Quantum Mechanics
Or
Quantum Chemistry

م. عمار عبد الجبار كاظم

المقدمة: Introduction

ظهرت النظرية في بداية القرن العشرين لحل إشكاليات لم تستطع الفيزياء الكلاسيكية تفسيرها.
ومن هذه الإشكاليات

- تناقضات تصور الفيزياء الكلاسيكية لشكل الذرة. حيث وضعت النظرية الكمية تصور لشكل الذرة مشابهة لشكل المجموعة الشمسية حيث تتمركز النواة في الوسط و تدور الالكترونات حول النواة.
- بينما في الفيزياء الكلاسيكية فأن الاللكترونات ستتعرض لتسارع جذب مركزي نتيجة دورانها حول النواة مما يؤدي الى بثها اشعاع كهرومغناطيسي وعليه فأن الالكترونات ستفقد طاقتها وتقترب الى النواة وتصطدم بها في جزء من الثانية.
- النظرية الكلاسيكية تعتبر الوان الطيف الذري يجب ان تغطي جميع الاطوال الموجية بنفس الشدة. ولكن في الحقيقة تصدر الذرات المختلفة اطيافا لها اطوال موجية خاصة و محددة.
- أيضا نظرية الكم فسرت الجسم الأسود (الذي هو عبارة عن جسم يمتص كامل الاشعاع الساقط عليه ليعيد اصدارة بالكامل مره اخرى

الكيمياء الكمومية **Quantum chemistry** هو فرع من الكيمياء النظرية يقوم بتطبيق ميكانيكا الكم و نظرية الحقل الكمومي لحل قضايا ومسائل في الكيمياء. أحد تطبيقات الكيمياء الكمومية هي دراسة سلوك الذرات والجزيئات فيما يخص قابليتها للتفاعل. تقع الكيمياء الكمومية على الحدود بين الكيمياء والفيزياء ويشارط بها مختصون من كلا الفرعين.

سبب تسميته بهذا الاسم يرجع إلى الأعداد الكمية التي هي عبارة عن أعداد تظهر كنتيجة رياضية منطقية تحدد أحجام وأشكال المجالات الإلكترونية.

مبدأ الكم : هو المبدأ الذي يفترض بأن طاقة الجسيمات شبة الذرية تكون بشكل كمات محددة وليست مستمرة، هذه الكميات المحددة من الطاقة تدعى كمات مفردها الكم والكم هو اقل كمية ممكنة من الطاقة.

أيضا الكم يعرف بأنه مصطلح فيزيائي يستخدم لوصف اصغر كمية الطاقة يمكن تبادلها بين الجسيمات.

نظم الاحداثيات و الاعداد المعقدة

كيمياء الكم

1. نظم الاحداثيات Coordinates Systems

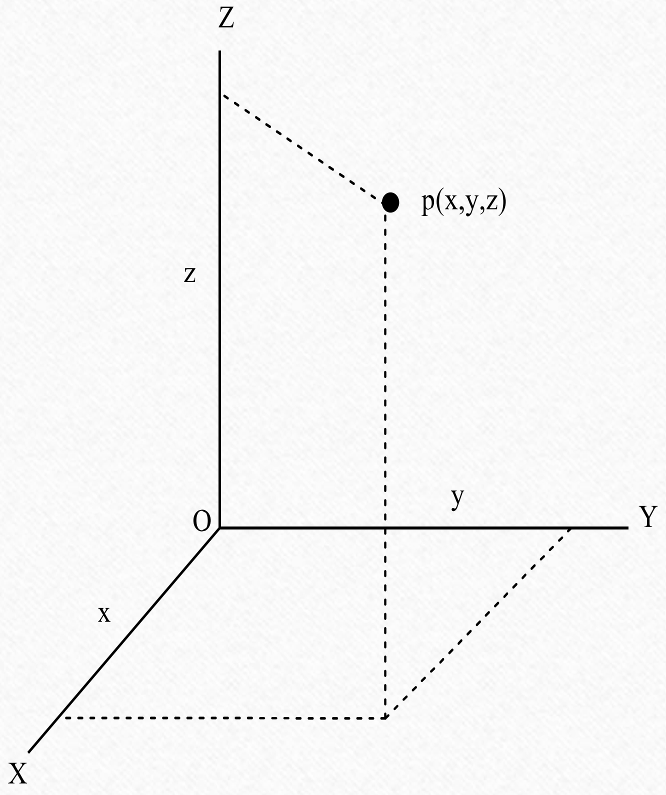
الاحداثيات: تعبير يصف نقطة أو منحنى أو سطح في الفضاء. وهي تستخدملتبيسط المعادلات الرياضية التي تصف مسألة معينة و ان اختيارها يعتمد علىطبيعة تلك المسألة.

