعنا المعادلتين (A.51) و (A.52) و قسمنا على 2 نحصل على

$$J_{n-1}(x) = \frac{n}{x} J_n(x) + J'_n(x). \tag{A.54}$$

لو ضربنا الطرفين في المعادلة (A.54) بـ x^n لحصلنا في الطرف الأيمن على مجموع ناتج عن مشتقة دالتين لذلك ننتهي إلى

$$\frac{d}{dx}\left[x^n J_n(x)\right] = x^n J_{n-1}(x). \tag{A.55}$$

الآن لو طرحنا (A.52) من (A.51) و قسمنا الناتج على 2 نحصل على

$$J_{n+1}(x) = \frac{n}{x} J_n(x) - J'_n(x). \tag{A.56}$$

لو ضربنا الطرفين في المعادلة (A.56) بـ x^{-n} لحصلنا في الطرف الأيمن على مجموع ناتج عن مشتقة دالتين لننتهي إلى

$$\frac{d}{dx}\left[x^{-n} J_n(x)\right] = -x^{-n} J_{n+1}(x). \tag{A.57}$$

لنأخذ دالة $Z_\nu(x)$ تحقق العلاقات التكرارية الأساسية (A.51) و (A.52) و تبعاتها من العلاقات، لكن ν ليست بالضرورة عدد صحيح و $Z_\nu(x)$ لاتُعْطى بالضرورة من المتسلسلة (A.48). العلاقة (A.54) يمكن أن تكتب، بأخذ $n \to \nu$ و بالضرب بـ x، كالتالي

$$xZ'_\nu(x) + \nu Z_\nu(x) - xZ_{\nu-1}(x) = 0. \tag{A.58}$$

لو قمنا بإشتقاق العلاقة (A.58) بالنسبة لـ x، و من ثم نضرب الناتج بـ x، و نطرح من الناتج العلاقة (A.58) مضروبة بـ ν نحصل على المعادلة

$$x^2 Z''_\nu + xZ'_\nu - \nu^2 Z_\nu + (\nu - 1)xZ_{\nu-1} - x^2 Z'_{\nu-1} = 0.$$

في العلاقة (A.56) لو أبدلنا n بـ $\nu - 1$ و فصلنا الحدود التي تحوي على المؤشر $\nu - 1$ في الطرف الأيسر و الحد الذي يحوي على المؤشر ν في الطرف الأيمن و التعويض في العلاقة أعلاه، لأمكن التخلص من $Z_{\nu-1}$ و $Z'_{\nu-1}$، لنحصل في النهاية على

$$x^2 Z''_\nu(x) + xZ'_\nu(x) + (x^2 - \nu^2)Z_\nu(x) = 0, \tag{A.59}$$

و هي معادلة بسل التفاضلية العادية Bessel ordinary differential equation. إذاً عموماً أي دالة $Z_\nu(x)$ تحقق العلاقات التكرارية (A.51) إلى (A.57) ستحقق معادلة بسل التفاضلية و تصبح هي نفسها دوال بسل. لكن على الأخص الدوال $J_n(x)$، و المعرفة عن طريق الدالة المولدة (A.47) تحقق معادلة بسل. لو ضربنا المعادلة التفاضلية (A.59) بـ $2Z'_\nu$ و جمعنا و طرحنا $2xZ_\nu^2$ سنحصل على صيغة غير خطية لمعادلة بسل

$$\frac{d}{dx}\left[x^2 (Z'_\nu)^2 + (x^2 - \nu^2)Z_\nu^2\right] - 2xZ_\nu^2 = 0, \tag{A.60}$$

و التي تفيد لاحقاً في الحصول على علاقة المعايرة لدوال بسل.

لو ضربنا طرفي صيغة الدالة المولدة (A.47) بـ t^{-m-1}، حيث m عدد صحيح، ونكامل الطرفين بالنسبة لـ t على مسار محيط (كنتور) C contour integral و المعرّف كدائرة تنغلق على النقطة $t = 0$، لنحصل على

$$\oint_C \frac{e^{(x/2)(t-1/t)}}{t^{m+1}} dt = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(x) \oint_C t^{n-m-1} dt. \tag{A.61}$$

من التحليل المركب، التكامل في الطرف الأيمن من (A.61) يساوي صفر لو كانت $n \neq m$ (أو بالأحرى $m-1 \neq -1$ $-n$)، وتساوي $2\pi i$ لو كانت $n = m$. وعليه تصبح (A.61) على الصيغة

$$\oint_C \frac{e^{(x/2)(t-1/t)}}{t^{m+1}} dt = 2\pi i J_m(x). \tag{A.62}$$

يمكن تكامل الطرف الايسر الآن من (A.62) باخذ المعادلة الوسيطية parametric equation التالية $t = e^{i\theta}$ و بالتالي $dt = ie^{i\theta} d\theta$، ليصبح تكامل الكنتور C على الصيغة $\oint_C dt = \int_0^{2\pi} d\theta$ وعليه يصبح (A.62)

$$\int_0^{2\pi} \frac{e^{ix\sin\theta}}{e^{i(m+1)\theta}} ie^{i\theta} d\theta = \int_0^{2\pi} e^{i(x\sin\theta - m\theta)} i d\theta = 2\pi i J_m(x). \tag{A.63}$$

بأخذ القيمة التخيلية للطرفين في (A.63)، فإننا نكتب

$$J_m(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(x\sin\theta - m\theta)} d\theta. \tag{A.64}$$

نستنتج من (A.64) التالي

$$J_m(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\cos(x\sin\theta - m\theta) + i\sin(x\sin\theta - m\theta)\right] d\theta. \tag{A.65}$$

بما أن المتغير x حقيقي، فإن الجزء التخيلي في الطرف الايمن يجب أن يتلاشى، أي

$$\int_0^{2\pi} \sin(x\sin\theta - m\theta) d\theta = 0. \tag{A.66}$$

وعليه تصبح (A.65) على الصيغة

$$J_m(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(x\sin\theta - m\theta) d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(x\sin\theta - m\theta) d\theta. \tag{A.67}$$

هندسياً، فإن التكاملات التالية متكافئة

$$\int_0^{2\pi} \cos(x\sin\theta - m\theta) d\theta = \int_0^{2\pi} \cos(x\cos\theta - m\theta) d\theta, \tag{A.68}$$

و

$$\int_0^{2\pi} \sin(x\sin\theta - m\theta) d\theta = \int_0^{2\pi} \sin(x\cos\theta - m\theta) d\theta = 0. \tag{A.69}$$

بناء عليه يمكن أن نكتب (A.65) لتصبح

$$J_m(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\cos(x\cos\theta - m\theta) + i\sin(x\cos\theta - m\theta)\right] d\theta,$$

أو

$$J_m(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(x\cos\theta - m\theta)} d\theta. \tag{A.70}$$

هذا يسمى التمثيل التكاملي لدوال بسل integral representation of Bessel functions وله تطبيقات هامة لحل العديد من التكاملات في المسائل الفيزيائية.

بسبب طبيعة الإعتماد الهندسي لدوال بسل على الإحداثيات الإسطوانية، فإنه من المناسب أن نأخذ متغير الدوال $k\rho$ بدلاً عن x، حيث ρ يمثل المتغير القطري للإسطوانة. المعادلة (A.59) تصبح في هذه الحالة

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} Z_\nu(k\rho) + \rho \frac{d}{d\rho} Z_\nu(k\rho) + (k^2\rho^2 - \nu^2) Z_\nu(k\rho) = 0. \tag{A.71}$$

لو عرفنا دوال بسل $J_\nu(k\rho)$ على الأبعاد الإسطوانية، لنقل أسطوانة قطرها a، بحيث أن متغير قطر الإسطوانة يأخذ القيم من $\rho = 0$ إلى $\rho = a$، بشرط أن الدوال $J_\nu(k\rho)$ تستوفي الشروط الحدية و هي أن $J_\nu(0)$ متناهية و $J_\nu(ka) = 0$. الشرط الأول متحقق دائماً لدوال بسل من النوع الأول، بينما الشرط الثاني يتحقق إذا كانت $k = \alpha_{\nu n}/a$، حيث أن $\{\alpha_{\nu n}\}_{n=1}^{\infty}$ مجموعة أصفار (أو جذور) دالة بسل من الرتبة ν. الجدول (A.3) يعطي أصفار دوال بسل للرتب الصحيحة و أصفار المشتقة الأولى لبعض الرتب أيضاً. معادلة بسل (A.71) يمكن أن تكتب بالشكل

$$\rho \frac{d^2}{d\rho^2} J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) + \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) + \left[\alpha_{\nu n}^2 \frac{\rho}{a^2} - \frac{\nu^2}{\rho}\right] J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) = 0. \tag{A.72}$$

معادلة بسل (A.72) ذاتية الترافق self adjoint مما يعني أن مجموعة الدوال $J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\rho/a\right)$ متعامدة. للوصول إلى علاقة التعامد نستبدل معامل الجذر $\alpha_{\nu n}$ بـ $\alpha_{\nu m}$ في العلاقة (A.72) لنجد أن الدوال $J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\rho/a\right)$ تحقق العلاقة

$$\rho \frac{d^2}{d\rho^2} J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) + \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) + \left[\alpha_{\nu m}^2 \frac{\rho}{a^2} - \frac{\nu^2}{\rho}\right] J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) = 0. \tag{A.73}$$

بضرب المعادلة (A.72) بـ $J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\rho/a\right)$ و المعادلة (A.73) بـ $J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\rho/a\right)$ و الطرح، و تكامل ناتج الطرح من $\rho = 0$ إلى $\rho = a$ نحصل على

$$\begin{aligned}\int_0^a J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) \frac{d}{d\rho}\left[\rho \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right)\right] d\rho - \int_0^a J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) \frac{d}{d\rho}\left[\rho \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right)\right] d\rho \\ = \frac{\alpha_{\nu n}^2 - \alpha_{\nu m}^2}{a^2} \int_0^a J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) \rho d\rho.\end{aligned} \tag{A.74}$$

بإجراء التكامل بالتجزيء يصبح الطرف الايسر من المعادلة (A.74) كالتالي

$$\text{LHS} = \rho J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right)\Bigg|_0^a - \rho J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right)\Bigg|_0^a. \tag{A.75}$$

عندما $\nu \geq 0$ فإن المعامل ρ يضمن صفرية معادلة الطرف الأيسر (A.75) في حالة $\rho = 0$. في الواقع هذا يتحقق أيضاً عندما $\nu \geq -1$ حسب علاقة التماثل (A.50). في حالة $\rho = a$ فإن معادلة الطرف الأيسر (A.75) تساوي الصفر بسبب $J_\nu(\alpha_{\nu n}) = J_\nu(\alpha_{\nu m}) = 0$، حيث $\alpha_{\nu n}$ و $\alpha_{\nu m}$ تمثلان الصفر رقم n و الصفر رقم m لدالة بسل من الرتبة ν، على الترتيب. بهذا الإختيار من المعاملات فإن معادلة الطرف الأيسر (A.75) تساوي صفر. وبالتالي الطرف الأيمن في المعادلة (A.74) يساوي صفر

$$\frac{\alpha_{\nu n}^2 - \alpha_{\nu m}^2}{a^2} \int_0^a J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) \rho d\rho = 0,$$

وفي حالة $n \neq m$ نحصل على علاقة التعامد على الفترة $\rho \in [0, a]$ بالصيغة

$$\int_0^a J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) \rho d\rho = 0; \qquad n \neq m. \tag{A.76}$$

أما في حالة أن $n = m$ فإننا نعتبر هذه المساواة عبارة عن $\alpha_{\nu m} = \alpha_{\nu n} + \epsilon$، ثم نقوم بإيجاد مفكوك دوال بسل حول ϵ في معادلة الطرف الأيسر (A.75) حسب الصيغة

$$f(x+\epsilon) = f(x) + \epsilon f'(x) + \frac{\epsilon^2}{2!} f''(x) + \frac{\epsilon^3}{3!} f^{(3)}(x) + \cdots ,$$

ومن ثم نأخذ النهاية عندما $\epsilon \to 0$ و بتطبيق العلاقة التكرارية (A.56) نحصل على علاقة المعايرة

$$\int_0^a \left[J_\nu \left(\alpha_{\nu n} \frac{\rho}{a} \right) \right]^2 \rho d\rho = \frac{a^2}{2} \left[J_{\nu+1} \left(\alpha_{\nu n} \right) \right]^2 . \tag{A.77}$$

هذه العلاقة يمكن الحصول عليها بطريقة أخرى بإستخدام معادلة بسل غيرالخطية (A.60)، بأخذ $Z_\nu \to J_\nu$ و $x \to \alpha_{\nu n}\rho/a$ و إجراء التكامل من $\rho = 0$ إلى $\rho = a$، مع إستخدام العلاقة التكرارية (A.56) و حقيقة أن $\nu J_\nu(0) = 0$ دائماً لأي قيمة لـ ν، نستنتج علاقة المعايرة (A.77) مباشرةً.

