الميكانيكا الكمية

مقدمة:-

إن فروع الفيزياء النظرية التي تكونت كنتيجة لتعميم النتائج التي أجريت لدراسة خواص الأحسام ذات الأبعاد الكبيرة وتأثيراتها المتبادلة وانتقالها في الفراغ تكون فيما بينها ما يعرف بالفيزياء الكلاسكية مثل ميكانيكا نيوتن – الديناميكا الهوائية والحرارية والكهرومغناطيسية ونظرية المرونه .

ظلت دراسة الفيزياء النظرية مقتصرة علي هذه الفروع حتي نهاية القرن التاسع عشر حيث أكتشفت الالكترونات والأشعاعات النشطة وأتضح قصور هذه الفروع في معالجة هذه الأجسام ذات الأبعاد الصغيرة وعندئذ بدأت الميكانيكا الموجية (الكمية) في الظهور للتعامل مع هذه الأجسام .

فعند دراسة شروط أتزان المواد والاشعاعات الكهرومغناطيسية (ماكس بلانك ١٩٠٠) وظاهرة التأثير الكهروضوئي (البرت أينشتين ١٩٠٥) أفترض أن للاشعاعات الكهرومغناطيسية الخواص المساوية بجانب خواصها الموجية وتبين أن الاشعاعات الكهرومغناطيسية تمتص وتشع في كميات متفردة تعرف باسم الفوتونات فإذا رمزنا لعدد الذبابات الكهرومغناطيسية في $2\pi\ sec$ بالرمز ω (التردد الزاوي) فان طاقة الفوتون ε تساوي

$$\varepsilon = \hbar\omega$$

حيث h مقدار ثابت وأبعاده (طاقة × زمن) والثابت العام $h = 2\pi\hbar$ يسمي ثابت بلانك . ويتحرك الفوتون في الفراغ بسرعة تساوي سرعة الضوء $c = 2.997925 \times 10^{10}\ CMs^{-1}$ وكمية حركته M عندئذ تساوي

$$M = \hbar K, \qquad M = \frac{\epsilon}{c}$$

حيث $M = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$

يطلق عليه العدد الموجي، λ طول الموجة، K المتجه الموجي .

سوف نناقش هذه المفاهيم فيما بعد.

الباب الأول

١- الحزمة الضوئية:- 1- wave packet

سوف نناقش في هذا الجزء حركة الجسيمات (مثل الالكترونات والفوتونات والنيوترونات و....) ويتطلب ذلك إلي أن نشير لبعض المفاهيم الاساسية الهامة

العلاقة بين كمية الحركة لأي جسيم وطول الموجة λ تكتب علي الصورة :-

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1.1)$$

وهذه العلاقة صحيحة بالنسبة للفوتونات والجسيمات الدقيقة ومعروفة من الناحية العملية. وحيث أن h يطلق عليه اسم الثابت العام أو ثابت بلانك $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

ولوصف سلوك الجسيمات يجب اختيار الدالة الموجية $\Psi(\vec{r},t)$ ومقدارها كبير في المناطق حيث أحتمال تأثير الجسيمات يكون كبير وتكتب الدالة الموجية في صورة مبسطة هي

$$\exp(\vec{k}.\vec{r} - \omega t) \qquad (1.2)$$

ويتضح أن طولها الموجي $\lambda = \frac{2\pi}{\vec{k}}$ وتتحرك في أتجاه المتجه الموجي $\vec{k}$ بواسطة السرعة الثابته $\frac{\omega}{k}$.

اذا وصفنا انتشار الموجة التي يكون ترددها ω منسوبة إلي الطاقة الكلية E للجسيم بالمعادلة الأتية:-

$$E = \hbar\omega \qquad (1.3)$$

ولكن من تعريف العدد الموجي k اذن كمية الحركة هي عبارة عن حاصل ضرب العدد الموجي في الثابت العام $p = \hbar k$ او في صورة أتجاهية

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (1.4)$$

سوف نقتصر المناقشة الأن في حالة بعد واحد وسوف نكون الحزمة الموجية بواسطة انطباق المواضع للموجات المستوية وتوصف رياضيا علي الصورة:-

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp[i(kx - \omega t)]\, dk \qquad (1.5)$$