و لا تعتمد القيمة النهائية بعد حل المسألة على طبيعة الاحداثيات المستخدمة.

ان اهم النظم الاحداثية المستخدمة هي:

أ- الاحداثيات الديكارتية Cartesian Coordinates ب- الاحداثيات الكروية القطبية Spherical Polar Coordinates

أ- الاحداثيات الديكارتية



يتم من خلالها وصف نقطة مثل p بواسطة ثلاثة مسافات تقع بأتجاه ثلاثمحور متعامدة هي x و y و z .

و يتم التعبير عن النقطة المعرفة بالصيغة p(x,y,z)

يوضح الشكل المجاور مخطط نظام الاحداثيات الديكارتية

ان الاحداثيات تلتقي في نقطة تدعى نقطة الاصل و يرمز لها بالحرف الانكليزي o و هي مركز الاحداثيات **ب- الاحداثيات الكروية القطبية** يتم من خلالها وصف نقطة مثل p بواسطة مسافة هي **r** و زاويتين هما **θ** و **φ** . و يعبر في هذه الحالة عن النقطة المعرفة بالصيغة $p(r, \theta, \varphi)$.

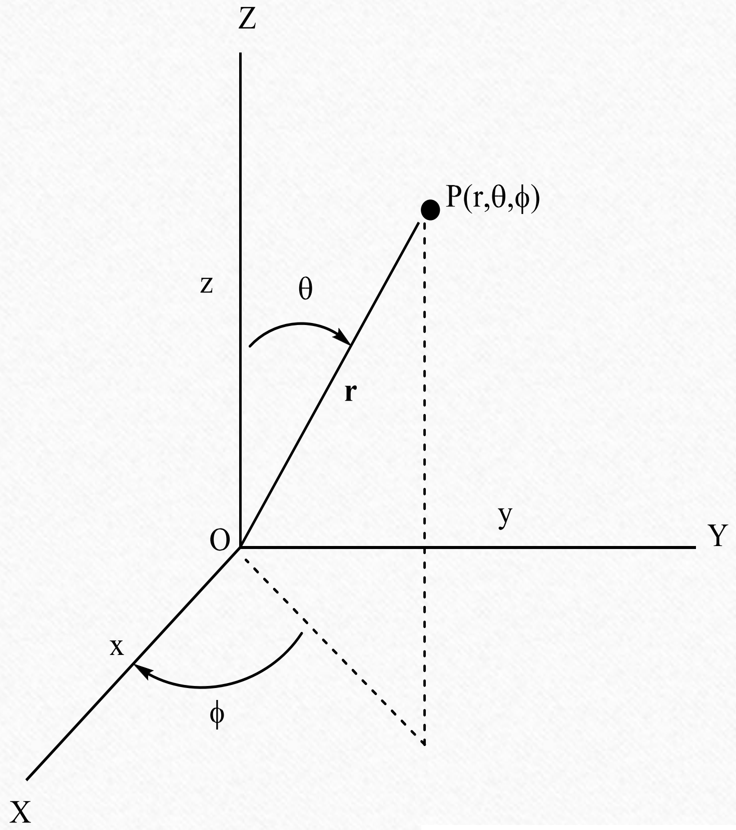
و تعرف القيم r, θ, φ كما يلي:

r: تمثل طول المستقيم OP المرسوم من نقطة الاصل O الى النقطة P.

θ: تلفظ ثيتا و تدعى الزاوية القطبية و هي الزاوية المحصورة بين الاحداثي z و المستقيم OP.

