(A) الفصل الأول 2

The Concept of Q.M — مفاهيم الميكانيك الكمي

المفاهيم التي سنتعامل معها في الميكانيك الكمي هي الدوال الموجية، المؤثرات، القيم المتوقعة، معادلات الأمثالية، القيم الذاتية والحالات المستقرة.

مبادئ (فرضيات) الميكانيك الكمي:

١- لكل شيء يمكن ملاحظته مثل a، هناك مؤثر رياضي $\hat{A}$ من خواصه ومميزاته يمكن استنتاج القياسات الممكنة للكمية الفيزيائية a.

سنتطرق لاحقاً وبالتفصيل الى المؤثرات وخواصها وسنذكر هنا فقط معادلة القيم الذاتية ذات الشكل:

$$\hat{A}\,U_n = a_n U_n \qquad \text{——— ①}$$

$\hat{A}$ المؤثر، U_n هي أحدى الدوال من المجموعة الكاملة التي تخص المؤثر $\hat{A}$ وأن a_n هو رقم قد يكون معقداً.

U_n تمثل الدالة الذاتية للمؤثر $\hat{A}$ و a_n القيمة الذاتية.

a_n قد تشكل طيفاً متقطعاً أو طيفاً مستمراً.

٢- النتيجة الوحيدة الممكنة لقياس ما يمكننا ملاحظته هي احدى القيم الذاتية للمؤثر $\hat{A}$.
وهنا نبدأ بملاحظة الربط بين المؤثر الرياضي $\hat{A}$ ونتائج التجربة .

٣- لكل نظام فيزيائي هناك دالة حالة ، ψ والتي تحتوي كل المعلومات عن النظام .
تخبرنا الدالة ψ عن نظام معين في زمن معين والذي فيه يمكننا الحصول على القيم الذاتية a_n .

٤- اذا عرفنا ψ لاي نظام في زمن معين فانه تطور ψ مع الزمن يحسب من العلاقة .

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_{op}\, \psi$$

اذ ان $\hat{H}_{op}$ يمثل هاملتونية النظام .

1 - المؤثرات الكمية :

المعروف عن الدالة الموجية أنها تحمل كل الصفات الخاصة بالجسيم المتحرك التي تصفه مثل الطاقة ، الزخم ، السرعة الموقع والسؤال كيف نستخرج هذه المعلومات من الدالة الموجية ؟

توجد عوامل رياضية لها القدرة على استخلاص هذه المعلومات من الدالات وهذه العوامل تسمى المؤثرات .

هذه المؤثرات لها اشكال مثل المؤثر $\vec{\nabla}$ ، $\sqrt{\ }$

أو احداثي x, y, z

يتميز المؤثر x عن الاحداثي العادي بأنه نوضع عليه علامة (^) مثل $\hat{x}$ ، $\hat{P}$ ، $\hat{A}$

اذا كانت $\phi(x,t)$ دالة تصف جسم ما فالتأثير عليها مثلاً

$$\hat{A}\ \phi(x,t) = a\ \phi(x,t)$$

تسمى القيمة a بالقيمة الذاتية للمؤثر $\hat{A}$

تسمى الدالة $\phi(x,t)$ بالدالة الذاتية للمؤثر $\hat{A}$

أما اذا كانت نتيجة التأثير مختلفة مثلاً بالصورة التالية

$$\hat{A}\ \phi(x,t) = f(x,t) \quad \text{---(1)}$$

هنا نقول أنه $\phi(x,t)$ ليست دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ لأننا حصلنا على نتيجتين مختلفة ولم نحصل على الدالة $\phi(x,t)$ بعد التأثير عليها .