في حالة أن $a \to \infty$ فإن القيم الممكنة المتقطعة لجذور دوال بسل $\alpha_{\nu n} \sim \alpha$ أي تؤول إلى قيم كثيرة جداً وبالتالي تظهر كأنها مستمرة لكن النسبة $\alpha_{\nu n}/a \sim \alpha/a \to k$ متناهية بحيث أن علاقة التعامد (A.76) ستؤول إلى معادلة الإنغلاق closure equation التالية

$$\int_0^\infty J_\nu(k\rho) J_\nu(k'\rho) \rho d\rho = \frac{1}{k}\delta(k-k'); \qquad \nu > -\frac{1}{2}, \tag{A.78}$$

و التي تفيد في معالجة الأنظمة المحصورة في إحداثيات إسطوانية غير نهائية أو الإنظمة المعرفة على الفضاء.

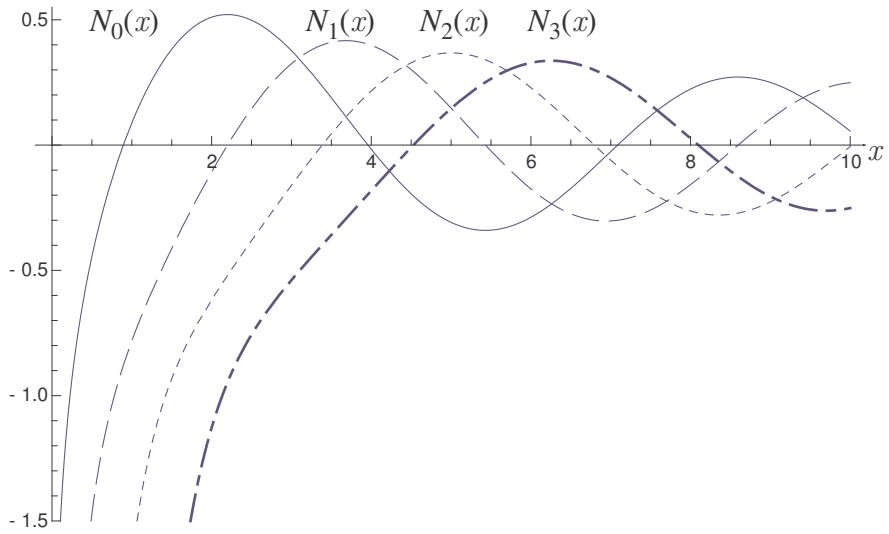
جدول (A.3): أصفار (جذور) دوال بسل zeros of Bessel functions و مشتقتهم الأولى. أصفار J_0' تحسب من العلاقة (A.53).

Number of zeros	$J_0(x)$	$J_1(x)$	$J_2(x)$	$J_3(x)$	$J_4(x)$	$J_5(x)$
1	2.4048	3.8317	5.1356	6.3802	7.5883	8.7715
2	5.5201	7.0156	8.4172	9.7610	11.0647	12.3386
3	8.6537	10.1735	11.6198	13.0152	14.3725	15.7002
4	11.7915	13.3237	14.7960	16.2235	17.6160	18.9801
5	14.9309	16.4706	17.9598	19.4094	20.8269	22.2178
	$J_0'(x)$	$J_1'(x)$	$J_2'(x)$	$J_3'(x)$		
1	3.8317	1.8412	3.0542	4.2012		
2	7.0156	5.3314	6.7061	8.0152		
3	10.1735	8.5363	9.9695	11.3459		

إن معادلة بسل (A.59) لها حلين مستقلين خطياً، أحدهما هو $J_\nu(x)$. الحل الآخر لايظهر في حل متسلسلات القوى بإستخدام طريقة فوربينيوس Frobenius method (في حالة أن ν صحيحة) لكن يمكن إيجاده بطريقة الرونسكين Wornskian (على أساس الإستقلال الخطي)[1] لنجد أن الحل الثاني $N_\nu(x)$ يمكن أن يعرف كالتالي

$$N_\nu(x) = \frac{\cos\nu\pi J_\nu(x) - J_{-\nu(x)}}{\sin\nu\pi}. \tag{A.79}$$

[1] أنظر إلى المرجع: [1] صفحة 699.



شكل (A.4): دوال نويمان Neumann functions حتى الرتبة الثالثة.

يطلق على هذا الحل بدوال نويمان Neumann functions. لقيم ν غير صحيحة فإن $N_\nu(x)$ تحقق معادلة بسل (A.59) على أساس أنها مجموع خطي للحلول $J_\nu(x)$ و $J_{-\nu}(x)$. في حالة أن ν عدد صحيح n و بإستخدام علاقة التماثل (A.50) و على أساس أن $\cos n\pi = (-1)^n$ و $\sin n\pi = 0$، فإن التعريف (A.79) سيعطي $\frac{0}{0}$ إذا عوضنا مباشرة بـ $\nu = n$، لهذا نطبق قاعدة لوبيتال L'Hôpital's rule لنكتب

$$\begin{aligned} N_n(x) = \lim_{\nu\to n} N_\nu(x) &= \frac{\frac{\partial}{\partial\nu}\left[\cos\nu\pi J_\nu(x) - J_{-\nu(x)}\right]_{\nu=n}}{\frac{\partial}{\partial\nu}\sin\nu\pi|_{\nu=n}}, \\ &= \frac{1}{\pi}\left[\left.\frac{\partial J_\nu(x)}{\partial\nu}\right|_{\nu=n} - (-1)^n \left.\frac{\partial J_{-\nu}(x)}{\partial\nu}\right|_{\nu=n}\right], \end{aligned} \tag{A.80}$$

و الذي يُعْطي تعريف دوال نويمان عند الرتب الحقيقية. لإثبات أن التعريف (A.80) يحقق معادلة بسل (A.59) نعوض في معادلة بسل بـ $J_\nu(x)$ و $J_{-\nu}(x)$ لنحصل على المعادلتين

$$x^2 J''_{\pm\nu}(x) + xJ'_{\pm\nu}(x) + (x^2 - \nu^2)J_{\pm\nu}(x) = 0. \tag{A.81}$$

بإشتقاق كلا المعادلتين بالنسبة لـ ν و ضرب المعادلة التي تحوي على الرتبة $-\nu$ بـ $(-1)^n$ و طرحها من المعادلة التي تحوي على الرتبة ν، و أخذ النهاية عندما $\nu \to n$، نحصل على

$$x^2\frac{d^2}{dx^2}N_n + x\frac{d}{dx}N_n + (x^2 - n^2)N_n = \frac{2n}{\pi}\left[J_n - (-1)^n J_{-n}\right], \tag{A.82}$$

حيث إستخدمنا التعريف (A.80) لتعريف N_n. الطرف الأيمن من العلاقة (A.82) يساوي دائماً صفر حسب علاقة التماثل (A.50)، مما يعني أن N_n هي حل معادلة بسل. الشكل (A.4) يُوضح شكل دوال نويمان حتى الرتبة الرابعة لاحظ كيف ان دوال نويمان تؤول إلى $-\infty$ عندما $x \to 0$.

إن الحل العام لمعادلة بسل (A.59) الخطية سيكون المجموع الخطي لـ $J_\nu(x)$ و $N_\nu(x)$. إن إختيار كلا الحلين أو إستبعاد أحدهما يعتمد بشكل أساسي على الشروط الحدية للنظام. إن شرط التناهي من عدمه عندما $x \to 0$ يلعب دوراً كبيراً في إختيار أحد الحلول. إذا كان الشرط هو تناهي الحل عند نقطة الأصل، فإن الحل $N_n(x)$ يُستبعد. إن التصرف التقربي asymptotic behavior لـ J_n يُمَثّل بدالة cos بينما لـ N_n يُمَثّل بدالة sin.

لقد ذكرنا سابقاً أن معادلة بسل (A.71) تظهر لدى حل معادلة هيلمهولتز Helmholtz equation

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0, \tag{A.83}$$

في الإحداثيات الإسطوانية. لاحظ أن معادلات شرودنجر في حالات عدم الإرتباط تؤول إلى معادلة هيلمهولتز (A.83). في حالات الإنتشار diffusion problem أو حالات الإرتباط لمعادلة شرودنجر، فإن معادلة هيلمهولتز تستبدل بـ

$$\nabla^2\psi - k^2\psi = 0, \tag{A.84}$$

و التي بدورها تُعْطي المعادلة القطرية في الإحداثيات الإسطوانية بالصيغة

$$\rho^2\frac{d^2}{d\rho^2}Z_\nu(k\rho) + \rho\frac{d}{d\rho}Z_\nu(k\rho) - (k^2\rho^2 + \nu^2)Z_\nu(k\rho) = 0. \tag{A.85}$$

إن الإنتقال من معادلة هيلمهولتز (A.83) إلى معادلة الإنتشار (A.84) يتم من خلال التحويل $k \to ik$، و بهذا تتحول معادلة بسل (A.71) إلى معادلة بالشكل (A.85). إن حل المعادلة (A.85) يصبح $Z_\nu(k\rho) \propto J_\nu(ik\rho)$. هذا الحل يسمى دوال بسل المعدلة modified Bessel functions و يرمز له بالرمز $I_\nu(k\rho)$.

نعرف إذاً دالة بسل المعدلة $I_\nu(x)$ كالتالي

$$I_\nu(x) \equiv i^{-\nu}J_\nu(ix). \tag{A.86}$$

المعامل $i^{-\nu}$ سيلغي i^ν من كل حد لتبقى الدالة $I_\nu(x)$ حقيقية. بتعويض العلاقة (A.86) في المتسلسلة (A.48) نحصل على

$$I_n(x) = i^{-n}J_n(ix) = i^{-n}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-1)^s}{s!(n+s)!}\left(\frac{ix}{2}\right)^{n+2s}.$$

هنا لا حظ أن $i^{2s+n} = i^{2s}i^n = (-1)^s i^n$ و بالتالي ننتهي إلى تمثيل المتسلسلات لـ $I_\nu(x)$ و $I_{-\nu}(x)$ لنحصل على

$$I_\nu(x) = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{s!(\nu+s)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{\nu+2s}; \qquad I_{-\nu}(x) = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{s!(s-\nu)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2s-\nu}. \tag{A.87}$$

يتضح مباشرة أن علاقة التماثل متكافئة لدوال بسل المعدلة، أي أنه إذا كانت ν صحيحة فإنه

$$I_n(x) = I_{-n}(x). \tag{A.88}$$

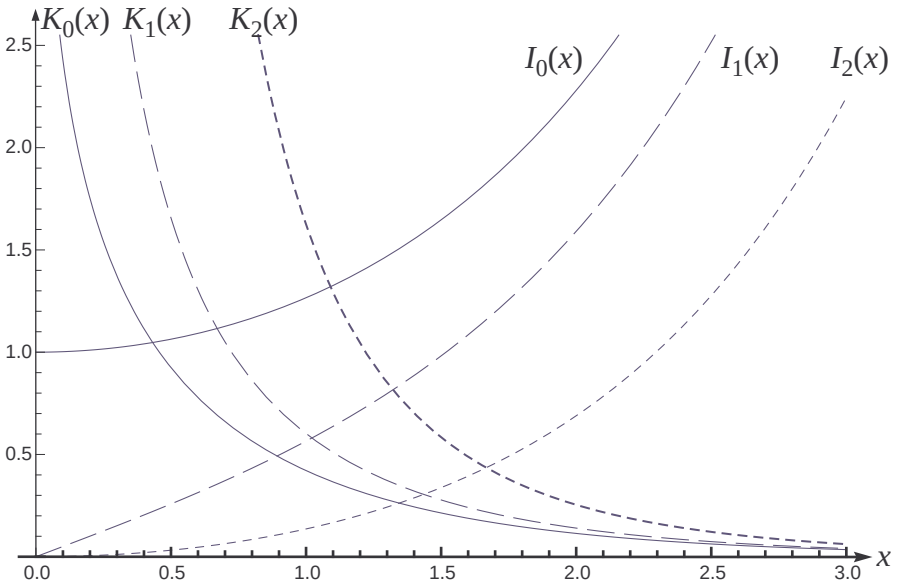
يمكننا الحصول على العلاقات التكرارية لدوال بسل المعدلة لو عوضنا بـ $J_\nu(x) = i^\nu I_\nu(-ix)$ في علاقات بسل التكرارية.

الحل الثاني لمعادلة بسل المعدلة (A.85) هو مجموعة الدوال $K_\nu(x)$ و التي تُعْطى كالتالي

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2}\frac{I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{\sin\nu\pi}. \tag{A.89}$$

يتضح مباشرة أن الحل الثاني يستوفي علاقة التماثل $K_\nu(x) = K_{-\nu}(x)$. الشكل (A.5) يعطي دوال بسل المعدلة حتى الرتبة الثانية.

إن الحل العام لمعادلة بسل المعدلة (A.85) الخطية سيكون المجموع الخطي لـ $I_\nu(x)$ و $K_\nu(x)$. مرة أخرى، إن إختيار كلا الحلين أو إستبعاد أحدهما يعتمد بشكل أساسي على الشروط الحدية للنظام. إن شرط التناهي من عدمه عندما $x \to 0$ يلعب دوراً كبيراً في إختيار أحد الحلول.