φ: تلفظ فاي و تدعى الزاوية السمتية و هي الزاوية المحصورة بين الاحداثي x و مسقط المستقيم OP على المستوي xy.

يوضح الشكل المجاور مخطط نظام الاحداثيات الكروية القطبية



و ترتبط الاحداثيات الديكارتية بالاحداثيات الكروية القطبية بالعلاقات التالية:

$$x = r \sin\theta \cos\varphi$$

$$y = r \sin\theta \sin\varphi$$

$$z = r \cos\theta$$

2- الاعداد المعقدة:

أ- العدد المعقد: هو العدد الذي يحتوي على √-١ يرمز له بالرمز (i).

يرمز للعدد المعقد بالرمز C و هو يتكون من جزأين و هما الجزء الحقيقي و الذي يمكن ان يأخذ اية قيمة ما عدا √-١ و الجزء الخيالي و الذي يحتوي على √-١.

و كما يلي:

$$C = A + \sqrt{-1}\,B \qquad or$$

$$C = A + i\,B$$

حيث ان:

C يدعى العدد المعقد

A يدعى الجزء الحقيقي

B يدعى الجزء الخيالي

و لكي يكون C عددا معقدا فأن B يجب ان لا تساوي صفرا.

من الامثلة على الاعداد المعقدة ما يلي √-١ ٣ + ٢,١

حيث ان A= 2.1 و هو الجزء الحقيقي

B= ٣√-١ و هو الجزء الخيالي

المرافق التركيبي – العامل او المؤثر- معادلة القيمة الذاتية

ب. المرافق التركيبي Complex conjugate

لكل عدد معقد مرافق تركيبي يرمز له بالرمز *(C) يلفظ سي-ستار(و هو ينتج من تعويض كل ١-√ او i

بواسطة $-\sqrt{(-1)}$ او i-
و كما يلي:

العدد المعقد

$C = A + iB$ complex number

المرافق التركيبي

$C^* = A - iB$ complex conjugate

CC^* = positive real number

ان حاصل ضرب العدد المعقد في مرافقه التركيبي هو عدد حقيقي موجب.

مثال: اثبت ان حاصل ضرب العدد المعقد في مرافقه التركيبي هو عدد حقيقي موجب.

الحل: نعوض عن C بواسطة ($(A + \boldsymbol{iB})$ و عن *C بواسطة $(A - \boldsymbol{iB})$

ثم نقوم بفتح الاقواس

$\sqrt{-١} * \sqrt{-١} = -1$

$CC^* = (A + \boldsymbol{iB})(A - \boldsymbol{iB})$

$= A^2 - AiB + AiB - (iB)^2$

$= A^2 + B^2$ (positive real number) عدد حقيقي موجب

٣. العامل أو المؤثر Operator

هو رمز يشير الى عملية رياضية تجرى على الدالة التي تكتب بعده. امثلة على العوامل رموز الجمع و الطرح و الضرب و القسمة رمز الجذر التربيعي

رمز عامل التفاضل d/dx

الرقم ٥ في المقدار 5fx و هكذا

فمثلا عندما يسبق عامل التفاضل d/dx الدالة $(x^2 + 1)$ فانه يشير الى اشتقاق الدالة بالنسبة الى x وكما يلي:

$$d/dx(x^2 + 1) = 2x$$

ان d/dx عامل تفاضل و يرمز للعامل بالرمز $\hat{p}$ و هو يلفظ p-hat اذ يوضع فوقه اشارة مثل القبعة لتبين انه عامل تفاضل.

انواع المؤثرات

1. المؤثر الخطي (linear operator) و هو المستخدم في ميكانيك الكم و هو يحقق العلاقات التالية:

a) $d/dx(f+g) = df/dx + dg/dx$

b) $d/dx\, af = a\, d/dx\, f$

حيث ان كل من f و g دوال و ان a ثابت.