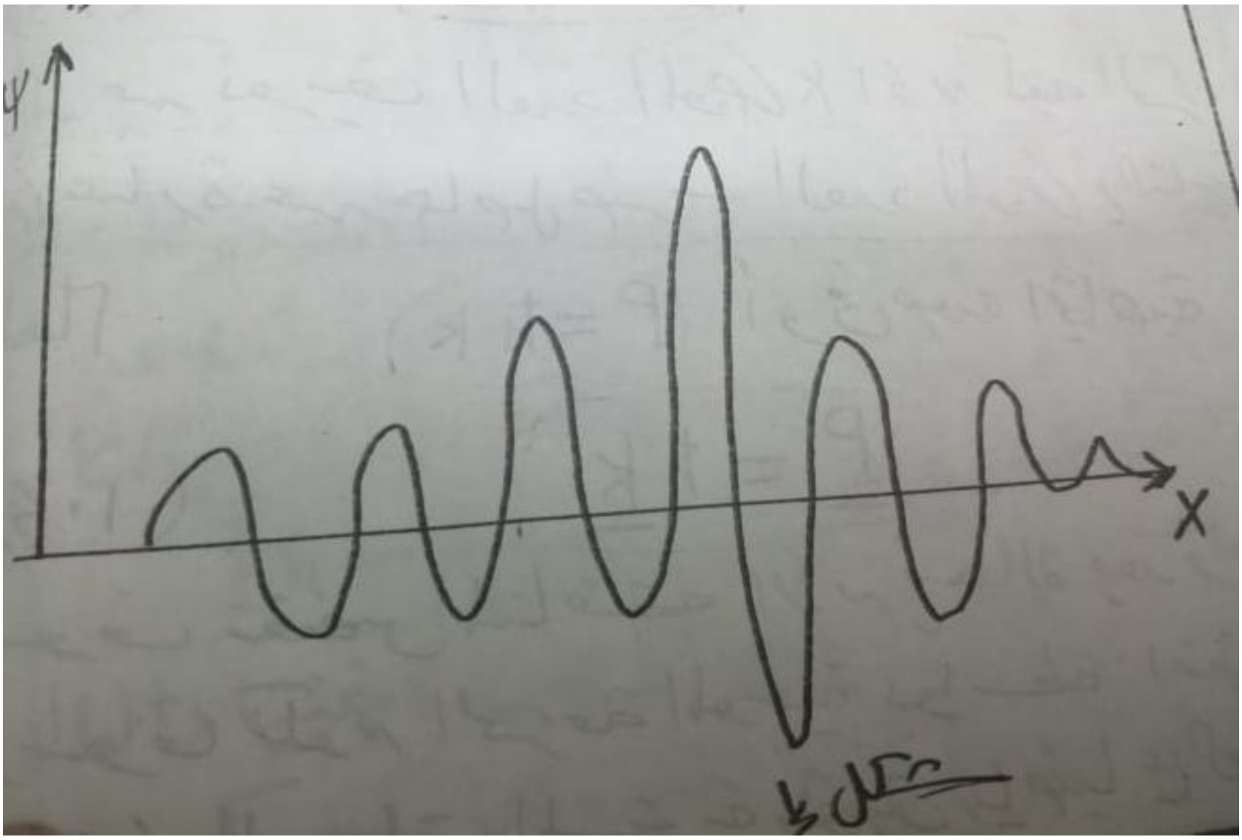
والتحويل العكسي يعطي بالعلاقة

$$A(k) \exp(-i\omega t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \exp[(-ikx)]\, dx \qquad (1.6)$$

or

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \exp[-i(kx - \omega t)] dx \qquad (1.7)$$

الصورة المطابقة للحزمة الموجية موضحة في شكل (١)



ونلاحظ في المعادلة (1.7) أن الزمن t لا يظهر إلا في الطرف الأيمن وأن $A(k)$ لا تعتمد صراحة علي الزمن . لذلك

$$\frac{\partial A(k)}{\partial t} = 0 \qquad (1.8)$$

وبذلك ينتج أن

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{\frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\omega\Psi\} \exp[-i(kx - \omega t)]dx = 0$$

وهذه العلاقة صحيحة لجميع قيم Ψ

ومنها نحصل علي

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\omega\Psi = 0 \qquad (1.9)$$

٢- معادلة شرودنجر في بعد واحد

2- The one- dimensional Schrodinger equation

نستخدم المعادلتان (1.3),(1.4) *ونكتب المعادلة* (1.5) *علي الصورة*

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} a(p) \exp[i \ (px - Et)/\hbar]\, dp \qquad (1.10)$$

ونعبر عن السعه $a(p)$ التي تناظر كمية الحركة p بالعلاقة المتامثلة :

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \exp[-i \ (px - Et)/\hbar]\, dx \qquad (1.11)$$

وفي حالة الجسيم الحر يعبر عن الطاقة الكلية بدلالة كمية الحركة فقط بالصيغة التالية :

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad (1.12)$$

بالتفاضل المتتالي للمعادلة (1.10) نحصل علي العلاقات الاتية:-

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}E\ a(p)\exp[i\ \ (px-Et)/\hbar]\,dp \qquad (1.13)$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}p\ a(p)\exp[i\ \ (px-Et)/\hbar]\,dp \qquad (1.14)$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}p^2\ a(p)\exp[i\ \ (px-Et)/\hbar]\,dp \qquad (1.15)$$

وباستخدام المعادلة (1.12) نحصل علي

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \qquad (1.16)$$

وتسمي هذه المعادلة بمعادلة شرودنجر في بعد واحد بالنسبة للجسيم الحر. بالاضافة إلي ذلك بالنسبة للموجة المستوية

$$\Psi=\exp[(px-Et)/\hbar] \qquad (1.17)$$

And

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=E\Psi \qquad (1.18)$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}=P\Psi \qquad (1.19)$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=p^2\Psi \qquad (1.20)$$

المعادلات السابقة تتحقق فقط في حالة الجسيم الحر. يمكن التعبير عن الطاقة وكمية الحركة بدلالة المؤثرات التفاضلية التي تؤثر علي الدالة الموجية Ψ :-

$$E\rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\qquad ,p\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad (1.21)$$

Extension to three dimensions

سبق تعريف الحزمة الموجية في بعد واحد. والان نعبر عن الحزمة الموجية في ثلاث ابعاد بالعلاقات التالية:-