شكل (A.5): دوال بسل المعدلة modified Bessel functions حتى الرتبة الثانية.

A.5 دوال بسِل الكروية Spherical Bessel functions

لو قمنا بحل معادلة هيلمهولتز (A.83) في الإحداثيات الكروية، حيث نعوض عن ∇^2 بإستخدام العلاقة (A.34) و بإستخدام طريقة فصل المتغيرات للدالة $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ و بإعتبار أن الجزء الزاوي يحقق المعادلة (A.36) فإن الجزء القطري radial part من معادلة لابلاس يصبح

$$r^2\frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + \left[k^2r^2 - l(l+1)\right]R = 0. \tag{A.90}$$

إن الجزء الزاوي سيعطي بالتأكيد معادلة ليجندر، لذلك فإن ثابت الفصل $l(l+1)$ له قيم صحيحة و موجبة. المعادلة (A.90) تتميز بإنها ذاتية الترافق، لكنها ليست معادلة بسل. لكن لو عوضنا عن

$$R(kr) = \frac{Z(kr)}{(kr)^{1/2}},$$

فإن المعادلة القطرية (A.90) تصبح

$$r^2\frac{d^2Z}{dr^2} + r\frac{dZ}{dr} + \left[k^2r^2 - \left(l+\frac{1}{2}\right)^2\right]Z = 0, \tag{A.91}$$

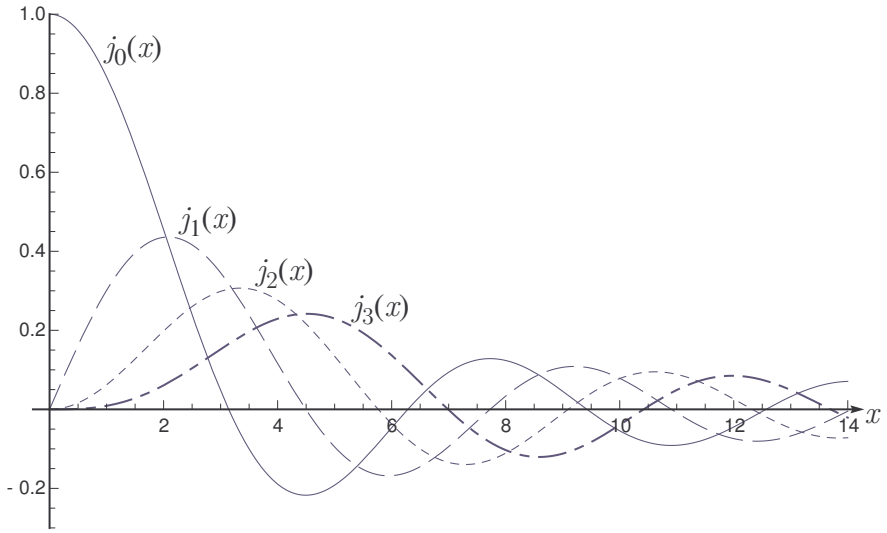
و هي نفسها معادلة بسل. إن Z هي دالة بسل من الرتبة $l+\frac{1}{2}$ حيث l هنا صحيحة. إن دوال الحل $Z_{l+\frac{1}{2}}(kr)$ تسمى دوال بسل الكروية.

تعرف دوال بسل الكروية كالتالي

$$j_n(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{n+1/2}(x), \tag{A.92}$$

و

$$n_n(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}}N_{n+1/2}(x) = (-1)^{n+1}\sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{-n-1/2}(x). \tag{A.93}$$



شكل (A.6): دوال بسل الكروية spherical Bessel functions حتى الرتبة الثالثة.

إن ربط الدوال $n_n(x)$ مباشرة بـ $J_{-n-1/2}(x)$ ممكناً لأن $\cos(n+\frac{1}{2})\pi = 0$ و $\sin(n+\frac{1}{2})\pi = (-1)^n$ في التعريف (A.79). الشكل (A.6) يعطي دوال بسل الكروية حتى الرتبة الثالثة، بينما الشكل (A.7) يعطي دوال نويمان الكروية حتى الرتبة الثالثة.

إن دوال بسل الكروية يمكن أن تكتب بصيغة المتسلسلات بإستخدام المتسلسلة (A.48) لـ J_n، مع تبديل n بـ $n+\frac{1}{2}$، لنحصل على

$$J_{n+1/2}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(s+n+\frac{1}{2})!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s+n+1/2}. \tag{A.94}$$

بإستخدام صيغة التضاعف لليجندر

$$z!(z+\frac{1}{2})! = 2^{-2z-1}\pi^{1/2}(2z+1)!, \tag{A.95}$$

يصبح تمثيل المتسلسلات لدالة بسل الكروية

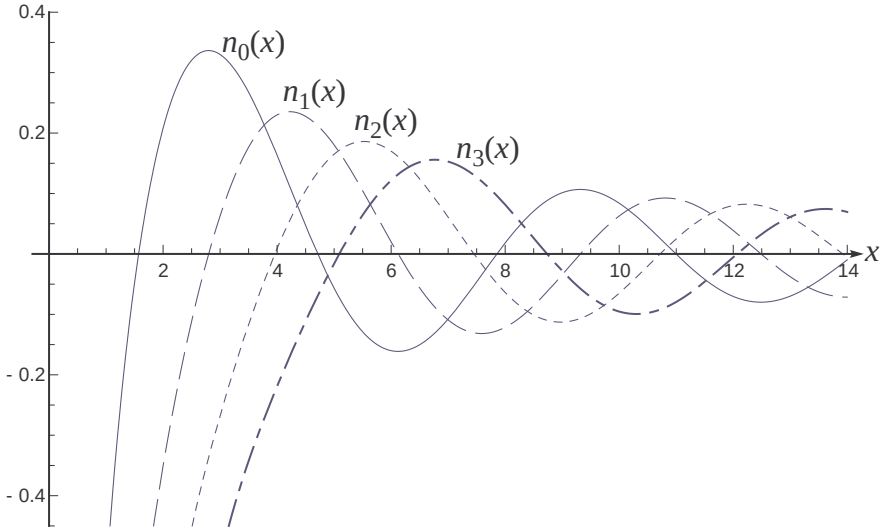
$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s 2^{2s+2n+1}(s+n)!}{\pi^{1/2} s!(2s+2n+1)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s+n+1/2},$$

و بعد إجراء الإختصارات نحصل على

$$j_n(x) = 2^n x^n \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+n)!}{s!(2s+2n+1)!} x^{2s}. \tag{A.96}$$

بنفس الطريقة يمكننا الحصول على صيغة متسلسلة قوى لدوال نويمان الكروية بإستبدال المؤشر n بالمؤشر $-m-1$في تعريف متسلسلة القوى (A.93) لنحصل على

$$n_{-m-1}(x) = (-1)^{-m} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{m+1/2}(x), \tag{A.97}$$



شكل (A.7): دوال نويمان الكروية spherical Neumann functions حتى الرتبة الثالثة.

و الذي يُعْطي في الطرف الأيمن نفس متسلسلة القوى لدوال بسل في (A.94) للمؤشر m. مرة أخرى نستخدم صيغة التضاعف لليجندر (A.95) و من ثم إرجاع المؤشر m إلى $-n-1$ مع حقيقة أن

$$\frac{(p-1)!}{(2p-1)!} = \frac{p!/p}{2p!/2p} = 2\frac{p!}{(2p)!},$$

لنحصل على

$$n_n(x) = \frac{(-1)^{n+1}}{2^n x^{n+1}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-n)!}{s!(2s-2n)!} x^{2s}. \tag{A.98}$$

المتسلسلتان في (A.96) و (A.98) لهما أهمية في حساب الدوال الكروية في ثلاث حالات: أول حالة إيجاد صيغة مغلقة closed form عند الرتب الصفرية $n = 0$. نتيجة لهذا نجد، أن دوال بسل و نويمان الكروية ترتبطان بشكل وثيق بالدوال المثلثية sin و cos. الحالة الثانية إيجاد القيم الحدية التقريبية ($\approx$) لدوال بسل الكروية عندما $x \to 0$ (أو $x \ll 1$). و الحالة الثالثة إيجاد القيم الحدية التقاربية ($\sim$) لدوال بسل الكروية عندما $x \gg 1$.

عند الحالة الخاصة $n = 0$ نجد من المتسلسلة (A.96) أن

$$j_0(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(2s+1)!} x^{2s} = \frac{1}{x} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(2s+1)!} x^{2s+1} = \frac{\sin x}{x}. \tag{A.99}$$

بنفس الطريقة نجد من المتسلسلة (A.98) عند $n = 0$ أن

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}. \tag{A.100}$$

عند الحد التقريبي $x \ll 1$ فإن المتسلسلتين في (A.96) و (A.98) يمكن أن تقتطعا إلى الحد $s = 0$ لأن الحدود التي يكون فيها $s > 0$ تصبح صغيرة جداً في هذه الحالة، لنحصل من (A.96) على

$$j_n(x) \approx \frac{2^n n!}{(2n+1)!} x^n = \frac{x^n}{(2n+1)!!}, \tag{A.101}$$

و من (A.98) نحصل على

$$n_n(x) \approx \frac{(-1)^{n+1}(-n)!}{2^n(-2n)!}x^{-n-1} = -\frac{(2n)!}{2^n n!}x^{-n-1} = -(2n-1)!!x^{-n-1}. \tag{A.102}$$

في الأعلى إستخدمنا علاقات المضروب المزدوج التالية

$$(2n)!! = \underbrace{(2n)(2n-2)\cdots 6\cdot 4\cdot 2}_{n\text{times}} = 2^n n(n-1)\cdots 3\cdot 2\cdot 1 = 2^n n!, \tag{A.103}$$

و منها يمكن أن نثبت العلاقات التالية

$$(2n)! = (2n)(2n-1)(2n-2)\cdots 3\cdot 2\cdot 1 = (2n)!!(2n-1)!! = 2^n n!(2n-1)!!, \tag{A.104}$$

و

$$(2n+1)! = (2n+1)(2n)(2n-1)\cdots 3\cdot 2\cdot 1 = (2n)!!(2n+1)!! = 2^n n!(2n+1)!!. \tag{A.105}$$

كما إستخدمنا في إثبات العلاقة (A.102) العلاقة التالية

$$\frac{(p-n)!}{(2p-2n)!} = \frac{(-1)^{n-p}(2n-2p)!}{(n-p)!}; \qquad \forall p \in \mathbb{N}^+, \tag{A.106}$$

حيث في حالتنا أعلاه نأخذ $p = 0$.

إن القيم التقاربية asymptotic values، أي عندما $x \gg 1$، للدوال الكروية تُكتب كالتالي

$$j_n(x) \sim \frac{1}{x}\sin\left(x - \frac{n\pi}{2}\right), \tag{A.107}$$

و

$$n_n(x) \sim -\frac{1}{x}\cos\left(x - \frac{n\pi}{2}\right). \tag{A.108}$$

العلاقتان أعلاه تمثلان موجات كروية موقوفة standing spherical waves.

بإستخدام الحث الرياضي mathematical induction في العلاقات التكرارية للدوال الكروية يمكن بناء صيغ ريل Rayleigh formulas

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{\sin x}{x}\right),$$

$$n_n(x) = -(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{\cos x}{x}\right).$$

بإستخدام علاقات دوال بسل للتعامد (A.76) و المعايرة (A.77)، و بالتعويض لـ j_n في تلكم العلاقات نحصل على علاقة التعامد العيارية لدوال بسل الكروية

$$\int_0^a j_n\left(\alpha_{np}\frac{r}{a}\right) j_n\left(\alpha_{nq}\frac{r}{a}\right) r^2 dr = \frac{a^3}{2}\left[j_{n+1}\left(\alpha_{np}\right)\right]^2 \delta_{pq}, \tag{A.109}$$

حيث α_{np} و α_{nq} أصفار j_n، و الذي يُعْطى أول خمس قيم منها لأول خمس رتب في الجدول (A.4). العلاقة (A.109) تُعطي التعامد لـ j_n عند قيم ثابتة لـ n. إذا كانت n متغيرة فإن الدوال الناتجة عن حل الجزء الزاوي (عادة دوال التوافق الكروي) سوف تفرض ثبوت قيم n عبر علاقات التعامد (A.45).

جدول (A.4): أصفار (جذور) دوال بسل الكروية zeros of spherical Bessel functions. أصفار الدوال $j_n(x)$ تم حسابها بإيجاد أصفار دوال بسل $J_{n+1/2}$. لاحظ للرتب الصفرية فإن $\alpha_{0n} = n\pi$.