2. المؤثر غير الخطي (nonlinear operator)

لا يحقق شروط المؤثر الخطي

$$\sqrt{(f+g)} \neq \sqrt{f} + \sqrt{g}$$

عامل لابلاس: ان من العوامل المعروفة في ميكانيك الكم عامل يدعى عامل لابلاس و الذي يرمز له ∇^2 (دل تربيع او del-squared) و هو عامل تفاضل جزئي ويعبر عنه بالاحداثيات الديكارتية كما يلي

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

و يعبر عنه بالاحداثيات الكروية القطبية بالتعبير التالي

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

ايضا يتم ترتيب المؤثرات بطريقيتن:

١- المؤثرات المتبادلة: ومن صفاتها: تساوي الطرفين

$$\hat{P}\,\hat{Q} = \hat{Q}\,\hat{P}$$

$$\hat{P}\,\hat{Q} - \hat{Q}\,\hat{P} = 0$$

اي انه نأخذ الطرف الايمن المؤثرات للدالة F(x)

$\hat{Q}\,\hat{P}$ F(x)

ثم نأخذ الطرف الايسر لنفس الدالة

$\hat{P}\hat{Q}$ F(x)

في حال تساوي الطرفين تكون الدالة متبادلة اي ان الفرق بينهما يساوي صفر

ايضا يتم ترتيب المؤثرات بطريقيتن:

١- المؤثرات غير المتبادلة: ومن صفاتها: عدم تساوي الطرفين

$$\hat{P}\,\hat{Q} \neq \hat{Q}\,\hat{P}$$

$$\hat{P}\,\hat{Q} - \hat{Q}\,\hat{P} \neq 0$$

اي انه نأخذ الطرف الايمن المؤثرات للدالة F(x)

$\hat{Q}\,\hat{P}$ F(x)

ثم نأخذ الطرف الايسر لنفس الدالة

$\hat{P}\hat{Q}$ F(x)

في حال عدم تساوي الطرفين تكون الدالة غير متبادلة اي ان الفرق بينهما لا يساوي صفر

معادلة القيمة الذاتية Eigen Value Equation

في ميكانيك الكم تمتلك بعض الكميات الفيزيائية قيما محددة تدعى بالقيم المسموحة او القيم الذاتية كالطاقة و الزخم.

ان المسألة الرياضية التي تستخدم لحساب القيم الذاتية لكمية معينة تدعى معادلة القيمة الذاتية

و هي معادلة تفاضلية تحقق العلاقة التالية

$$Pf = af$$

حيث ان

f هي الدالة الذاتية

a هي القيمة الذاتية للعامل P

P عامل يمثل كمية فيزيائية كالطاقة و الزخم

الدوال المنحلة Degenerate Functions

يمكن لمجموعة من الدوال ان تمتلك نفس القيمة الذاتية عندما يؤثر عليها نفس المؤثر، مثلا:

$$Pf_1 = af_1$$

$$Pf_2 = af_2$$

$$Pf_3 = af_3$$

1. ان الدوال f_1 و f_2 و f_3 هي دوال مختلفة لكنها اعطت نفس القيمة a عند التاثير عليها بالمؤثر p و هي تسمى دوال منحلة.

2. ان عدد الدوال التي تمتلك نفس القيمة الذاتية يدعى درجة الانحلالية . أن درجة الانحلالية في الحالة السابقة هي 3.