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} A(\vec{k}) \exp[i\,(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)]\, d^3 k \qquad (1.22)$$

حيث $d^3k = dk_x dk_y dk_z$ تمثل عنصر الحجم في فراغ $\vec{k}$

وطبقا للمعادلات (1.10), (1.11), (1.12),(1.13),(1.14),(1.15),(1.16)
يمكن تطويرها إلي المعادلات الاتيه في حالة الثلاث أبعاد علي الترتيب:-

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} a(p) \exp[i(\vec{p}.\vec{r} - Et)/\hbar]\, d^3 p \qquad (1.23)$$

Where $d^3p = dp_x dp_y dp_z$ represent the volume element in the momentum space.

$$a(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \Psi(\vec{r},t) \exp[-i(\vec{p}.\vec{r} - Et)/\hbar]\, d^3 r \qquad (1.24)$$

Where $d^3r = dx\,dy\,dz$ represent the volume element in the coordinate space.

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left({p_x}^2 + {p_y}^2 + {p_z}^2\right) \qquad (1.25)$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} E\, a(p) \exp[i(\vec{p}.\vec{r} - Et)/\hbar]\, d^3 r \qquad (1.26)$$

$$-i\hbar\nabla\Psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} p\, a(p) \exp[i(\vec{p}.\vec{r} - Et)/\hbar]\, d^3 p \qquad (1.27)$$

$$-\hbar^2\nabla^2\Psi$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} p^2\, a(p) \exp[i(\vec{p}.\vec{r} - Et)/\hbar]\, d^3 p \qquad (1.28)$$

And

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \qquad (1.29)$$

وهذه هي معادلة شرودنجر للجسيم الحر في ثلاث أبعاد. وبالمثل يمكن الحصول المؤثرات التفاضلية للطاقة وكمية الحركة في حالة الثلاث ابعاد.

$$E \to i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad , p \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad (1.30)$$

وسبق الحصول علي معادلة شرودنجر بالنسبة للجسيم الحر في حالة ثلاث أبعاد.

وإذا اثرت قوة خارجية علي حركة الحسيم فما هي معادلة شرودنجر في وجود القوة الخارجية ؟

نفرض أن القوة الخارجية $\vec{F}$ تشتق من دالة الجهد $V(\vec{r}, t)$ علي الصورة

$$\vec{F} = -\nabla V(\vec{r}, t) \qquad (1.31)$$

اذن الطاقة الكلية يعبر عنها حركة الجسيم مضافا اليها دالة الجهد علي النحو التالي

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \qquad (1.32)$$

وباستخدام المعادلات (1.26),(1.28),(1.32) نحصل علي

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) \qquad (1.33)$$

ويطلق علي هذه المعادلة بمعادلة شرودنحر لوصف حركة الجسيم في مجال القوة (1.31).

المعنى الفيزيائى للدالة الموجية Ψ وشرط المعايرة

لدراسة *الدالة الموجية* $\Psi(\vec{r},t)$ (وصف سلوك الجسيم) مقدارها يكون كبير في المناطق حيث احتمال تاثير الجسيم يكون كبير. بينما في مناطق اخري يكون احتمال تاثير الجسيم يكون صغير وبالتالي مقدار Ψ صغير.

ولهذا فان الدالة الموجية تدخل في عملية قياس احتمال وجود الجسيم حول الموضع الخاص. ويجب أن يكون الاحتمال الحقيقي . بينما $\underline{\Psi}$ دالة مركبة عموما.

وعلي ذلك يمكن تعريف كثافة الاحتمال $p(\vec{r},t)$ بانها حاصل ضرب الدالة الموجية Ψ *في المرافق لهذه الدالة* Ψ^* :-

$$p(\vec{r},t) = \Psi\Psi^* = \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 \qquad (1.34)$$

المعني الفيزيائي $p\ dxdydz$ *هذا يعني أن أحتمال وجود جسيمات في عنصر الحجم* $dxdydz$ *حول النقطة* $\vec{r}$ *عندالفترة الزمنية* t $[\ \vec{r}+\ d\vec{r}\ ]$

وشرط احتمال وجود الحسيم في أي منطقة يجب أن تكون الوحدة. أي أن

$$\iiint \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = 1 \qquad (1.35)$$

حيث d^3r *تمثل عنصر الحجم في ثلاث أبعاد* $dxdydz$.

ويطلق علي المعادلة (1.35) اسم شرط المعايرة وتسمي الدالة Ψ *في هذه الحالة الدالة المتطبعة.*

ويتضح أن المعامل العددي للدالة المتطبعة Ψ *لا تعتمد علي الزمن وهذه الدالة تحقق معادلة شرودنجر (1.33) ولاثبات صحة هذا نتبع الاتي:-*

نكتب المعادلة (1.33)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi \qquad (1.36)$$

ومرافق هذه المعادلة هي

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V\Psi^* \qquad (1.37)$$

وبضرب طرفي المعادلة (1.36) من ناحية اليسار في Ψ^* والمعادلة (1.37) في Ψ ثم الطرح نحصل علي

$$i\hbar\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right]=\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right]\qquad(1.38)$$