Number of zeros	$j_0(x)$	$j_1(x)$	$j_2(x)$	$j_3(x)$	$j_4(x)$	$j_5(x)$
1	3.14159	4.49341	5.76346	6.98793	8.18256	9.35581
2	6.28319	7.72525	9.09501	10.4171	11.7049	12.9665
3	9.42478	10.9041	12.3229	13.698	15.0397	16.3547
4	12.5664	14.0662	15.5146	16.9236	18.3013	19.6532
5	15.708	17.2208	18.6890	20.1218	21.5254	22.9046

A.6 دوال لاجوير Laguerre functions

إن دوال لاجوير هي حل لمعادلة لاجوير التفاضلية العادية التالية

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + ny(x) = 0, \tag{A.110}$$

حيث x معرفة على الفترة $0 < x < \infty$ لكل قيمة صحيحة $n \geq 0$. إن الدافع الأكبر لحل معادلة لاجوير التفاضلية أتى من معادلة شرودنجر القطرية لذرة الهيدروجين.

الدالة المولدة لدوال لاجوير تعطى بـ

$$g(x,z) = \frac{e^{-xz/(1-z)}}{1-z} = \sum_{q=0}^{\infty} L_q(x) z^q; \qquad |z| < 1. \tag{A.111}$$

لو ضربنا الطرفين بـ z^{-n-1} و كاملنا حول النقطة الشاذة $z = 0$ لحصلنا على

$$\oint_C \frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)z^{n+1}} dz = \sum_{q=0}^{\infty} L_q(x) \oint_C \frac{dz}{z^{n-q+1}}.$$

النقطة الشاذة $z = 0$ تمثل قطب pole من الرتبة $n - q + 1$ في تكامل الطرف الأيمن. لو طبقنا حساب الباقي للتكامل في الطرف الأيمن نجد أنه[2]

$$\oint_C \frac{dz}{z^{n-q+1}} = \begin{cases} 2\pi i & n = q, \\ 0 & n \neq q, \end{cases}$$

و عليه فإن الحد الذي يبقى من المتسلسلة هو فقط $q = n$ و الذي يحوي على z^{-1}، و بالتالي تُعْطى دالة لاجوير بشكلها التكاملي بـ

$$L_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)z^{n+1}} dz. \tag{A.112}$$

لو قمنا بالتحويل التالي

$$\frac{xz}{1-z} = s - x \quad \Rightarrow \quad z = \frac{s-x}{s},$$

[2] إن التكامل لدالة من الشكل $f(z)/(z-z_0)^m$، حيث $f(z)$ دالة هولومورفية holomorphic function أي معرفة في كل مكان، يُحَل عن طريق تكامل كوشي Cauchy's integral حول نقطة شاذة $z = z_0$ و التي تمثل قُطب pole من الرتبة m و يُعْطى بـ $\oint f(z)/(z-z_0)^m dz = 2\pi i f^{(m-1)}(z_0)/(m-1)!$.

نحصل على تمثيل تكاملي آخر لدوال لاجوير

$$L_n(x) = \frac{e^x}{2\pi i} \oint_C \frac{s^n e^{-s}}{(s-x)^{n+1}} ds. \tag{A.113}$$

هذا يعني أنه لدينا قطب pole عند $s = x$ من الرتبة $n + 1$ و بالتالي التكامل حسب صيغة كوشي يعطي الحل $2\pi i f^{(n)}(s = x)/n!$، لنحصل على صيغة رودريجز لدوال لاجوير

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}). \tag{A.114}$$

بإستخدام علاقة رودريجيز (A.114) يمكن الحصول على صيغة متسلسلة للكثيرات حدود لاجوير $L_n(x)$ للرتب n الصحيحة

$$L_n(x) = \frac{(-1)^n}{n!} \left[x^n - \frac{n^2}{1!} x^{n-1} + \frac{n^2(n-1)^2}{2!} x^{n-2} - \cdots + (-1)^n n! \right],$$

أو

$$L_n(x) = \sum_{m=0}^{n} \frac{(-1)^m n! x^m}{(n-m)!m!m!} = \sum_{s=0}^{n} \frac{(-1)^{n-s} n! x^{n-s}}{(n-s)!(n-s)!s!}. \tag{A.115}$$

هذا يُمَكّننا من حساب الرتب الأولى من دوال لاجوير و التي تُعْطى في الجدول (A.5). الشكل (A.8) يعطي دوال لاجوير لأول ثلاث رتب.

جدول (A.5): دوال لاجوير حتى الرتبة السادسة.

كثيرات حدود لاجويرLaguerre polynomials
$L_0(x) = 1$
$L_1(x) = 1 - x$
$L_2(x) = \left(x^2 - 4x + 2\right)/2$
$L_3(x) = \left(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6\right)/3!$
$L_4(x) = \left(x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24\right)/4!$
$L_5(x) = \left(-x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120\right)/5!$
$L_6(x) = \left(x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720\right)/6!$

يمكن الحصول على العلاقات التكرارية لدوال لاجوير بطرق متعددة. لو قمنا بإجراء تفاضلات داخلية لعلاقة رودريجيز (A.114) نجد أن

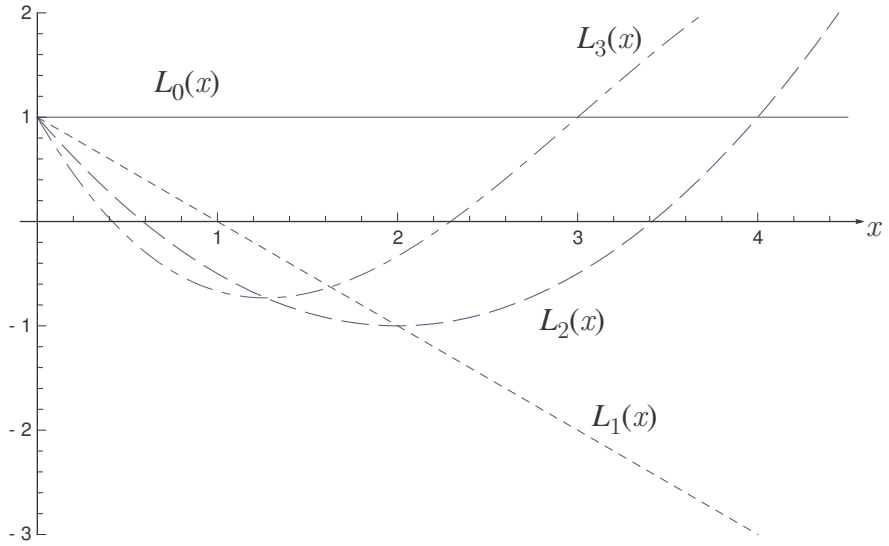
$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(nx^{n-1} - x^n)e^{-x} = L_{n-1}(x) - \frac{e^x}{n!} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} x^n e^{-x},$$

نضرب بـ e^{-x} و من ثم نشتق، لنحصل على

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-x} L_n(x)\right) = \frac{d}{dx}\left(e^{-x} L_{n-1}(x)\right) - \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}).$$

بتوزيع الإشتقاقات مع التجميع نحصل على

$$e^{-x}[-L_n(x) + L'_n(x) + L_{n-1}(x) - L'_{n-1}(x)] = -\frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}).$$



شكل (A.8): دوال لاجوير Laguerre functions حتى الرتبة الثالثة.

بالضرب بـ e^x و إستخدام علاقة رودريجيز (A.114) ينتج

$$L'_n(x) = L'_{n-1}(x) - L_{n-1}(x). \tag{A.116}$$

نفس العلاقة التكرارية (A.116) يمكن أن نصل إليها بإشتقاق الدالة المولدة (A.111) بالنسبة لـ x.

بإشتقاق الدالة المولدة (A.111) بالنسبة لـ x و z، نحصل على المزيد من العلاقات التكرارية

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - nL_{n-1}(x), \tag{A.117}$$

و

$$xL'_n(x) = nL_n(x) - nL_{n-1}(x). \tag{A.118}$$

لو أخذنا $x = 0$ في الدالة المولدة (A.111) مع إبقاء z إعتباطية arbitrary نجد أن

$$g(0,z) = \frac{1}{1-z} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(0) z^n,$$

و بذلك فإن القيمة الخاصة تصبح

$$L_n(0) = 1, \tag{A.119}$$

و ذلك بمقارنة المعاملات في كلا المتسلسلتين.

لو أمعنا النظر في معادلة لاجوير التفاضلية (A.110) سنجد أن مؤثر هذه المعادلة التفاضلية

$$\hat{\mathfrak{L}}_n(x) = x\frac{d^2}{dx^2} + (1-x)\frac{d}{dx} + n,$$

ليس له أي تماثل زوجي أو فردي. كذلك هذا المؤثر ليس ذاتي الترافق أو غير هيرميشي. و عليه فإن دوال لاجوير $L_n(x)$ لا تكوِّن مجموعة كاملة من الدوال المتعامدة. تماماً كما هو الحال في دوال هيرميت. لو ضربنا مجموعة الدوال $L_n(x)$ بـ $e^{-x/2}$ لحصلنا على مجموعة كاملة من الدوال المتعامدة و التي تحقق علاقة التعامد العيارية التالية

$$\int_0^{\infty} e^{-x} L_m(x) L_n(x) dx = \delta_{mn}. \tag{A.120}$$

لهذا من المناسب تعريف دوال لاجوير المتعامدة orthogonal Laguerre functions كالتالي

$$\varphi_n(x) = e^{-x/2} L_n(x). \tag{A.121}$$

إن مجموعة الدوال المتعامدة هذه $\varphi_n(x)$ تحقق المعادلة التفاضلية

$$x\varphi_n''(x) + \varphi_n'(x) + \left(n + \frac{1}{2} - \frac{x}{4}\right)\varphi_n(x) = 0, \tag{A.122}$$

و هي معادلة تفاضلية ذاتية الترافق، حيث تفرض الشروط الحدية فترة التعريف $0 < x < \infty$.

في المقابل، لو أخذنا $z = 1/2$ في الدالة المولدة (A.111) سنحصل على

$$g(x, \frac{1}{2}) = 2e^{-x} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) 2^{-n}.$$

بالضرب بـ $e^{-x} L_m(x)$ و التكامل و بإستخدام علاقة التعامد (A.120)، نحصل على

$$\int_0^{\infty} e^{-2x} L_m(x) dx = 2^{-m-1}.$$

يمكننا حساب المزيد من هذه التكاملات الخاصة بأخذ: $z = -1/2, \pm 1/3, \cdots \text{etc.}$

A.7 دوال لاجويرالمزاملة Associated Laguerre functions

في العديد من التطبيقات الفيزيائية، خاصة فيما يتعلق بالدالة الموجية لذرة الهيدروجين، تظهر لنا دالة لاجوير المزاملة (أو المصاحبة) و التي تعرف كالتالي

$$L_j^k(x) \equiv (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{j+k}(x) \tag{A.123}$$

بإستخدام تمثيل المتسلسلات (A.115) في التعريف (A.123) نحصل على قيم دوال لاجوير المزاملة

$$L_0^k(x) = 1,$$

$$L_1^k(x) = -x + k + 1,$$

و

$$L_2^k(x) = \frac{x^2}{2} - (k+2)x + \frac{(k+2)(k+1)}{2}.$$

بشكل عام نكتب

$$L_j^k(x) = \sum_{m=0}^{j} (-1)^m \frac{(j+k)!}{(j-m)!(k+m)!m!} x^m, \qquad k > -1. \tag{A.124}$$

بإستخدام علاقة رودريجيز (A.114) في التعريف (A.123) نحصل على تمثيل رودريجيز لدوال لاجوير المزاملة

$$L_j^k(x) = \frac{e^x x^{-k}}{j!} \frac{d^j}{dx^j}(e^{-x} x^{k+j}). \tag{A.125}$$

إن جميع التعريفات و الصيغ لدوال لاجوير المزاملة $L_j^k(x)$ تختزل إلى ما يقابلها من دوال لاجوير $L_j(x)$ عند $k = 0$.

يمكن إيجاد الدالة المولدة لدوال لاجوير المزاملة بإستخدام التعريف (A.123) و ذلك بإشتقاق الدالة المولدة لدوال لاجوير (A.111) k مرة. بعد التعديل على المؤشر لـ $L_j^k(x)$ نحصل على

$$\frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)^{k+1}} = \sum_{j=0}^{\infty} L_j^k(x) z^j, \qquad |z| < 1. \tag{A.126}$$

من الدالة المولدة أعلاه، عندما $x = 0$، و بإستخدام مفكوك ذو الحدين نحصل على

$$L_j^k(0) = \frac{(j+k)!}{j!k!}. \tag{A.127}$$

من السهل إشتقاق العلاقات التكرارية من الدالة المولدة أو عن طريق إشتقاق العلاقات التكرارية لدوال لاجوير. من بين هذه الطرق العديدة

$$(j+1)L_{j+1}^k(x) = (2j+k+1-x)L_j^k(x) - (j+k)L_{j-1}^k(x), \tag{A.128}$$

$$x\frac{dL_j^k(x)}{dx} = jL_j^k(x) - (j+k)L_{j-1}^k(x). \tag{A.129}$$

من هاتين العلاقتين أو من خلال تفاضل معادلة لاجوير التفاضلية لـ k مرة، نحصل على معادلة لاجوير التفاضلية المزاملة

$$x\frac{d^2L_j^k(x)}{dx^2} + (k+1-x)\frac{dL_j^k(x)}{dx} + jL_j^k(x) = 0. \tag{A.130}$$

حيث تظهر هذه المعادلة التفاضلية في التطبيقات الفيزيائية التي تتضمن حل الجزء القطري لمعادلة شرودنجر تحت تأثير جهود مركزية متناظرة كروياً.