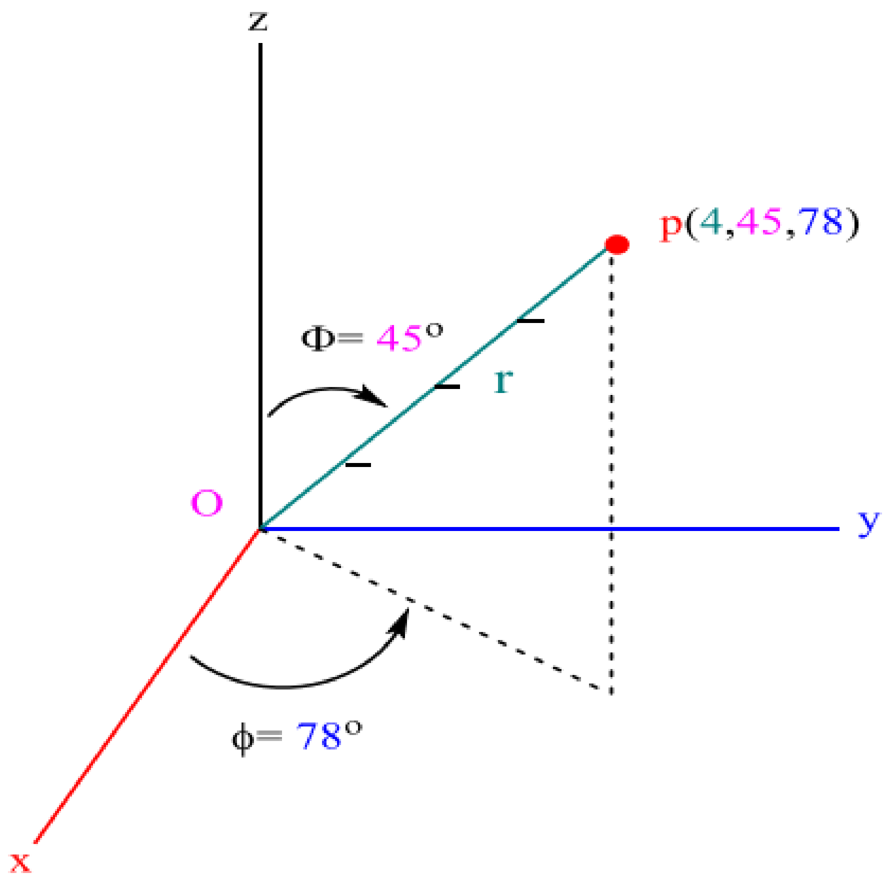
من الامثلة على الدوال المنحلة الاوربتالات مثل اوربتالات p_x و p_y و p_z حيث انها تمتلك نفس الطاقة عندما لا تكون تحت تاثير خارجي.

ان درجة الانحلالية لاوربتالات p الثلاثة هي 3

اما درجة الانحلالية لاوربتلات d الخمسة فهي 5.

مسائل و حلول

1. حدد موقع النقطة $p(4,45,78)$ على نظام الاحداثيات الكروية القطبية.



1. هل ان العدد $1.2 + 6\sqrt{-1}$ هو عدد معقد

نعم لان العدد المعقد يحتوي على على $\sqrt{-1}$

2. هل ان العدد $6\sqrt{-1}$ هو عدد معقد

نعم لانه يحتوي على $\sqrt{-1}$ و ان قيمة الجزء الحقيقي هي صفر.

3. هل ان العدد $4 + 0\sqrt{-1}$ هو عدد معقد

كلا لان قيمة الجزء الخيالي ستصبح صفرا و يختفي $\sqrt{-1}$.

4. ما هو المرافق التركيبي للعدد المعقد $0.7 + 13\sqrt{-1}$

الحل: نحول علامة الجمع الى علامة طرح في العدد المعقد

اذن المرافق التركيبي هو $0.7 - 13\sqrt{-1}$

5. اثبت ان حاصل ضرب العدد المعقد $3.7 + 3.5\sqrt{-1}$ في مرافقه التركيبي هو عدد حقيقي موجب

الحل:

نستخرج المرافق التركيبي و هو $3.7 - 3.5\sqrt{-1}$

ثم نضرب العدد المعقد في مرافقه التركيبي

$$(3.7 + 3.5\sqrt{-1})\,(3.7 - 3.5\sqrt{-1}) = 13.69 - \cancel{12.95\sqrt{-1}} + \cancel{12.95\sqrt{-1}} - (3.5\sqrt{-1})^2$$

$$= 13.69 - (-1.7)$$

$$= 13.69 + 1.7 = 15.39$$

نلاحظ ان الناتج هو عدد موجب و لا يتضمن $\sqrt{-1}$ فهو عدد حقيقي موجب.

6. ما هي صيغة عامل لابلاس معبرا عنها ببعدين هما x و y؟

الحل

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

7. اذا كانت الدالة ψ تمثل النظام و E تمثل الطاقة الكلية للنظام و $\hat{H}$ هو العامل الذي تحسب منه الطاقة الكلية للنظام اكتب معادلة القيمة الذاتية التي تحسب طاقة النظام.