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

ومن السهل كتابة المعادلة (1.38) *في الصورة التالية*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*)+\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}.(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)=0$$

Or

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+div\,\vec{j}=0\qquad(1.39)$$

Where

$$\rho=\Psi\Psi^*\qquad(1.40)$$

$$div\,\vec{j}=\vec{\nabla}.\vec{j}=\frac{\partial j_x}{\partial x}+\frac{\partial j_y}{\partial y}+\frac{\partial j_z}{\partial z}\qquad(1.41)$$

$$j_x=\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}-\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]$$

$$j_y=\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial y}-\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right]$$

$$j_z=\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial z}-\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right]$$

Thus, we may write

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)\qquad(1.43)$$

الان المشتقة الاولي لتكامل كثافة الاحتمال $p(\vec{r},t)$ علي كل الفراغ نجد أن

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \Psi\Psi^*\, d^3r = \int \frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*)\, d^3r = -\int div\,\vec{\mathrm{j}}\, d^3r$$

$$= -\int \vec{\mathrm{j}}.\vec{\mathrm{n}}\ ds = -\int j_n\ ds \qquad (1.44)$$

نلاحظ في الخطوة الاخيرة استخدمنا نظرية جاوس واستبدال التكامل الحجمي إلي سطحي، n ترمز إلي متجه الوحدة العمودي علي السطح واتجاه إلي خارج السطح و j_n ترمز الي المركبة العمودية للمتجه $\vec{\mathrm{j}}$. ويتضح أن الدالة الموجية Ψ تنعدم عند الانهاية فان التكامل السطحي ينعدم وبذلك فان الحزمة الموجية

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 = 0 \qquad (1.45)$$

وهذا يفسر أن معامل الدالة Ψ المتطبعة لا يعتمد علي الزمن

كثافة احتمال التيار:-

يطلق علي المعادلة (1.39) بمعادلة الاستمرار في الالكتروديناميكا الكلاسكية. والتفسير الفيزيائي لهذه المعادلة عندما عندما نعتبر حركة غاز بكثافة ρ التي تمثل عدد الجسيمات وحدة الحجم ، $\vec{\mathrm{j}}$ تمثل كثافة التيار . ولهذا فان

$$\rho = \Psi\Psi^* \qquad (1.46)$$

ويطلق عليها اسم كثافة احتمال الشحنة ،

$$\vec{\mathrm{j}} = \frac{i\hbar}{2m}\ (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) \qquad (1.47)$$

$$= real\ par\ of\ \left[\Psi^*\frac{\hbar}{im}\vec{\nabla}\,\Psi\right] \qquad (1.48)$$

وهي تمثل كثافة احتمال التيار

Ex.1

Consider the plane wave $\Psi(\vec{r},t) = \exp[i(\vec{p}.\vec{r} - Et)/\hbar]$

The current density for which is given by

$$\vec{J}$$
$$= real\ par\ of \{\exp[-i(\vec{p}.\vec{r}-Et)/\hbar]\frac{\hbar}{im}.\frac{i}{\hbar}\ \vec{p}\exp[i(\vec{p}.\vec{r}-Et)/\hbar]\}$$
$$=\frac{\vec{p}}{m}=V \qquad (1.49)$$

<u>٦- القيم المتوسطة للكميات الفيزيائية:-</u>

<u>Expectation values of dynamical quantities: -</u>

لحساب القيمة المتوسطة للاحداثيات في المنزلة الموصوفة بالدالة الموجية Ψ .
ونعلم أن كثافة احتمال القيم المحددة لمتجه موضع الجسيمات $\vec{p}$ بدلالة الدالة الموجية Ψ هي :

$$\vec{p}=\Psi(\vec{r},t)\Psi^{*}(r,t)$$

والان نكتب القيمة المتوسطة للمتجه $\vec{r}$ علي الصورة :-

$$<\vec{r}>=\frac{\int\vec{r}\,\Psi^{*}(r,t)\Psi(\vec{r},t)\ d^{3}r}{\Psi^{*}(r,t)\Psi(\vec{r},t)d^{3}r} \qquad (1.50)$$

واذا كانت Ψ *متطبعة وطبقا للمعادلة (1.35) فان المعادلة (1.50) تصبح*

$$<\vec{r}>=\int\Psi^{*}(r,t)\ \vec{r}\ \Psi(\vec{r},t)\ d^{3}r \qquad (1.51)$$

وهذه تكافي ثلاث معادلات التالية:-

$$<x>=\int\Psi^{*}(r,t)\ x\ \Psi(\vec{r},t)\ d^{3}r$$

$$<y>=\int\Psi^{*}(r,t)\ y\ \Psi(\vec{r},t)\ d^{3}r$$

$$<z>=\int\Psi^{*}(r,t)\ z\ \Psi(\vec{r},t)\ d^{3}r$$

وفي الحالة العامة. القيمة المتوسطة لاي دالة $f(\vec{r})$ وتكون دالة في الاحداثيات تاخذ الصورة :-

$$< f(\vec{r}) >= \int \Psi^*(r,t)\, f(\vec{r})\, \Psi(\vec{r},t)\, d^3r \qquad (1.53)$$