إن معادلة لاجوير التفاضلية المزاملة (A.130) ليست ذاتية الترافق، لكن يمكن تحويلها إلى صيغة ذاتية الترافق فيما لو ضربت دوال لاجوير المصاحبة بـ $e^{-x/2}x^{k/2}$، لنحصل على علاقة التعامد

$$\int_0^{\infty} e^{-x}x^k L_j^k(x)L_i^k(x)dx = \frac{(j+k)!}{j!}\delta_{ji}, \tag{A.131}$$

أي أن لها نفس فترة التعامد $[0, \infty)$ لدوال لاجوير. لو أخذنا

$$\varphi_j^k(x) = e^{-x/2}x^{k/2}L_j^k(x), \tag{A.132}$$

فإن مجموعة الدوال $\varphi_j^k(x)$ تحقق المعادلة التفاضلية ذاتية الترافق التالية

$$x\frac{d^2\varphi_j^k(x)}{dx^2} + \frac{d\varphi_j^k(x)}{dx} + \left(-\frac{x}{4} + \frac{2j+k+1}{2} - \frac{k^2}{4x}\right)\varphi_j^k(x) = 0. \tag{A.133}$$

مجموعة الدوال $\varphi_j^k(x)$ يطلق عليها أحياناً بدوال لاجوير. المعادلة التفاضلية (A.122) هي حالة خاصة من المعادلة التفاضلية (A.133) عندما $k = 0$.

في سياق النقاش أعلاه، يمكن إضافة تعريف آخر مفيد، يُعْطى كالتالي

$$\Phi_j^k(x) = e^{-x/2}x^{(k+1)/2}L_j^k(x). \tag{A.134}$$

لدى تعويضها في معادلة لاجوير التفاضلية المزاملة (A.130) نحصل على

$$\frac{d^2\Phi_j^k(x)}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2j+k+1}{2x} - \frac{k^2-1}{4x^2}\right)\Phi_j^k(x) = 0. \tag{A.135}$$

هذه المعادلة تقابل علاقة معايرة

$$\int_0^\infty e^{-x}x^{k+1}\left[L_j^k(x)\right]^2 dx = \frac{(j+k)!}{j!}(2j+k+1). \tag{A.136}$$

يجب ملاحظة أن الدوال $\Phi_j^k(x)$ لا تكون مجموعة كاملة (إلا مع x^{-1} كدالة وزن) بسبب وجود x^{-1} في الحد الثاني داخل القوسين من المعادلة التفاضلية (A.135).

A.8 دوال هيرميت Hermite functions

يرمز لدوال هيرميت للمتغير z من الرتبة n بـ $H_n(z)$ و تعرف بأنها حل للمعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية التالية

$$\frac{d^2H_n(z)}{dz^2} - 2z\frac{dH_n(z)}{dz} + 2nH_n(z) = 0, \tag{A.137}$$

حيث أن $n = 0, 1, 2, \ldots$. الدالة المولدة generating function لدالة هيرميت تُعْطى كالتالي

$$e^{2zt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}. \tag{A.138}$$

يمكن الحصول على قيم خاصة لدوال هيرميت من الدالة المولدة (A.138) عندما $z = 0$، بحيث أن

$$g(z=0,t) = e^{-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(0)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{t^{2n}}{n!}.$$

بمقارنة المعاملات لمتسلسلات القوى، نجد

$$H_{2n}(0) = (-1)^n\frac{(2n)!}{n!}; \qquad H_{2n+1}(0) = 0. \tag{A.139}$$

بنفس الطريقة، يمكن الحصول من متساوية الدالة المولدة (A.138) على

$$g(-z,t) = e^{-t^2-2tz} = g(z,-t), \tag{A.140}$$

من متساوية متسلسلات القوى

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(-z)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{-t^n}{n!},$$

و الذي يُعْطي علاقة التماثل parity relation لدوال هيرميت

$$H_n(z) = (-1)^n H_n(-z). \tag{A.141}$$

في صيغة الدالة المولدة (A.138) و بأخذ مفكوك ماكلورين للدالة الأسية في الطرف الأيسر نحصل على

$$\begin{aligned} e^{2zt-t^2} &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2zt-t^2)^m}{m!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}, \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} t^m \frac{(2z-t)^m}{m!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}. \end{aligned}$$

بأخذ مفكوك ذو الحدين في الطرف الأيسر، نجد أن

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m}{m!} \sum_{s=0}^{m} (-1)^s \frac{m!}{(m-s)!s!} (2z)^{m-s} t^s &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}, \\ \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{m} \frac{(-1)^s}{(m-s)!s!} (2z)^{m-s} t^{m+s} &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}. \end{aligned}$$

حتى نستطيع مقارنة معاملات t من نفس القوة بين الطرفين نحتاج أن $m+s=n$. و بإستخدام الحقيقة التالية[1]

$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{m} a_{s,m-s} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{[n/2]} a_{s,n-2s},$$

حيث أن $[n/2] = n/2$ إذا كانت قيمة n زوجية، و $[n/2] = (n-1)/2$ إذا كانت n فردية. إذاً عند أخذ $m = n-s$ فإن المفكوك المزدوج يُكتَب كالتالي

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{m} \frac{(-1)^s}{(m-s)!s!} (2z)^{m-s} t^{m+s} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^s}{(n-2s)!s!} (2z)^{n-2s} t^n, \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}. \end{aligned}$$

بمقارنة معاملات t^n نحصل على علاقة هامة لتمثيل دوال هيرميت

$$H_n(z) = \sum_{s=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^s n!}{(n-2s)!s!} (2z)^{n-2s}. \tag{A.142}$$

إحدى التمثيلات الهامة أيضاً لدوال هيرميت يأتي من صيغة رودريجز Rodrigues formula و يُحْسَب من تفاضل الدالة المولدة n مرة بالنسبة للمتغير t، لنحصل على

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}. \tag{A.143}$$

بإشتقاق الدالة المولدة (A.138) بالنسبة لـ t، يمكن أن نثبت أن دالة هيرميت تتبع علاقة الإستدعاء recursion relation التالية

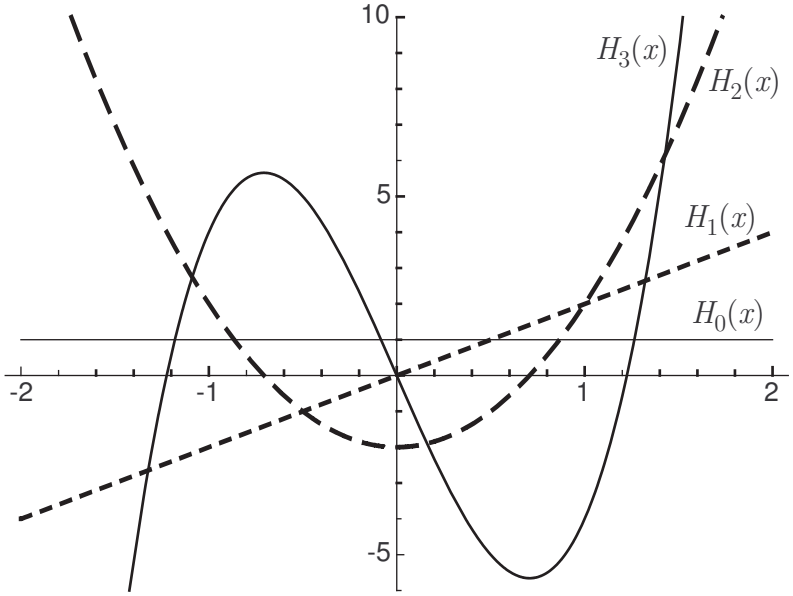
$$H_{n+1}(z) = 2zH_n(z) - 2nH_{n-1}(z). \tag{A.144}$$

كذلك بإشتقاق الدالة المولدة (A.138) بالنسبة لـ z، يمكن أن نوجد متتالية إبل Appell sequence لدالة هيرميت، تُعْطَى كالتالي

$$H_n'(z) = 2nH_{n-1}(z). \tag{A.145}$$

جدول (A.6): كثيرات حدود هيرميت حتى الرتبة السادسة.

كثيرات حدود هيرميت Hermite polynomials
$H_0(z) = 1,$
$H_1(z) = 2z,$
$H_2(z) = 4z^2 - 2,$
$H_3(z) = 8z^3 - 12z,$
$H_4(z) = 16z^4 - 48z^2 + 12,$
$H_5(z) = 32z^5 - 160z^3 + 120z,$
$H_6(z) = 64z^6 - 480z^4 + 720z^2 - 120.$



شكل (A.9): دوال هيرميت Hermite plynomials حتى الرتبة الثالثة.

من العلاقات أعلاه يمكن أن نحسب دالة هيرميت عند أي رتبة. في الجدول (A.6) بعض قيم دوال هيرميت حتى الرتبة السادسة. كذلك شكل (A.9) يُعْطِي دوال هيرميت حتى الرتبة الثالثة. لاحظ زوجية و فردية دوال هيرميت تعتمد على رتبة الدالة n. إن مجموعة دوال هيرميت $\{H_n(z)\}_{n=0}^{\infty}$ بحد ذاتها غير متعامدة على فضاء $z \in (-\infty, +\infty)$، حيث أن معادلة هيرميت التفاضلية (A.137) ليست ذاتية الترافق. لكن بضرب دوال هيرميت بالدالة الجاوسية $e^{-z^2/2}$ نحصل على دالة متعامدة orthonormal حيث تتبع علاقة التعامد التالية

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) dz = 2^n \pi^{\frac{1}{2}} n! \delta_{nm}, \tag{A.146}$$

هذا يعني أن المجموعة $\{e^{-z^2/2} H_n(z)\}_{n=0}^{\infty}$ كاملة، و بالتالي أي دالة معرفة على الفضاء $z \in (-\infty, +\infty)$ يمكن التعبير عنها بهذه المجموعة. لذلك يمكن إستخدام المجموعة $\{e^{-z^2/2} H_n(z)\}_{n=0}^{\infty}$ للتعبير عن الدوال الموجية في ميكانيكا الكم.

لنعتبر إذاً التمثيل التالي للدالة الموجية $\psi_n(z)$، بحيث أن

$$\psi_n(z) = e^{-z^2/2} H_n(z). \tag{A.147}$$

نريد إذاً الحصول على المعادلة الأساسية و التي تُعتبر الدالة الموجية $\psi_n(z)$ حلاً لها. لنأخذ التمثيل العكسي للعلاقة (A.147)، أي أن

$$H_n(z) = e^{z^2/2}\psi_n(z),$$

بالإشتقاق بالنسبة لـ z نحصل على

$$\frac{dH_n(z)}{dz} = ze^{z^2/2}\psi_n(z) + e^{z^2/2}\frac{d\psi_n(z)}{dz} = e^{z^2/2}\left[\frac{d\psi_n(z)}{dz} + z\psi_n(z)\right]. \tag{A.148}$$

أيضاً بإشتقاق العلاقة (A.148) بالنسبة لـ z نحصل على

$$\frac{d^2H_n(z)}{dz^2} = ze^{z^2/2}\left[\frac{d\psi_n(z)}{dz} + z\psi_n(z)\right] + e^{z^2/2}\left[\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2} + z\frac{d\psi_n(z)}{dz} + \psi_n(z)\right].$$

بعد التبسيط نحصل على

$$\frac{d^2H_n(z)}{dz^2} = e^{z^2/2}\left[\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2} + 2z\frac{d\psi_n(z)}{dz} + (z^2+1)\psi_n(z)\right]. \tag{A.149}$$

بتعويض التمثيل العكسي للعلاقة (A.147)، و المعادلتين (A.148) و (A.149) في المعادلة التفاضلية (A.137)، نحصل على المعادلة التفاضلية من الدرجة الثانية التالية

$$\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2} + (2n+1-z^2)\psi_n(z) = 0, \tag{A.150}$$

حيث حلها يُعْطى في العلاقة (A.147). إن مجموعة الحل $\{\psi_n(z)\}_{n=0}^{\infty}$، تتبع نفس علاقة التعامد في (A.146)، أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(z)\psi_m(z)dz = 2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!\delta_{nm}. \tag{A.151}$$

لهذا فإن حل المعادلة (A.150) بشكله المعاير يصبح

$$\psi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{2^n\pi^{\frac{1}{2}}n!}}e^{-z^2/2}H_n(z). \tag{A.152}$$

سنجد لاحقاً أن المعادلة (A.150) و حلها (A.152) لهما علاقة وثيقة جداً بحركة جسيم تحت تأثير جهد الحركة التوافقية البسيطة.