الحل: ان معادلة القيمة الذاتية تاخذ الشكل التالي $Pf = af$ اي ان العامل مضروب في الدالة يساوي ثابت مضروب بنفس الدالة اذن من خلال ذلك تكون معادلة حساب الطاقة بالشكل التالي:

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

و هي المعادلة المسماة معادلة شرودينكر و الدالة ψ تدعى بساي. و هي اهم معادلة في كيمياء الكم و التي من خلالها تحسب الطاقة الكلية للنظام. و ان العامل $\hat{H}$ يدعى العامل الهاملتوني.

يلاحظ من المعادلة ان الدالة موجودة على طرفي المعادلة. و هي في الطرف الايسر مضروبة بالعامل و في الطرف الايمن مضروبة بثابت هو الطاقة.

8. ما هي درجة الانحلالية لاوربتالات d.

الحل: ان عدد اوربتالات d هي خمسة و عند التاثير عليها بنفس العامل سوف تمتلك نفس الطاقة اي انها خمسة دوال تمتلك نفس القيمة الذاتية و لذلك فان درجة انحلاليتها هي 5.

9. هل ان الدالة x^2 هي دالة ذاتية للعامل d/dx؟

الحل: نشتق الدالة x^2 بالنسبة الى x

$$\frac{d}{dx} x^2 = 2x$$

نلاحظ ان الدالة تغيرت عند التاثير عليها بالعامل (اي ضربها بالعامل) و لذلك فهي ليست دالة ذاتية له.

10. هل ان الدالة e^{6y} دالة ذاتية للعامل d/dy؟

الحل: نشتق الدالة بالنسبة الى y

$$\frac{d}{dy} e^{6y} = 6\, e^{6y}$$

نلاحظ انه بعد الاشتقاق حصلنا على نفس الدالة e^{6y} مضروبة بثابت هو 6 و لذلك تعتبر الدالة ذاتية للعامل.

11. هل ان الدالة e^{6y} دالة ذاتية للعامل d^2/dy^2؟

الحل: نشتق الدالة بالنسبة الى y مرتين:

$$d^2/dy^2\ e^{6y} = d/dy\ 6\ e^{6y} = 36\ e^{6y}$$

نلاحظ انه بعد الاشتقاق حصلنا على نفس الدالة مضروبة بثابت هو 36 و لذلك فهي دالة ذاتية للعامل.

12. اثبت ان الدالة e^{6y2} ليست ذاتية للعامل d/dy.

الحل نشتق الدالة بالنسبة الى :y

$$d/dy\ e^{6y2} = 6\ ye^{6y2}$$

نلاحظ ان الدالة بعد الاستقاق تغيرت من e^{6y2} الى دالة جديدة هي ye^{6y2} و لذلك فهي ليست دالة ذاتية للعامل.

الدالة الذاتية و الميكانيك التقليدي

الدالة الذاتية Eigen function

أ- في بعض الحالات أذا اثر عامل على دالة ما فهو يؤدي الى انتاج دالة جديدة مختلفة

$d/dx \sin x = \cos x$

$d/dx \cos x = - \sin x$

ان الدوال $\sin x$ و $\cos x$ ليست من الدوال الذاتية للمؤثر $\boldsymbol{d/dx}$

ب- في حالات اخرى عندما يؤثر عامل على دالة ما يكون الناتج نفس الدالة مضروبة بثابت. أن مثل هذه الدالة تدعى **الدالة الذاتية**.

$$\boldsymbol{d/dx \; e^{ax} = a\, e^{ax}}$$

ان الدالة e^{ax} هي دالة ذاتية للعامل d/dx.

النظام الاحتفاظي Conservative system: هو النظام الذي لا تتغير طاقته الكلية مع الزمن.

$$E = T + V$$

حيث ان E الطاقة الكلية للنظام و T الطاقة الحركية V الطاقة الكامنة.