ومن ثم فان القيمة المتوسطة لطاقة الجهد تاخذ الصورة

$$< V >= \int \Psi^*(r,t)\, V\, \Psi(\vec{r},t)\, d^3r \qquad (1.54)$$

وبالرجوع إلي الميكانيكا الكلاسكية تكون الطاقة الكلية هي عبارة عن مجموع طاقتي الحركة والجهد وعندما نعبر عن القيمة المتوسطة للطاقة الكلية تأخذ الصورة:-

$$< E > =< \frac{p^2}{2m} > +< V > \qquad (1.55)$$

وباستخدام المؤثرات التفاضلية بالنسبة للطاقة وكمية الحركة تصبح المعادلة (1.55)

$$< i\hbar \frac{\partial}{\partial t} > = < \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 > +< V > \qquad (1.56)$$

وبضرب طرفي معادلة شرودنجر (1.33) من ناحية اليسار بالدالة Ψ^* ثم اجراء التكامل بالنسبة لكل الفراغ. نجد ان

$$\int \Psi^* i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}\, d^3r = \int \Psi^* (\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi)\, d^3r + \int \Psi^* V\, \Psi\, d^3r \quad (1.57)$$

ومن ثم يمكن تعريف القيمة المتوسطة بالنسبة للطاقة الكلية باستخدام المؤثر التفاضلي علي النحو التالي:-

$$< E > = \int \Psi^* i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}\, d^3r \qquad (1.58)$$

وكذلك بالنسبة لكمية الحركة.

$$< p > = \int \Psi^* (-i\hbar)\, \vec{\nabla}\, \Psi d^3r \qquad (1.59)$$

وهذه المعادلة تكافي ثلاث معادلات علي النحو التالي :-

$$< p_x > = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial x}\; d^3r$$

$$< p_y > = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial y}\; d^3r$$

$$< p_x > = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial z}\; d^3r$$

بالنسبة للحزمة الموجية في بعد واحد (1.10) :

$$< p > = \; -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\; dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{\hbar}\; p\; a(p) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] dp dx \qquad (1.61)$$

$$a^*(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px \;\; - Et)\right] dx \qquad (1.62)$$

Thus

$$< p > = \int_{-\infty}^{\infty} a^*(p)\; p\; a(p)\; dp = \int_{-\infty}^{\infty} p\; |a(p)|^2\; dp \qquad (1.63)$$

إذا قارنا المعادلة (1.63) مع (1.52) . والمقدار $|a(p)|^2$ يمثل الاحتمال بالنسبة لكمية الحركة التي تقع بين $p, p + dp$ ومن السهل أن نثبت أن

$$< p^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} p^2\; |a(p)|^2\; dp \qquad (1.64)$$

وعلي ذلك من نظرية برسفل (Parseval's theorem)

$$\int_{-\infty}^{\infty} p^2\; |a(p)|^2\; dp \;\; = 1 \qquad (1.65)$$

التي تشابه شرط المعايرة ومن السهل الان التعبير عن القيمة المتوسطة لكمية الحركة في حالة الثلاث الابعاد:

$$< p > = \int_{-\infty}^{\infty} a^*(p)\, p\, a(p)\, d^3p \qquad (1.66)$$

وعادة نشير $a(p)$ إلي شكل الدالة الموجية في فراغ كمية الحركة و $\Psi(\vec{r})$ تشير ألي شكل الدالة الموجية في فراغ الاحداثيات.

نظرية ارنفست: Ehrenfest's theorem

الان سوف نثبت العلاقة

$$\frac{d}{dt} < x > = \frac{1}{m} < p_x > \qquad (1.67)$$

لاثبات هذه العلاقة نتبع الاتي: أذا كانت متجهات الموضع وكمية الحركة للحزمة الموجية التي يمكن تفسيرها في صورة القيم المتوسطة لهذه المتابينة، اذن ميكانيكا الكم تتفق مع الميكانيكا الكلاسكية. الان

$$\frac{d}{dt} < x > = \frac{d}{dt} \int \Psi^*(r,t)\, x\, \Psi(\vec{r},t)\, d^3r$$
$$= \int \Psi^*\, x\, \frac{\partial \Psi}{\partial t} d^3r + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\, x\, \Psi\, d^3r$$

إذا استخدمنا المعادلتان (1.36), (1.37) نحصل علي

$$\frac{d}{dt} < x > = \frac{1}{i\,\hbar}\left[\int \Psi^*\, x \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi\right) d^3r \right.$$
$$\left. - \int \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V\Psi^*\right) x\, \Psi\, d^3r\right]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int [\Psi^*\, x\nabla^2\Psi - (\nabla^2\Psi^*)\, x\, \Psi] d^3r \qquad (1.68)$$

Now,

$$\int (\nabla^2\Psi^*)x\,\Psi\, d^3r$$
$$= \int [div(x\,\Psi\,\nabla\Psi^*)]d^3r$$
$$- \int \left(\nabla\Psi^*\right).\nabla\left(x\,\Psi\right)d^3r \qquad (1.69)$$

التكامل الاول في الطرف الايمن في هذه المعادلة يمكن تحويلها الي تكامل سطحي باستخدام نظرية جاوس . أي ان