ملـــــحق B

نظرية شتورم-ليوڤيل Sturm-Liouville theory

B.1 مدخل Introduction

معظم مسائل الفيزياء تنتهي إلى معادلة تفاضلية عادية لها خاصيتين هامتين، أولهما: أن الحل يجب أن يلبي الشروط الحدية boundary conditions وثانيهما: الحل يحتوي على معامل وسيط parameter تُعين قيمته بطريقة ترضي الشروط الحدية. من منظور الفضاء المتجه، فإن الشروط الحدية (بالإضافة إلى متطلبات الاستمرارية والتفاضل) تُحدد فضاء هلبرت للمسألة، في حين أن المعامل الوسيط يُحَدَّد عادة بطريقة تسمح بكتابة المعادلة التفاضلية كمعادلة القيمة المميزة في فضاء هلبرت.

لتوضيح هذه الفكرة نعود إلى تمثيل الكميات الفيزيائية في ميكانيكا الكم و إستخدام فضاء متجه وهو فضاء هلبرت لكتابة أثر هذه المؤثرات الخطية و الهيرميشية على الدالة الموجية في الفضاء $\psi(x)$ كمعادلات تفاضلية تأخذ صيغة معادلة القيمة المميزة، كما هو في (3.53). وعلى خطى هذه الطريقة كتبنا معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (3.19) على الصيغة (3.20)، و معادلة كمية الحركة الخطية أو الزخم الخطي بالمعادلتين (4.34) و (4.35). هذا أيضاً يشمل معادلات شرودنجر في ثلاث أبعاد. على سبيل المثال لا الحصر، معادلة شرودنجر في الإحداثيات الكروية (7.27) وما تحويه من مؤثرات للزخم الخطي القطري (7.18) والزاوي (7.19) و (7.30).

من الجدير بالذكر، وفي معادلة شرونجر بالذات، الشروط الحدية تحددها طبيعة دالة الجهد. ففي حالة الجهود المنقطعة في بعد واحد، على سبيل المثال، نجد أن معادلات شرودنجر تؤول إلى معادلة هيلمهولتز Helmholtz equation والتي تأخذ الصيغة

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \tag{B.1}$$

للجسيم الحر الحدود هي الفضاء وحل المعادلة (B.1) هو الموجة المستوية $e^{\pm ikx}$. الشروط الحدية هنا هو أن الدالة الموجية يجب أن تؤول للصفر عندما $x \to \pm\infty$. ربما من الهام القول أن الموجة المستوية لاتحقق هذا الشرط حرفياً مما يجعل الموجة المستوية معضلة أساسية لتحقيق المعايرة. بينما للجسم المحصور في بئر لانهائي في بعد واحد كما هو الحال في (4.1) فإن حدود البئر $(-a, a)$ تمثل الحدود وحلها يُعْطى بـ $\sin kx$ و $\cos kx$. الشروط الحدية هنا هو إختفاء الدالة الموجية عند $x = \pm a$. في كلا الحالتين، معادلة هيلمهولتز تكتب على صيغة المعادلة المميزة كالتالي

$$\hat{\mathcal{L}}\psi = k^2\psi,$$

حيث $\hat{\mathcal{L}} = -d^2/dx^2$ مؤثر تفاضلي خطي من الدرجة الثانية. في ثلاث أبعاد معادلة شرودنجر و معادلات الكميات الفيزيائية الأخرى تصبح أكثر تعقيداً. بشكل عام، لكل متغير من متغيرات الفضاء يعطي معادلة تفاضلية خطية من

الدرجة الثانية على الصيغة

$$f_2(x)y''(x) + f_1(x)y'(x) + f_0(x)y(x) = \lambda y(x), \tag{B.2}$$

حيث أن $f_2(x)$، $f_1(x)$، و $f_0(x)$ دوال مركبة للمتغير الحقيقي عديم الأبعاد x و λ ثابت مركب. المتغير x لايعني بالضرورة الموقع في الفضاء كما تعودنا و قد يكون المتغير القطري kr أو الزاوي θ أو ϕ أو حتى الزمني ωt. مؤثر المعادلة التفاضلية (B.2) يُعْطى بـ

$$\hat{\mathcal{L}}(x) = f_2(x)\frac{d^2}{dx^2} + f_1(x)\frac{d}{dx} + f_0(x). \tag{B.3}$$

حتى يكون تماثل $\hat{\mathcal{L}}(x)$ زوجي فإنه يجب أن يكون تماثل $f_2(x)$ زوجي، $f_1(x)$ فردي، و $f_0(x)$ زوجي. والعكس صحيح لتماثل $\hat{\mathcal{L}}(x)$ الفردي. المعادلة (B.2) تُكْتب بصيغة المعادلة المميزة

$$\hat{\mathcal{L}}(x)y(x) = \lambda y(x). \tag{B.4}$$

إن توصيف الملامح العامة لمسائل القيم المميزة للمعادلات التفاضلية الخطية من الرتبة الثانية يُعرف بنظرية شتورم-ليوڤيل Sturm-Liouville theory والذي يتعامل مع مسائل القيم المميزة (أو القيم الذاتية كما في بعض المراجع) eigenvlaue problems والتي تُعْطى بالصيغة (B.4). إن القضية الرئيسية في نظرية شتورم-ليوڤيل تحديد الشروط التي تجعل $\hat{\mathcal{L}}(x)$ مؤثر هيرميشي.

B.2 المؤثرات التفاضلية الهيرمشية Hermitian differential operators

إن الإهتمام بالمؤثرات الهيرميشية نابع من حقيقة إنها تمثل كميات فيزيائية. سوف لن نناقش لماذا نمثل الكميات الفيزيائية بمؤثرات هيرميشية لإننا فعلنا ذلك مسبقاً في الباب الثالث. لكننا ناقشنا رياضياً الشروط الأساسية للمؤثر كي يكون هيرميشي. ذكرنا أن المؤثر يكون هيرميشياً إذا كانت قيمته المتوقعة حقيقية، كما الشرط (3.49). ثم ذكرنا لاحقاً أن المؤثر الهيرميشي إذا كان ذاتي التجاور و عرفنا التجاور في تمثيل المصفوفات بأنه المنقول transpose و المرافق conjugate معاً، كما في الشرط (9.5). إلا إننا لم نناقش الشرط اللازم لتجاور (أو هيرميشية) مؤثر المعادلات التفاضلية $\hat{\mathcal{L}}(x)$.

إن الشرط اللازم لمؤثر المعادلات التفاضلية $\hat{\mathcal{L}}(x)$ كي يكون ذاتي الترافق self-adjoint هو

$$f_2'(x) = f_1(x). \tag{B.5}$$

هذا الشرط يجعل $\hat{\mathcal{L}}(x)$ تُكتب بالصيغة

$$\hat{\mathcal{L}}(x) = \frac{d}{dx}\left[f_2(x)\frac{d}{dx}\right] + f_0(x), \tag{B.6}$$

لتصبح المعادلة التفاضلية (B.2)

$$\hat{\mathcal{L}}y = (f_2y')' + f_0 = \lambda y. \tag{B.7}$$

لو إعتبرنا للمعادلة التفاضلية (B.7) حلين مستقلين خطياً $y_1(x)$ و $y_2(x)$ معرفتين على الفترة $x \in (a,b)$. فإننا نعرف علاقة الضرب الداخلي $\langle y_1|y_2\rangle$ من خلال

$$\langle y_1|y_2\rangle \equiv \int_a^b y_1^*(x)y_2(x)dx. \tag{B.8}$$

من خطية الفضاء المتجه، فإن $g_1(x) = \hat{\mathcal{L}}(x)y_1(x)$ و $g_2(x) = \hat{\mathcal{L}}(x)y_2(x)$ تحويلات خطية لـ $y_1(x)$ و $y_2(x)$ ليعطي $g_1(x)$ و $g_2(x)$ المنتميتين لنفس الفضاء الخطي المتجه و بنفس الشروط الحدية. وعليه يمكن أن نكتب الضرب الداخلي $\langle y_1|g_2\rangle = \langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle$ حسب التعريف (B.8)

$$\begin{aligned}
\langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle &= \int_a^b y_1^*(x)\left[\hat{\mathcal{L}}y_2(x)\right]dx = \int_a^b \left[y_1^*\left(f_2y_2'\right)' + y_1^*f_0y_2\right]dx, \\
&= \int_a^b \underbrace{y_1^*}_{u}\underbrace{\left(f_2y_2'\right)'dx}_{dv} + \int_a^b y_1^*f_0y_2dx, \\
&= y_1^*f_2y_2'|_a^b - \int_a^b \underbrace{f_2\left(y_1^*\right)'}_{u}\underbrace{y_2'dx}_{dv} + \int_a^b y_1^*f_0y_2dx,
\end{aligned}$$

حيث قمنا بالتكامل بالتجزيء في الخطوة الأخيرة. نكامل بالتجزيء مرة أخرى لنحصل على

$$\begin{aligned}
\langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle &= y_1^*f_2y_2'|_a^b - y_2f_2\left(y_1^*\right)'\Big|_a^b + \int_a^b y_2\left[f_2\left(y_1^*\right)'\right]'dx + \int_a^b y_1^*f_0y_2dx, \\
&= y_1^*f_2y_2'|_a^b - y_2f_2\left(y_1^*\right)'\Big|_a^b + \int_a^b \underbrace{\left\{\left[f_2\left(y_1^*\right)'\right]' + y_1^*f_0\right\}}_{\left(\hat{\mathcal{L}}y_1\right)^*}y_2dx, \\
&= y_1^*f_2y_2'|_a^b - y_2f_2\left(y_1^*\right)'\Big|_a^b + \int_a^b \left(\hat{\mathcal{L}}y_1\right)^*y_2dx.
\end{aligned}$$

أو نصل إلى

$$\int_a^b y_1^*(x)\hat{\mathcal{L}}y_2(x)dx = \left[y_1^*f_2y_2' - \left(y_1^*\right)'f_2y_2\right]_a^b + \int_a^b \left[\hat{\mathcal{L}}y_1(x)\right]^*y_2(x)dx, \tag{B.9}$$

أو بالصيغة المختزلة

$$\langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle = \left[y_1^*f_2y_2' - \left(y_1^*\right)'f_2y_2\right]_a^b + \langle\hat{\mathcal{L}}y_1|y_2\rangle. \tag{B.10}$$

حسب المعادلتين (B.9) أو (B.10)، المؤثر $\hat{\mathcal{L}}$ ذاتي الترافق إذا إختفى الحد الحدودي boundary term $[\cdots]_a^b$ على شرط التسليم بتعريف الضرب الداخلي (B.8). بشكل عابر، نلاحظ أن فكرة التجاور الذاتي في نظرية المعادلة التفاضلية أضعف منها في المفهوم المقابل في مؤثرات فضاءات هلبرت، وذلك بسبب إنعدام القيود للحدود الحدية. ونؤكد مرة أخرى أن تعريف فضاء هلبرت للتجاور الذاتي لا يتوقف فقط على صيغة $\hat{\mathcal{L}}$ بل وأيضاً على تعريف الضرب الداخلي (الضرب القياسي) والشروط الحدية.

لو تفحصنا الحد الحدودي $[\cdots]_a^b$ نجد أنه يختفي تماماً في أي من الحالات التالية:

أولاً: إذا كان كلاً من y_1 و y_2 يتلاشيان عند النقاط الحدية $x = a$ و $x = b$، فيما يُعْرف بشروط ديريخليت الحدية Dirichlet boundary conditions.

ثانياً: إذا كان كلاً من y_1' و y_2' يتلاشيان عند النقاط الحدية $x = a$ و $x = b$، فيما يُعْرف بشروط نويمان الحدية Neumann boundary conditions.

ثالثاً: حتى لو لم يتحقق شرطي ديريخليت أو نويمان الحديين، فإن الحد الحدودي يمكن أن يتلاشى إن حدث أن $y_1^*f_2y_2'|_a = y_1^*f_2y_2'|_b$ و $\left(y_1^*\right)'f_2y_2|_a = \left(y_1^*\right)'f_2y_2|_b$)، لكل y_1 و y_2، كما هو الحال في الأنظمة الدورية كالشبيكات البلورية.

لو إعتبرنا الحلين المستقلين خطياً $y_1(x)$ و $y_2(x)$ للمعادلة التفاضلية (B.7) و المعرفتين على الفترة (a,b)، دوال مميزة لـ $\hat{\mathcal{L}}(x)$ بقيمتين مميزتين λ_1 و λ_2، على التوالي، فإن

$$\langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle = \lambda_2\langle y_1|y_2\rangle; \qquad \text{and} \qquad \langle\hat{\mathcal{L}}y_1|y_2\rangle = \lambda_1^*\langle y_1|y_2\rangle,$$

لتصبح العلاقة (B.9) على الصيغة

$$(\lambda_2-\lambda_1^*)\int_a^b y_1^*(x)y_2(x)dx = \left[y_1^* f_2 y_2' - (y_1^*)' f_2 y_2\right]_a^b, \tag{B.11}$$

أو تصبح العلاقة (B.10)

$$(\lambda_2-\lambda_1^*)\langle y_1|y_2\rangle = \left[y_1^* f_2 y_2' - (y_1^*)' f_2 y_2\right]_a^b. \tag{B.12}$$

من الواضح أنه إذا تلاشى الطرف الأيسر الحدودي و $\lambda_2 \neq \lambda_1^*$ فإن الضرب الداخلي لـy_1 و y_2 يتلاشى. بمعنى آخر y_1 و y_2 متعامدتين orthogonal على الفترة (a,b). هذا تحقيق خاص لشرط التعامد للدوال المميزة للمؤثرات الهيرميشية في فضاء هِلبرت.