الميكانيك التقليدي

يستند الميكانيك التقليدي الى ثلاثة معادلات هي

١. معادلة نيوتن (قانون نيوتن في الحركة)

٢. معادلة لاكرنج

٣. معادلة هاملتون

١. قانون نيوتن في الحركة

يعبر عن حركة الجسيم في الميكانيك التقليدي بواسطة قانون نيوتن للحركة و الذي يمكن ان يكتب بالصيغة التالية

$$F = ma$$

حيث ان m هي كتلة الجسيم و a هو تعجيله و F هي القوة المؤثرة في الجسيم.

ان التعجيل a هو مشتقة السرعة v بالنسبة للزمن t و يعبر عنه بالصيغة التالية

$$a = dv/dt$$

اما السرعة فهي مشتقة الازاحة x بالنسبة الى الزمن و يمكن كتابة معادلة السرعة بالصيغة التالية

$$v = dx/dt$$

و لذلك فان التعجيل هو المشتقة الثانية للازاحة بالنسبة للزمن

$$a = dx^2/dt^2$$

و لذلك يمكن كتابة معادلة القوة بالصيغة التالية

$$F = m\, dx^2/dt^2$$

الاحداثيات العامة

في الاحداثيات العامة يرمز للإزاحة (X او Y او Z) بالرمز q و تسمى بالإحداثيات العامة.

و لذلك بدل ان نكتب dx/dt يمكن ان نكتب dq/dt

بينما يرمز للسرعة بالرمز($\dot{q}$) و تسمى بالسرع العامة .

لذلك يمكن ان نكتب معادلة السرعة بالصيغة التالية

$$\dot{q} = dq/dt$$

1. معادلة لاكرانج La Grangian equation

و هي معادلة عامة لأنها لا تعتمد على نوع الاحداثيات. و تصف الحركة الخطية و الدائرية و الاسطوانية. و هي تتضمن

- ***دالة لاكرانج:*** يرمز لها بالرمز L و يعبر عنها بالعلاقة التالية

$$L = T - V$$

حيث ان T الطاقة الحركية و V الطاقة الكامنة.

ان دالة لاكرانج هي دالة لكل من الاحداثيات العامة q و السرع العامة $\dot{q}$. *(هي دالة لمتغير السرعة و الاحداثي و الوقت)* وكما يلي:

$$L(\dot{q}, q, t) = T(\dot{q}, q, t) - V(q, t)$$

تسمى المعادلة أعلاه دالة لاكرانج للأنظمة الغير احتفاظيه. (تعتمد الطاقة الحركية على السرعة و الاحداثيات و الزمن، اما الطاقة الكامنة تعتمد على الاحداثيات و الزمن)

$$L(\dot{q}, q) = T(\dot{q}, q) - V(q)$$

تسمى المعادلة أعلاه دالة لاكرانج للأنظمة الاحتفاظية

*

بما ان الطاقة الحركية دالة للسرعة فقط

$$T = f(\dot{X} + \dot{Y} + \dot{Z})$$

و الطاقة الكامنة دالة للإحداثيات فقط

$$V = f(X + Y + Z)$$

لذلك من خلال التعويض بدلالة معادلة نيوتن للحركة نحصل على معادلة لاكرانج الحركية و التي تصف دالة لاكرانج للنظام اللا احتفاظي بدلالة الزمن و السرعة ناقص دالة لاكرانج للنظام الاحتفاظي بدلالة الاحداثيات

$$\frac{dL}{d\dot{x}} - \frac{dL}{dx} = 0$$

المعادلات توضح دالة لاكرانج لعدة اجسام

$$\frac{dL}{d\dot{Y}} - \frac{dL}{dY} = 0$$

$$\frac{dL}{d\dot{Z}} - \frac{dL}{dZ} = 0$$

*

و بعد تعويض المعادلات السابقة في معادلة لاكرانج الرئيسية وبعد الترتيب و الاختصار نحصل على