المؤثرات تمتلك صفة الخطية ومثال :

$$\hat{A}(\phi_1+\phi_2) = \hat{A}\phi_1 + \hat{A}\phi_2 \quad \text{——(2)}$$

فاذا كانت $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ ولدينا الدالتين ϕ ، ψ فيكون التأثير عليهما

$$\hat{A}(\phi\psi) = \frac{d}{dx}(\phi\psi) = \phi\frac{d\psi}{dx} + \psi\frac{d\phi}{dx} \quad \text{—(3)}$$

عندها نقول ان المؤثر $\hat{A}$ هو مؤثر خطي .

$$\hat{A}(a\phi) = \frac{d}{dx}(a\phi) = a\frac{d\phi}{dx}$$

أذ أنه a مقدار ثابت وبالتالي فان $\hat{A}$ مؤثر خطي

اذا كانت المؤثرات $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ مؤثرات خطية فانها تحقق العلاقات التالية

$$\left.\begin{aligned} \hat{C} &= \hat{A}+\hat{B} = \hat{B}+\hat{A} \\ \hat{A} &= \hat{B}\cdot\hat{C} \\ \hat{B} &= \hat{A}-\hat{C} \end{aligned}\right\} \quad \text{——(4)}$$

أي انها تخضع للعمليات الجبرية من الجمع والطرح والضرب

وانه بشكل عام

$$\hat{A}\cdot\hat{B} \neq \hat{B}\cdot\hat{A}$$

ويمكننا ان نتحقق من ذلك مثلاً $\hat{A}=\hat{x}$ ، $\hat{B}=\frac{d}{dx}$

$$(\hat{A}\cdot\hat{B})\psi = x\frac{d}{dx}\psi$$

بينما

$$(\hat{B}\cdot\hat{A})\psi = \frac{d}{dx}x\psi$$
$$= x\frac{d\psi}{dx}+\psi$$
$$= (1+x\frac{d}{dx})\psi$$

$$\therefore \quad x\frac{d}{dx} \neq (1+x\frac{d}{dx})$$

$$\hat{A}\cdot\hat{B} \neq \hat{B}\cdot\hat{A}$$

أي أنه

أما اذا تحققت حالة المساواة أي أنه

$$\hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = 0$$
$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

هنا نقول ان المؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ متبادلان وتسمى كتابة العلاقة بينهما على شكل قوس تبادل

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \qquad \text{——(5)}$$

واذا كانت النتيجة تساوي صفر فان المؤثرين متبادلان

مثال أختبر المؤثرين $\hat{x}$ ، $\frac{d}{dx}$ هل هما متبادلان أم لا ؟

$$\left[x, \frac{d}{dx}\right]\psi = x\frac{d}{dx}\psi - \frac{d}{dx}(x\psi)$$

$$= x\frac{d\psi}{dx} - \left(x\frac{d\psi}{dx} + \psi\right)$$

$$= -\psi$$

$$\therefore \left[x, \frac{d}{dx}\right] = -1 \qquad \text{——— (6)}$$

أي ان المؤثرين x ، $\frac{d}{dx}$ غير متبادلان لان النتيجة لا تساوي صفر.

هنا ψ تمثل دالة أختبار .

2- المؤثرات الهرميتية (ذاتية المرافق)

(Hermitian) Hermetical operators

يسمى المؤثر $\hat{A}$ هرميتياً اذا حقق العلاقة التالية

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{A} \psi_2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 \, dx \qquad \text{—(7)}$$

فنتائج قياس أي كمية هو مقدار حقيقي وعند اجراء أولى ان يكون المعدل لاي قياس حقيقي ايضاً

$$\langle f(x)\,\hat{A}\,|\,g(x)\rangle = \langle \hat{A}\,f(x)\,|\,g(x)\rangle$$

لكل الدوال الموجية $f(x)$ و $g(x)$ مثل هذا المؤثر $(\hat{A})$ يسمى مؤثر هرميتي.