في الحالة الخاصة إذا تساوت الدوال المميزة $y_1 = y_2 = y \neq 0$ هذا يعني $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$، فإن الطرف الأيسر في (B.11) أو (B.12) يساوي دالة $J(x)$ تُعطى كالتالي

$$\left[y_1^* f_2 y_2' - (y_1^*)' f_2 y_2\right]_a^b = \left[f_2\left(y^* y' - (y^*)' y\right)\right]_a^b \equiv [J(x)]_a^b.$$

لاحظ أن الدالة $J(x)$ حقيقية إذا كانت الدالة $f_2(x)$ تخيلية. هل يوجد معنى فيزيائي لهذه الدالة؟ كي نحافظ على خاصية الضرب الداخلي

$$\langle y|y\rangle = \int_a^b |y(x)|^2 dx > 0,$$

فإن $[J(x)]_a^b = J(b) - J(a) = 0$، اي ان التيار الداخل هو نفسه الخارج (التيار المحفوظ conserved current). لذلك نصل مباشرةً إلى أن $\lambda = \lambda^*$. و بناءً عليه نقول أن المؤثرات الهيرميشية على فترة معينة لها قيم مميزة (أو قيم ذاتية) eigenvaules حقيقية.

B.3 المعادلات التفاضلية الغير هيرميشية Non-Hermitian ODEq

بعض المعادلات التفاضلية التي تعتبر هامة في الفيزياء لاتلبي الشرط (B.5). في هذه الحالة يمكن ضرب المؤثر $\hat{\mathcal{L}}$ بكمية $w(x)$ تحوله إلى مؤثر ذاتي الترافق. وعليه تصبح مسألة القيمة المميزة لشتورم-ليوڤيل في المعادلة (B.4) كالتالي

$$w(x)\hat{\mathcal{L}}(x)y(x) = w(x)\lambda y(x), \tag{B.13}$$

أو نكتب (B.13) على الصيغة

$$\hat{\tilde{\mathcal{L}}}(x)y(x) = \lambda w(x)y(x). \tag{B.14}$$

المفروض الآن المؤثر الجديد $\hat{\tilde{\mathcal{L}}}(x)$ ذاتي التجاور و يُعْطى بـ

$$\hat{\tilde{\mathcal{L}}}(x) = w(x)\hat{\mathcal{L}}(x) = \tilde{f}_2(x)\frac{d^2}{dx^2} + \tilde{f}_1(x)\frac{d}{dx} + \tilde{f}_0(x), \tag{B.15}$$

حيث $\tilde{f}_i(x) = w(x)f_i(x)$ لكل $i = 0,1,2$. و بالتالي، فإن المؤثر الجديد $\hat{\tilde{\mathcal{L}}}(x)$ يلبي الشرط (B.5)، اي أن

$$\tilde{f}_2'(x) = \tilde{f}_1(x); \qquad \Rightarrow \qquad f_2(x)w(x)' + f_2'(x)w(x) = f_1(x)w(x).$$

بترتيب الحدود نحصل على معادلة تفاضلية خطية متجانسة من الرتبة الأولى لـ $w(x)$، اي

$$w(x)' = \left[\frac{f_1(x) - f_2'(x)}{f_2(x)}\right] w(x).$$

المعادلة قابلة للفصل separable و بالتالي نحصل على

$$\frac{dw(x)}{w(x)} = \left[\frac{f_1(x) - f_2'(x)}{f_2(x)}\right] dx.$$

تكامل الطرفين مع إهمال ثوابت التكامل و التي سوف تلغي بعضها بعض لدى تعويض $w(x)$ في (B.15) نحصل على صيغة $w(x)$ كالتالي

$$w(x) = \frac{1}{f_2(x)} \exp\left[\int \frac{f_1(x)}{f_2(x)} dx\right], \tag{B.16}$$

ومنها نحصل على

$$\tilde{f}_2(x) = \exp\left[\int \frac{f_1(x)}{f_2(x)} dx\right], \qquad \tilde{f}_1(x) = \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \exp\left[\int \frac{f_1(x)}{f_2(x)} dx\right]. \tag{B.17}$$

نستخدم الآن تعريف الضرب الداخلي (B.8) لحساب $\langle y_1|w\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle = \langle y_1|\hat{\tilde{\mathcal{L}}}y_2\rangle$ و إتباع نفس الخطوات السابقة من تكامل بالتجزيء لنصل إلى

$$\begin{aligned} &\int_a^b y_1^*(x) w(x) \hat{\mathcal{L}} y_2(x) dx \\ &= \left[y_1^* \tilde{f}_2 y_2' - (y_1^*)' \tilde{f}_2 y_2\right]_a^b + \int_a^b w(x) \left[\hat{\mathcal{L}} y_1(x)\right]^* y_2(x) dx, \end{aligned} \tag{B.18}$$

أو بالصيغة المختزلة

$$\langle y_1|w\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle \stackrel{?}{=} \left[y_1^* f_2 y_2' - (y_1^*)' f_2 y_2\right]_a^b + \langle w\hat{\mathcal{L}}y_1|y_2\rangle. \tag{B.19}$$

علامة الإستفهام في العلاقة (B.19) بسبب وضعية الدالة $w(x)$ ما إذا كانت حقيقية أم مركبة. للتخلص من هذا التساؤل سنعيد تعريف الضرب الداخلي (B.8) إلى ما يسمى الضرب الداخلي الموزون weighted inner product و الذي يُعْطى بـ

$$\langle y_1|y_2\rangle_w \equiv \int_a^b y_1^*(x) y_2(x) w(x) dx. \tag{B.20}$$

بناءً على التعريف الجديد للضرب الداخلي نعيد كتابة العلاقتين (B.18) و (B.19)

$$\begin{aligned} &\int_a^b y_1^*(x) \left[\hat{\mathcal{L}} y_2(x)\right] w(x) dx \\ &\qquad = \left[w f_2 \left(y_1^* y_2' - (y_1^*)' y_2\right)\right]_a^b + \int_a^b \left[\hat{\mathcal{L}} y_1(x)\right]^* y_2(x) w(x) dx, \end{aligned} \tag{B.21}$$

أو بالصيغة المختزلة

$$\langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle_w = \left[w f_2 \left(y_1^* y_2' - (y_1^*)' y_2\right)\right]_a^b + \langle \hat{\mathcal{L}}y_1|y_2\rangle_w. \tag{B.22}$$

مرة أخرى، لو إعتبرنا الحلين المستقلين خطياً $y_1(x)$ و $y_2(x)$ المعرفين على الفترة (a,b)، دوال مميزة لـ $\hat{\mathcal{L}}(x)$ بقيمتين مميزتين λ_1 و λ_2، على التوالي، فإن

$$\langle y_1|\hat{\mathcal{L}}y_2\rangle_w = \lambda_2\langle y_1|y_2\rangle_w; \qquad \text{and} \qquad \langle\hat{\mathcal{L}}y_1|y_2\rangle_w = \lambda_1^*\langle y_1|y_2\rangle_w,$$

لتصبح العلاقة (B.21) على الصيغة

$$(\lambda_2-\lambda_1^*)\int_a^b y_1^*(x)y_2(x)\,w(x)dx = \left[wf_2\left(y_1^*y_2' - (y_1^*)'\,y_2\right)\right]_a^b, \tag{B.23}$$

أو تصبح العلاقة (B.22)

$$(\lambda_2-\lambda_1^*)\,\langle y_1|y_2\rangle_w = \left[wf_2\left(y_1^*y_2' - (y_1^*)'\,y_2\right)\right]_a^b. \tag{B.24}$$

نستنتج أنه إذا تلاشى الطرف الأيمن فإن y_1 و y_2 متعامدتين في الفترة (a,b) تحت الضرب الداخلي الموزون بالمعامل w بشرط أن $\lambda_1 \neq \lambda_2$. بكلام آخر، تعريفنا للضرب الداخلي و إختيارنا للشروط الحدية المناسبة جعل من $\hat{\mathcal{L}}(x)$ مؤثراً ذاتي الترافق في فضاء هِلبرت، ولهذا فإن المؤثر ينتج دوال مميزة متعامدة.

من المعادلات التفاضلية الشهيرة و التي لاتستوفي شروط التجاور الذاتي على فضاءات التقارب المعرفة عليها هي معادلة بسل (A.59)، معادلة لاجوير (A.110)، و معادلة هيرميت (A.137). لذلك فإن دوالها لاتستوفي شروط التعامد إلا بالضرب الداخلي الموزون و الذي يحمل معاني هندسية. فمثلاً دوال بسل تتعامد إذا ضربناها بـ x و يصبح التكامل بالنسبة لـ xdx وهذا يمثل التكامل القطري للإحداثيات الإسطوانية و يتوافق تماماً مع حقيقة أن معادلة بسل التفاضلية تظهر لدى حل معادلة هيلمهولتز أو معادلة لابلاس في الإحداثيات الإسطوانية.

من الطرق الأخرى في تحويل المعادلة التفاضلية الغير هيرميشية إلى معادلة هيرميشية هو عمل تعويض عكسي لدوال الحل. فإذا كانت $y(x)$ حل للمعادلة التفاضلية (B.2) تلبي علاقة الضرب الموزون (B.20) و أخذنا التحويل التالي $g(x) = \sqrt{w(x)}y(x)$ بحيث أن $g(x)$ حل مميز لمعادلة تفاضلية ذاتية الترافق وتلبي علاقة الضرب الداخلي الغير موزون (B.8) وعوضنا $y(x) = g(x)/\sqrt{w(x)}$ في المعادلة التفاضلية (B.2) سنحصل على المعادلة تفاضلية التالية

$$\begin{aligned} &f_2g'' + \left(f_1 - \frac{w'}{w}f_2\right)g' \\ &\quad + \left\{\left[\frac{1}{4}\left(\frac{w'}{w}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{w'}{w}\right)\right]f_2 - \frac{1}{2}\left(\frac{w'}{w}\right)f_1 + f_0\right\}g = \lambda g. \end{aligned} \tag{B.25}$$

من صيغة $w(x)$ في المعادلة (B.16) نكتب

$$\ln w = \int\frac{f_1}{f_2}dx - \ln f_2, \tag{B.26}$$

ومنها نكتب

$$\frac{w'}{w} = \frac{d}{dx}(\ln w) = \frac{f_1 - f_2'}{f_2}. \tag{B.27}$$

بالتعويض في (B.25) نصل إلى

$$f_2g'' + f_2'g' + \left[f_0 - \frac{1}{2}(f_1' - f_2'') - \frac{(f_1-f_2')^2}{4f_2}\right]g = \lambda g. \tag{B.28}$$

من الواضح أن المعادلة التفاضلية (B.28) ذاتية اللترافق لإنها تحقق الشرط (B.5)، ومع تطبيق شروط حدية مناسبة فإن حلولها تحقق علاقات التعامد، و قيمها المميزة حقيقية.

من أشهر الأمثلة على طريقة التحويل أعلاه، لدى تطبيق التحويل (A.132) في معادلة لاجوير المزاملة (A.130) تتحول معادلة لاجوير إلى معادلة تفاضلية تصف المعادلة القطرية لذرة الهيدروجين (A.133). كذلك من خلال التحويل (A.147) في معادلة هيرميت (A.137) فإنها تتحول إلى معادلة تفاضلية تصف الحركة التوافقية البسيطة (A.150).

ملـــــحق C

حساب بعض التكاملات و الصيغ الرياضية
Useful calculus and mathematical formulae

C.1 دالة التوزيع الطبيعي Normal distribution function

لنفترض دالة التوزيع الطبيعي المعايرة normal distribution function المعروفة بالدالة الجاوسية و التي تُعطى بـ

$$f(x;\mu,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \tag{C.1}$$

حيث أن μ هو المتوسط mean يعطى لـ N نقطة بـ

$$\mu = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \tag{C.2}$$

و σ تُعرف بالتفاوت أو التغاير variance و تعرَّف كالتالي

$$\sigma^2 = \bar{x^2} - \bar{x}^2 = \bar{x^2} - \mu^2. \tag{C.3}$$

في حالة أن $\mu = 0$ و $\sigma^2 = 1$ فإن التوزيع يسمى طبيعي عياري standard normal .