m: الكتلة

X: الازاحة للمحور X

$\ddot{X}$: التعجيل

C : ثابت

$$m\ddot{X} + CX = 0$$

$$m\ddot{Y} + CY = 0$$

$$m\ddot{Z} + CZ = 0$$

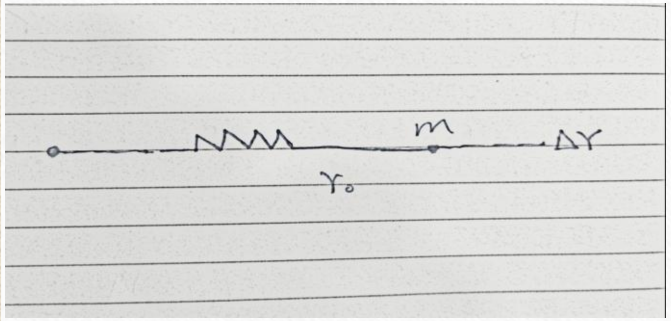
من خلال المعادلات السابقة و بعد التجربة و القياس نحصل على علاقة تمثل ثابت القوة:

$$C = 4\pi^2 mV.^2$$

$V.$: التردد الاهتزازي

C : ثابت القوة

و من اهم تطبيقات دالة لاكرانج



المهتز التوافقي: وهو عبارة عن جسم له كتلة معينة و له طول.

Δr: مقدار الازاحة، m : الكتلة ، $r.$: طول النابض

يتكون هذا النظام من كتلة m تنجذب الى المركز بقوة شد ميكانيكية (نابض عديم الاحتكاك)

و تعرف قوة الجذب R او القوة الأرجاعية

قوة الجذب (R) تنتج من ضرب قيمة ثابتة (ثابت القوة) في الازاحة تحت موضع الكتلة عن حالتها المستقرة (r.)

$$\mathbf{R = C * \Delta r}$$

كذلك طاقة الجهد الناتجة من هذه الازاحة تساوي:

$$\mathbf{V = \tfrac{1}{2} C r^2}$$

r : السرعة

و عند استعمال مجال الاحداثيات الديكارتية هو اخذ الاتجاهات الثلاثة بنظر الاعتبار لذلك يصبح شكل الدالتين الكامنة و الحركية كما يلي:

مربع الازاحة او الازاحة

$$V = \frac{1}{2} C \, (X^2 + Y^2 + Z^2)$$

مربع السرعة

$$T = \frac{1}{2} m \, (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2)$$

وعلية تصبح دالة لاكرانج بعد تعويض المعادلتين أعلاه في معادلة لاكرانج الرئيسية:

$$L = T - V$$

$$L = [\frac{1}{2} m \left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2 \right)] - [\frac{1}{2} C \, (X^2 + Y^2 + Z^2)]$$

- معادلة لاكرانج: يتم كتابة معادلة لاكرانج باشتقاق دالة لاكرانج بالنسبة لكل من الاحداثيات العامة و للسرع العامة و كما يلي

$$\frac{d}{dt}\ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$$

و عند التعويض عن دالة لاكرانج بما يساويها تصبح معادلة لاكرانج بالصيغة التالية

$$\frac{d}{dt}\ \frac{\partial (T-V)}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial (T-V)}{\partial q}$$

1.معادلة هاملتون (The Hamiltonian Equation)

هي معادلة عامة لانها لا تعتمد على نوع الاحداثيات. و هي تتضمن دالة هاملتون التي تمثل الطاقة الكلية للنظام.

يرمز لدالة هاملتون بالرمز H و هي تمثل الطاقة الكلية للنظام حسب العلاقة التالية

$$H = T + V$$

أ- دالة هاملتون: و هي تعتمد على كل من الزخم و السرعة.

و ان الزخم (p) يساوي حاصل ضرب كتلة الجسم في سرعته

$$p = mv = m\dot{q}$$

و تكتب دالة هاملتون بالصيغة التالية

$$H = \dot{q}p - L$$

حيث ان

$H =$ دالة هاملتون

$\dot{q} =$ السرعة العامة

$P =$ الزخم

$L =$ دالة لاكرانج

أ- معادلة هاملتون: تكتب معادلات هاملتون من

1. اشتقاق دالة هاملتون بالنسبة الى الزخم p للحصول على المعادلة التالية

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}_i$$

1. اشتقاق دالة هاملتون بالنسبة الى السرعة $\dot{q}$ للحصول على المعادلة التالية

$$\frac{\partial H}{\partial \dot{q}} = -\dot{p}$$

حيث ان $-\dot{p}$ هو مشتقة الزخم بالنسبة للزمن.