(القيم المقاسة observables تمثلها مؤثرات هرميتية)

مثال: أختبر هرميتية مؤثر الزخم $\hat{p}$ ؟

$$\langle f(x)\,|\,\hat{p}\,g(x)\rangle = \int f^{*}(x)\,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\,g(x)\,dx$$

$$= \frac{\hbar}{i}\,f^{*}(x)\,g(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{df(x)}{dx}\right)^{*} g(x)\,dx$$

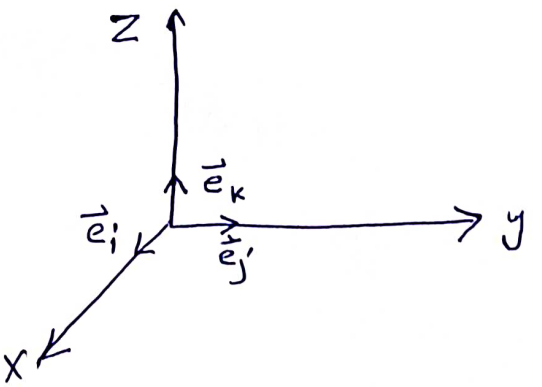
$$= \langle \hat{p}\,f(x)\,|\,g(x)\rangle$$

أذن مؤثر الزخم $\hat{p}$ هو مؤثر هرميتي

3 – فضاء هلبرت والدوال المتعامدة

Hilbert space and orthogonal functions

:←



شكل للمحاور التي تعودنا التعامل معها.

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} \quad ; \quad i,j = 1,2,3$$

$$|\vec{e}_i| = 1$$

ويمكن تمثيل أي متجه بواسطة هذه المتجهات الأساسية

$$\vec{r} = \vec{e}_i x + \vec{e}_j y + \vec{e}_k z$$

وهنا x, y, z مركبات المتجه $\vec{r}$ اي مسقط $\vec{r}$ على المتجهات الاساسية.

$$\vec{r} = \sum_{i=1}^{3} \vec{e}_i x_i \qquad (8)$$

$$x_1 = x \, , \, x_2 = y \, , \, x_3 = z$$

يمكننا الان تعميم هذا الوصف لجعله ملائماً لنظرية الميكانيك الكمي وذلك بأخذ عدداً غير محدود من المتجهات الاساسية (الدوال) والتي هي دوال ذاتية لمؤثر هرميتي وبها نستطيع توليد فضاء لا متناهي الأبعاد مثل هذا الفضاء يسمى فضاء هلبرت وفيه كل الدوال متعامدة.

اذا كانت $U_n(r)$ تمثل الدوال الاساسية فيمكن كتابة اي دالة اخرى بدلالة هذه الدوال الاساسية

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n U_n(\vec{r})$$

$U_n(\vec{r})$ تمثل المتجهات الاساسية و C_n تمثل مسقط الدالة $\psi(\vec{r})$ على $U_n(\vec{r})$.

ان مصطلح ساقط هنا غير دقيقة لذلك نسمي C_n معامل الدالة $U_n(\vec{r})$ في الدالة $\psi(\vec{r})$
ونسمي مجموعة الدوال الاساسية $U_n(\vec{r})$ بمجموعة كاملة اذا تحقق الشرط التالي

$$\lim_{m\to\infty}\left[\psi(\vec{r}) - \sum_{n=1}^{m} C_n U_n(\vec{r})\right] = 0 \qquad \text{---(9)}$$

في المحاور الديكارتية فان طول المتجه $\vec{r}$ يكتب

$$|\vec{r}| = \vec{r}\cdot\vec{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i^2$$

وسنطبق هذا في فضاء هلبرت

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx$$

ولكي تكون الدوال متعامدة في فضاء هلبرت يجب ان تكون دوالا لمؤثر هرميتي
أو نقول اذا كانت الدوال الاساسية دوالا ذاتية لمؤثر هرميتي فهي دوال متعامدة .