$\int (x\,\Psi\,\nabla\Psi^*)_n\, ds$ أي ان ds عنصر من السطح ، $()_n$ ترمز الي المركبة العمودية واتجاه خارج السطح وهذا التكامل يؤول الي الصفر لان الحزمة الموجية تنعدم عند الانهاية . اذن

$$\int (\nabla^2\Psi^*)x\,\Psi\, d^3r = -\int \left(\nabla\Psi^*\right).\nabla\left(x\,\Psi\right)d^3r$$

$$= -[\int div(\Psi^*.\nabla(x\Psi))d^3r - \int \Psi^*\,\nabla^2(x\Psi)d^3r]$$

ومرة اخري يمكن تحويل التكامل الاول في الطرف الايمن في هذه العلاقة من تكامل حجمي الي تكامل سطحي . والتكامل السطحي ينعدم كما سبق ولهذا فان

$$\int (\nabla^2\Psi^*)x\,\Psi\, d^3r = \int \Psi^*\,\nabla^2(x\Psi)d^3r \qquad (1.70)$$

وبالتعويض بهذه النتيجة في المعادلة (1.68) نحصل علي

$$\frac{d}{dt} < x > = \frac{i\hbar}{2m}\int [\Psi^*\{x\,\nabla^2\Psi - \nabla^2\left(x\Psi\right)\}]d^3r$$
$$= -\frac{i\hbar}{m}\int \Psi^*\,\frac{\partial\Psi}{\partial x}d^3r = \frac{1}{m} < p_x > \qquad (1.71)$$

بما أن $< x >$ دائما تكون عدد حقيقي وبالتالي $< p_x >$ يجب أن تكون حقيقي

وبنفس الطريقة يمكن اثبات أن

$$\frac{d}{dt} < p_x > = < \frac{-\partial V}{\partial x} >$$

الاثبات

$$\frac{d}{dt} < p_x > = -i\hbar \frac{d}{dt} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} d^3r$$

$$= -i\hbar \int [\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} d^3r + \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} d^3r]$$

$$= [\int \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V\Psi^*\right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} d^3r - \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi) d^3r]$$

$$= \int \Psi^* \left[V \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (V\Psi) d^3r\right]$$

$$= -\int \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \Psi \, d^3r = < \frac{-\partial V}{\partial x} >$$

Eqs. (1.71) and (1.72) along with their other components constitute Ehrenfest's theorem.

في الميكانيكا الكلاسكية نجد أن معادلات الحركة هي:-

$$\frac{d}{dt} \vec{r} = \frac{1}{m} \vec{p} \qquad ; \qquad \frac{d}{dt} \vec{p} = \vec{F} = -\nabla V \qquad (1.73)$$

<u>علاقة عدم التحديد بالنسبة للحزمة الموجية</u>

The uncertainly principle for wave packets

من المعروف في ميكانيكا الكم أن الكميات الفيزيائية تتحدد بقيمتها المتوسطة كما أنه من المعروف أيضا أن الكميات الفيزيائية المقابلة لمؤثرات غير متبادلة لا يمكن حسابها بدقة في وقت واحد لذا يحب البحث عن مدي أنحراف القيم المتوسطة للكميات الفيزيائية . فاذا كان انحراف الكمية f عن متوسطها Δf هو أي أن

$$\Delta f = f - < f >$$

والمؤثر الهرميني المناظر لها هو

$$\Delta f^* = f^* - < f^* >$$

فان متوسطي الانحراف ومربعه يساوي علي الترتيب.

$$< \Delta f > = \int \Psi^{*} (f - < f >) \Psi \; d^3 r = 0 \qquad (1.74)$$

$$< (\Delta f)^2 > = \int \Psi^{*} \; (\Delta f)^2 \; \Psi \; d^3 r = < f^2 > - < f >^2 \qquad (1.75)$$

ومن السهل الان التعبير عن مربعي انحراف p , x بالعلاقات التالية

$$\Delta x = < (x - < x >)^2 >^{\frac{1}{2}} = [< x^2 > - < x >^2]^{\frac{1}{2}}$$

$$\Delta p = < (p - < p >)^2 >^{\frac{1}{2}} = [< p^2 > - < p >^2]^{\frac{1}{2}} \qquad (1.76)$$

We must remember that (see Eqs .(1.52)→ (1.60))

$$< x > = \int \Psi^{*}(r,t) \; x \; \Psi(r,t) d^3 r \qquad (1.77)$$

$$< x^2 > = \int \Psi^{*}(r,t) \; x^2 \; \Psi(r,t) d^3 r \qquad (1.78)$$

$$< p > = \int \Psi^{*}(r,t) \; p \; \Psi(r,t) d^3 r$$

$$= -i\hbar \int \Psi^{*} \frac{\partial \Psi}{\partial x} d^3 r \qquad (1.79)$$

$$< p^2 > = \int \Psi^{*}(r,t) \; p^2 \; \Psi(r,t) d^3 r$$

$$= -\hbar^2 \int \Psi^{*} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} d^3 r \qquad (1.80)$$

ولاثبات علاقة عدم التحديد الاساسية وتشتق من المتباينة

$$\int u^* u \; d^3 r \int s^* s \; d^3 r \; \geq \; \frac{1}{4} \left[\int (u^* s + s^* u) d^3 r \right]^2 d^3 r \qquad (1.81)$$

حيث دوال دورية. ولاثبات هذه المتباينة يجب اولا أن نعرف ثلاث تكاملات

$$A = \int u^* u \; d^3 r \quad , B = \int u^* s \; d^3 r \, , \quad C = \int s^* s \; d^3 r \qquad (1.82)$$

الخطوة التالية . نعتبر التكامل

$$\int (\lambda u^* + s^*)(\lambda u + s) d^3r = A\lambda^2 + (B + B^*)\lambda + C \qquad (1.83)$$

حيث λ بارامتر. بفرض أن قيمته حقيقيه .