إن دالة التوزيع (C.1) معايرة، أي أن

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x;\mu,\sigma)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx = 1. \tag{C.4}$$

في المقابل من معرفتنا للتوزيع الإحصائي المستمر، فإن المتوسط في (C.2) يمكن أن يحسب كالتالي

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} x f(x;\mu,\sigma)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx, \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} (z+\mu) e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} dz, \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} z e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} dz + \mu \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} dz, \\
&= 0 + (\mu \times 1) = \mu.
\end{aligned}$$

حيث إعتبرنا $z = x - \mu$ و أخذنا بالإعتبار أن تكامل الدوال الفردية على الفضاء سيعطي صفر.
من تكامل المعايرة (C.4) لو أخذ $\mu = 0$ و $\alpha = 1/2\sigma^2 > 0$ نحصل على حل للتكامل التالي

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \tag{C.5}$$

بسبب تناظر الدالة المُكامل عليها integrand في الفضاء بالنسبة لـ x فإن التكامل (C.5) على نصف الفضاء يصبح

$$\int_{0}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \tag{C.6}$$

أيضاً يمكن أن نستنتج أن التكامل التالي

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-\alpha x^2} dx = 0, \tag{C.7}$$

على أساس أن المُكامَل the integrand عكس تناظري antisymmetric بالنسبة لـ x. بالمقابل فإن التكامل على نصف الفضاء لايعطي صفراً. لو أخذنا $u = x^2$ فإن $\frac{1}{2}du = xdx$ و بالتالي نحصل على

$$\int_{0}^{\infty} x\, e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\int_{0}^{\infty} e^{-\alpha u} du = \frac{1}{2}\frac{-1}{\alpha}\, e^{-\alpha u}\Big|_0^{\infty} = -\frac{1}{2\alpha}(0-1) = \frac{1}{2\alpha}.$$

و بالتالي يمكن أن نكتب أن

$$\int_{0}^{\infty} x\, e^{-\alpha x^2} dx = -\int_{-\infty}^{0} x\, e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha}. \tag{C.8}$$

يمكن إستخدام التكامل بالتجزئ لحساب التكامل التالي

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx,$$

و ذلك بأخذ التالي

$$u = x \quad \Rightarrow \quad du = dx; \qquad \text{and} \qquad dv = x\, e^{-\alpha x^2} dx \quad \Rightarrow v = -\frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha x^2},$$

بالتعويض نحصل على

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx &= -\frac{1}{2\alpha} x\, e^{-\alpha x^2}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \left(-\frac{1}{2\alpha}\right)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx, \\ &= 0 + \frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}, \end{aligned}$$

حيث إستخدمنا قاعدة لوبيتال l'Hôpital's rule لحساب نهايات التكامل المعتل، كذلك إستخدمنا نتيجة التكامل (C.5). نستنتج إذاً حلول التكاملين التاليين

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}; \qquad \text{and} \qquad \int_{0}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}. \tag{C.9}$$

بإجراء نفس الطريقة السابقة يمكن إثبات تكاملات جاوسية مضروبة بمتغير مرفوع لأي قوة صحيحة n لنحصل على الصيغة

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2\alpha} dx = \frac{1}{2}\left[(-1)^n + 1\right] \alpha^{\frac{-n-1}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right), \tag{C.10}$$

حيث Γ تمثل دالة جاما gamma function. واضح من التكامل أن قيم n الفردية ستعطي صفر. لذلك فإن دالة جاما دائماً لأنصاف أعداد فردية. لذلك نستخدم علاقة دوال جاما التكرارية

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \tag{C.11}$$

حتى نصل إلى القيمة $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$. في المقابل تكامل (C.10) على نصف الفضاء لايساوي صفر عند قيم n الفردية، و عليه يصبح

$$\int_{0}^{\infty} x^n e^{-x^2\alpha} dx = \frac{1}{2}\alpha^{\frac{-n-1}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right). \tag{C.12}$$

عند قيم n الفردية فإن $(n+1)/2$ ستكون صحيحة، و بالتالي نستخدم علاقة المضروب لدوال جاما

$$\Gamma(z) = (z-1)!. \tag{C.13}$$

سؤال (C.1): بإستخدام حساب التكاملات بالطريقة المطولة إحسب التكاملات التالية

1. $\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx$
2. $\int_{0}^{\infty} x^3 e^{-\alpha x^2} dx$

ثم أعد حساب هذه التكاملات بإستخدام العلاقات (C.10) و (C.12) و قارن بين النتيجتين. ♢

C.2 تكامل الدالة الجاوسية مع الدالة الأسية
Integral of Gaussian function with exponential extension

لو أخذنا الدالة الجاوسية المركبة

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 \pm i\beta x} dx. \tag{C.14}$$

إن إشارة الجزء التخيلي هنا لاتؤثر على نتيجة التكامل، السبب هو أن الجزء المركب يُفَك بإستخدام علاقة أويلر إلى دوال جيبية على الشكل

$$\begin{aligned} I(\alpha, \beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \left(\cos \beta x \pm i \sin \beta x\right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \cos \beta x \, e^{-\alpha x^2} dx \pm i \int_{-\infty}^{\infty} \sin \beta x \, e^{-\alpha x^2} dx \end{aligned}$$

حد التكامل الثاني في الطرف الأيمن يساوي صفر لأن المُكامَل دالة فردية على الفضاء. و عليه فإن التكامل (C.14) يُختزل إلى تكامل على دالة جاوسية مضروبة بجيب التمام، هذا يعني أيضاً أن نتيجة التكامل حقيقية.

لو اخذنا مشتقة التكامل بالنسبة لـ β نحصل على

$$\frac{\partial I(\alpha, \beta)}{\partial \beta} = -\int_{-\infty}^{\infty} x \, e^{-\alpha x^2} \sin \beta x dx.$$

ننفذ التكامل في الطرف الأيمن بإستخدام التكامل بالتجزيء حيث نفرض أن

$$u = \sin\beta x \Rightarrow du = \beta\cos\beta x dx \qquad \text{and} \qquad dv = x\, e^{-\alpha x^2} dx \Rightarrow v = -\frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha x^2},$$

لنحصل على

$$\frac{\partial I(\alpha,\beta)}{\partial\beta} = -\left[-\frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha x^2} \sin\beta x \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \left(-\frac{\beta}{2\alpha}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \cos\beta x dx \right].$$

الحد الأول من الطرف الأيمن داخل الأقواس المربعة ذو الحدود المعتلة يُعطي صفر لأن الدالة الجاوسية متناهية عندما $x \to \pm\infty$ بينما دالة sin محددة bounded. التكامل في الحد الثاني ليس سوى $I(\alpha,\beta)$. نحصل إذاً على معادلة تفاضلة لـ I بالنسبة لـ β، أي

$$\frac{\partial I(\alpha,\beta)}{\partial\beta} = -\frac{\beta}{2\alpha} I(\alpha,\beta).$$

نثبت المعامل α و نعتبر β المتغير الوحيد لنحصل على معادلة تفاضلية قابلة للفصل، أي أن

$$\frac{dI}{I} = -\frac{\beta}{2\alpha} d\beta.$$

نكامل تكامل غير محدود لنحصل على

$$\int \frac{dI}{I} = -\frac{1}{2\alpha} \int \beta d\beta + \ln C \quad \Rightarrow \quad \ln I = -\frac{\beta^2}{4\alpha} + \ln C,$$

حيث الثابت C هو ثابت التكامل غير المحدود. بأخذ الأس الطبيعي للطرفين تصل إلى

$$I(\alpha,\beta) = Ce^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}.$$

إن قيمة $I(\alpha,0)$ في العلاقة (C.14) ليست سوى تكامل الدالة الجاوسية (C.5). نستخدم هذه المطابقة كأداة لإيجاد الثابت C، أي أن

$$I(\alpha,\beta=0) = C = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

و عليه فإن النتيجة النهائية للتكامل (C.14) تصبح

$$I(\alpha,\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 \pm i\beta x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \cos\beta x\, e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}. \tag{C.15}$$

سؤال (C.2): إحسب تكامل الدالة الجاوسية المركبة على نصف الفضاء $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2 \pm i\beta x} dx$. لاحظ هنا التكامل على الدوال الفردية لا يختفي. ♢

في حالة أن المُكامل حقيقي و ليس تخيلي، أي أن

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 \pm \beta x} dx.$$

نقوم بعملية إكمال المربع للأس، بجمع و طرح مربع نصف معامل x نحصل على

$$\begin{aligned} -\alpha x^2 \pm \beta x &= -\alpha\left(x^2 \mp \frac{\beta}{\alpha}x\right) = -\alpha\left[x^2 \mp \frac{\beta}{\alpha}x + \left(\frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 - \left(\frac{\beta}{2\alpha}\right)^2\right], \\ &= -\alpha\left[x \mp \frac{\beta}{2\alpha}\right]^2 + \alpha\left(\frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 = -\alpha\left[x \mp \frac{\beta}{2\alpha}\right]^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}. \end{aligned}$$

التكامل يصبح إذاً

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 \pm \beta x} dx = e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\left(x \mp \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2} dx = e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \tag{C.16}$$

لاحظ لو إستبدلنا β بـ $i\beta$ فإن التكامل (C.16) يؤول إلى التكامل (C.15) و نحصل بالتالي على نفس النتيجة.

C.3 تكاملات هامة للدوال الأسية Useful integrals of exponential functions

من أهم تكاملات الدالة الأسية التي يواجهها القارئ هي من الشكل

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dx,$$

حيث $\alpha \in \mathbb{R}^+$ كما هو دائماً، و n صحيح موجب. لحل التكامل هذا نحتاج أن نكامل بالتجزيء و خفض رتبة x و الإستمرار n مرة حتى نحصل على المُكامل فقط الدالة الأسية. أو بديلا نحسب التالي

$$\int_0^{\infty} x e^{-\alpha x} dx,$$

بإستخدام التكامل بالتجزيء و بأخذ $u = x$ و $dv = \exp(-\alpha x)dx$، نحصل على

$$\int_0^{\infty} x e^{-\alpha x} dx = -\frac{1}{\alpha} x e^{-\alpha x}\Big|_0^{\infty} + \frac{1}{\alpha}\int_0^{\infty} e^{-\alpha x} dx = 0 - \frac{1}{\alpha^2} e^{-\alpha x}\Big|_0^{\infty} = \frac{1}{\alpha^2}.$$

بنفس الطريقة، و بإستخدام التجزيء مرتين (أو مرة مع إستخدام نتيجة التكامل في الأعلى) نحسب التكامل التالي

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha x} dx = -\frac{1}{\alpha} x^2 e^{-\alpha x}\Big|_0^{\infty} + \frac{2}{\alpha}\int_0^{\infty} x e^{-\alpha x} dx = 0 + \frac{2}{\alpha} \times \frac{1}{\alpha^2} = \frac{2}{\alpha^3}.$$

و كذلك يمكن أن نجد

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-\alpha x} dx = \frac{6}{\alpha^4} = \frac{3!}{\alpha^4}.$$

بشكل عام إذاً يمكن أن نكتب أن

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}. \tag{C.17}$$

سؤال (C.3): إحسب التكامل $\int_0^{\infty} x^4 e^{-\alpha x} dx$ بالطريقة المطولة و قارنه مع النتيجة (C.17). لا تعد إختراع العجلة و إستخدم التكاملات المذكورة أعلاه لتكملة الحل. ♢

References المراجع

[1] G.B. Arfken and H.J. Weber. *Mathematical Methods For Physicists*. Elsevier Science, 6th edition, 2005.

[2] J.R. Taylor. *Classical Mechanics*. University Science Books, 2005.

[3] D.J. Griffiths and D.F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2018.

[4] J.J. Sakurai and J.J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2nd edition, 2014.

[5] R.M. Eisberg and R. Resnick. *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles*. Wiley, 2nd edition, 1985.

[6] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics*. John Wiley & Sons, 3rd edition, 2003.

[7] H. Häffner, T. Beier, N. Hermanspahn, H.-J. Kluge, W. Quint, S. Stahl, J. Verdú, and G. Werth. High-accuracy measurement of the magnetic moment anomaly of the electron bound in hydrogenlike carbon. *Phys. Rev. Lett.*, 85:5308–5311, Dec 2000.

[8] E.U. Condon and G.H. Shortley. *The Theory of Atomic Spectra*. Cambridge University Press, 1951.

[9] A.R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Investigations in physics. Princeton University Press, 1996.

[10] D.J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Number v. 2. Cambridge University Press, 2017.

[11] H. Goldstein, C.P. Poole, and J.L. Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 2002.

[12] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 115:485–491, Aug 1959.

[13] W Ehrenberg and R E Siday. The refractive index in electron optics and the principles of dynamics. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 62(1):8–21, jan 1949.

[14] R. G. Chambers. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Phys. Rev. Lett.*, 5:3–5, Jul 1960.

[15] Akira Tonomura, Tsuyoshi Matsuda, Ryo Suzuki, Akira Fukuhara, Nobuyuki Osakabe, Hiroshi Umezaki, Junji Endo, Kohsei Shinagawa, Yutaka Sugita, and Hideo Fujiwara. Observation of aharonov-bohm effect by electron holography. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1443–1446, May 1982.