والان سنبرهن هذه العبارة :

نفرض الدوال الاساسية U_n هي دوال ذاتية للمؤثر الهرميتي $\hat{A}$ وهي دوال مغايرة أيضاً

$$\hat{A}\,U_n = a_n U_n \qquad \text{——(10)}$$

$$\hat{A}\,U_m = a_m U_m \qquad \text{——(11)}$$

وعلى فرض أن $a_n \neq a_m$. نضرب المعادلة (10) في U_m^*

ونأخذ التكامل على كل الفضاء

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_m^* \hat{A}\, U_n\, dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx \qquad \text{——(12)}$$

نأخذ المرافق المعقد للمعادلة (11) ونضربها من جهة اليمين بـ U_n

ثم نأخذ التكامل أيضاً

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{A}^* U_m^* U_n\, dx = a_m \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx \qquad \text{——(13)}$$

في المعادلتين (12) و (13) المؤثر $\hat{A}$ هو مؤثر هرميتي لذلك الأطراف اليسرى في المعادلتين متساوية وبالتالي تساوى الأطراف اليمنى

$$a_m \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx$$

$$(a_m - a_n) \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx = 0$$

وبالفرض أن $a_m \neq a_n$ وعليه فإن

$\int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx = 0$ أو $\int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n\, dx = \delta_{mn}$ وهذا معناه أن U_m

و U_n دوال متعامدة.

4- رموز ديراك (ملاحظات ديراك) Dirac notations

أدخل ديراك بعض الرموز الى ميكانيك الكم لتسهيل وتبسيط كتابة العلاقات الرياضية فمثلا الرمز $|\ \rangle$ للتعبير عن متجه الحالة state vector كالتالي

نكتب ψ على شكل $|\psi\rangle$ والرمز يسمى Ket كما يرمز للحالة ψ^* بالرمز $\langle\psi|$ والرمز $\langle|$ وعليه مرافق Bra

طول اي متجه يكتب $|\phi|^2 = \langle\phi|\phi\rangle$

مبدأ جمع الحالات $|\psi\rangle = \mu_1|\psi_1\rangle + \mu_2|\psi_2\rangle$

الرمز $\langle|\rangle$ يسمى Braket

التكامل على الدوال الاساسية في فضاء هلبرت $\int \psi_1^* \psi_2 \, dx = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = 1 = \langle\psi|\psi\rangle$$

أما القيمة الذاتية للمؤثر $\hat{A}$ نكتب

$$a = \langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \qquad (14)$$

تمثيل المؤثرات بدلالة الدوال الاساسية " u_i " :

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

$$c_i = \langle u_i|\phi\rangle$$

$$|\phi\rangle = \sum_i \langle u_i|\phi\rangle |u_i\rangle \quad \text{—— (15)}$$

$$= \sum_i \langle u_i|u_i\rangle |\phi\rangle$$

$$|\phi\rangle = \hat{I}\,|\phi\rangle$$

$\hat{I} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$ يسمى المؤثر Identify operator مؤثر التماثل

يمكن تمثيل مؤثر آخر مثل $\hat{A}$ بالطريقة التالية :

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = |\phi\rangle \quad \text{—(16)}$$

$$|\phi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle \quad \text{بدلالة الدالة الاساسية}$$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \text{—— (17)}$$

$$\therefore \hat{A}\,|\psi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle$$

$$= \sum_i \langle u_i|\phi\rangle |u_i\rangle \quad \text{(15) استخدمنا العلاقة}$$

(11)

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \langle u_i|\hat{A}|\psi\rangle |u_i\rangle$$ استخدمنا العلاقة (16)

$$= \sum_i \sum_j c_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle |u_i\rangle$$ استخدمنا العلاقة (17)

$$= \sum_{i,j} c_j \hat{A}_{ij} |u_i\rangle$$

$$= \sum_{i,j} \langle u_j|\psi\rangle A_{ij} |u_i\rangle$$ بالتعويض عن قيمة c_j

$$= \left[\sum_{i,j} A_{ij} |u_i\rangle\langle u_j|\right] |\psi\rangle$$

$$\therefore \quad \hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |u_i\rangle\langle u_j| \qquad \text{——(18)}$$

$$A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$$ أو أنه