والتكامل علي الطرف الايسر من هذه المعادلة تكون موجبة ولهذا نجد أن

$$A\lambda^2 + (B + B^*)\lambda + C > 0 \qquad (1.84)$$

بالنسبة لجميع قيم λ . فان المعادلة $A\lambda^2 + (B + B^*)\lambda + C = 0$

Can't have any real any roots and therefore we must have

$$AC \geq \frac{1}{4}(B + B^*)^2 \qquad (1.85)$$

بالتعويض عن A,B,C من (1.82) في (1.85) نحصل علي المتابينة (1.81)

والان سوف نثبت علاقة عدم التحديد الاساسية بالنسبة للدالة الموجية التي تجعل p=0 , x=0 وبادخال الدوال الدورية الاتية

$$u = p\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \qquad (1.86)$$

And

$$s = ix\Psi \qquad (1.87)$$

Eq.(1.81) then yields

$$\int (i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial x})(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x})\, d^3r \int (-i\, x\Psi^*)(i\, x\, \Psi)\, d^3r$$
$$\geq \frac{1}{4}\left[\int \left\{i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\, i\, x\, \Psi - i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}(-i\, x\, \Psi^*)\right\}\right]^2$$

Or

$$\int \hbar^2 \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\ d^3r \int \Psi^*\, x^2\, \Psi\ d^3r \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\left[-\int \frac{\partial}{\partial x}(\Psi^* \, x \, \Psi) \, d^3r + \int \Psi^* \;\; \Psi \;\; d^3r\right]^2 \qquad (1.88)$$

Now

$$\hbar^2 \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \, \frac{\partial \Psi}{\partial x} \;\; d^3r = \hbar^2 \iint dy \, dz \; \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \; dx$$

$$= \hbar^2 \iint dy \, dz \, [\, \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \; dx] = \int \Psi^* (-\hbar^2 \, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}) \;\; d^3r$$

يلاحظ أن المقدار $\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ ينعدم عندما $x = \pm\infty$ ولهذا فان

$$\hbar^2 \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \, \frac{\partial \Psi}{\partial x} \;\; d^3r = \int \Psi^* \, p^2 \, \Psi \;\; d^3r = < \; p^2 \; >$$

عندما $< p >$ و $< x >$ لا تنعدم سوف نستخدم الدوال

$$U = (p - < p >)\Psi$$

And

$$S = i \; (x - < x >)\Psi$$

وبالمثل نجد أن

$$\int \frac{\partial}{\partial x}(\Psi^* \; x \; \Psi \;) \;\; d^3r = 0$$

وفي النهاية نحصل من المعادلة (1.88) علي العلاقة الهامة التالية

$$< \; p^2 >< \; x^2 \; > \geq \; \frac{\hbar^2}{4} \qquad (1.89)$$

Or

$$\Delta p \; \Delta x \geq \; \frac{\hbar}{2} \qquad (1.90)$$

هذه هي علاقة عدم التحديد لهيزنبرج

مسائل محلولة

١- باستخدام مؤثر كمية الحركة p اثبت أن $(xp - px)\Psi = i\hbar\Psi$ حيث Ψ دوال اختيارية.

$$(xp - px)\Psi = -i\hbar(x\ \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\ x)\Psi$$

$$= -i\hbar\left[x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\right]$$

$$= i\hbar\Psi \qquad (1)$$

وسوف نرمز إلي التأثير المتبادل بين المؤثرين A,B بالرمز

$$[A, B] = AB - BA = -[B, A]$$

وبذلك يمكن تعريف المؤثرات المتبادلة علي النحو التالي

$$[A, B]\Psi = 0$$

ومن امثلة المؤثرات المتبادلة مثل الاحداثيات (x ,y ,z) وكذلك مركبات كمية الحركة

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad , \qquad p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad , \quad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

وكذلك يمكن التعبير عن المؤثرات الفيزيائية الغير متبادلة ونكتب علي الصورة :-

$$[A, B]\Psi = i\ D\Psi$$

حيث D مؤثر هرميتي ايضا.

ومن أمثلة المؤثرات الفيزيائية الغير متبادلة هي x, p_x مثلا وبذلك تصبح المعادلة *(1)* كالاتي

$$(xp - px) = [x, p] = i\hbar \qquad (2)$$

٢- أثبت أن المؤثرات الغيرالمتبادلة بين x^n, p_x يمكن وضعها علي الصورة

$$[x^n, p_x] = n\, i\hbar\, x^{n-1} \qquad (3)$$

من المعادلة (٢) نجد أن $[x,p] = i\hbar$

$$x^2p - px^2 = x(px + i\hbar) - px^2$$

$$= (px + i\hbar)x + i\hbar x - px^2 = 2i\hbar x$$

وبتكرار نفس العملية نحصل علي $x^np - px^n = ni\hbar x^{n-1}$

وكذلك يمكن أثبات ان اي دالة $f(\vec{r})$ التي تعتمد علي الاحداثيات (x ,y, z) تحقق العلاقة التالية

$$[f(\vec{r}), p] = i\hbar \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x} \qquad (4)$$

<u>الاثبات</u>

نختار أي دالة أختيارية ولتكن $g(\vec{r})$ اذن

$$[f(\vec{r}), p]\, g(\vec{r}) = -i\hbar\, (f(\vec{r})\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\, f(\vec{r}))g(\vec{r})$$

$$= -i\hbar\, (f(\vec{r})\frac{\partial g(\vec{r})}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(f(\vec{r})g(\vec{r}))$$

$$= \left(i\hbar\, \frac{\partial f}{\partial x}\right) g(\vec{r})$$

وبما أن دالة أختيارية. اذن نحصل علي المطلوب وايضا يمكن اثبات صحة العلاقة التالية

$$[f(\vec{r}), p] = i\hbar(p\, \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x}\, p)$$

$$= 2\, i\, \hbar \left(\frac{\partial f}{\partial x}\, p + \hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) \qquad (5)$$

٣- أثبت أن للجسيمات الحرة الغيرنسبية اذا كانت الدالة الموجية معرفة عند $t = 0$
فان الدالة الموجية عند أي زمن اختياري t تأخذ الصورة

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\acute{x},0)\, K(\acute{x},x,t)\, d\acute{x} \qquad (6)$$

Where

$$K(\acute{x},x,t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left[i(x-\acute{x})^2 \frac{m}{2\hbar t}\right] \qquad (7)$$

بالنسبة للجسيمات الحرة الغير نسبية $E = \frac{p^2}{2m}$

بالتعويض عن E في المعادلة *(1.10)* نجد أن

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} a(p) \exp[\frac{i}{\hbar}\ (px - \frac{p^2}{2m} t] dp$$

بالاستعانه بالمعادلة (1.11) نجد *أن*

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) \exp\left[\frac{-i}{\hbar}\ px\right] dx$$

Thus

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\acute{x},0)\ \mathrm{K}\ (\acute{x},\mathrm{x},\mathrm{t}) d\acute{x}$$

Where

$$\mathrm{K}\ (\acute{x},\mathrm{x},\mathrm{t}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[\frac{i\ p(x-\acute{x})}{\hbar} - \frac{ip^2 t}{2m\hbar}] dp$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp[i(x-\acute{x})^2 m/2\,\hbar t]$$

وفي هذه الحالة استخدمنا تكامل جاوس

٤- أثبت أن (9) $\frac{d}{dt}\left(\vec{M}\right) =< \vec{L} >$

حيث $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}$ هي عزم كمية الحركة، $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{F} = \vec{r}\wedge(-\nabla V)$ هي عزم القوة حول النقطة الاصل وكذلك أثبت أنه بالنسبة للحزمة الموجية في ثلاث ابعاد

الباب الثاني

الحلول البسيطة لمعادلة شرودنجر

Simple solutions of Schrodinger Equation

١- المنازل المستقرة: - Stationary states

عندما تكون دالة هاميلتون للمجموعة لا تعتمد على الزمن يمكن تبسيط الحل العام لمعادلة شردونجر ويعبر عنها بحاصل ضرب دالتين ، احدهما دالة في الاحداثيات والأخرى دالة في الزمن ، وسوف نبدأ بالمعادلة المعتمدة على الزمن

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\underline{r})\psi \qquad (2.1)$$

بفرض أن طاقة الجهد V ، دالة لا تعتمد على الزمن ، نفرض أن الحل على الصورة

$$\psi(\underline{r},t) = f(t)\psi(\underline{r}) \qquad (2.2)$$

وبالتعويض في المعادلة (1.2) والقسمة على $f\psi$ نجد أن

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\underline{r})\psi\right) \qquad (2.3)$$

نلاحظ أن الطرف الأيسر من المعادلة (2.3) تكون دالة في الزمن فقط بينما الطرف الأيمن تكون دالة الفراغ فقط وكل منهما يساوي مقدار ثابت وليكن E مثلا أي أن

$$f(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

$$and \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\underline{r}) + V(\underline{r})\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \qquad (2.4)$$

وبكتب الحل على الصورة :

$$\psi(\underline{r},t) = \psi(\underline{r})e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \qquad (2.5)$$

وتكون كثافة الاحتمال

$$\rho = |\psi(\underline{r},t)|^2 = |\psi(\underline{r})|^2 \qquad (2.6)$$

المعادلة (2.6) تبين أن كثافة الاحتمال لا تعتمد على الزمن، وأكثر من ذلك المعادلة (2.4) يمكن كتابتها على الصورة

$$H\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r}) \qquad (2.7)$$

حيث H هو مؤشر هاميلتون و E هو عدد.

المعادلة(2.7) هي معادلة العدد المميز اذن E هو العدد المميز ، الدالة الموجية (2.5) وكثافة الاحتمال تكون لا تعتمد على الزمن. تعرف المنازل في هذه الحالة بالمنازل المستقرة

بالنسبة للمنازل المستقرة الدالة الموجية $\psi(\underline{r})$ لا تعتمد على الزمن تحقق المعادلة :

$$\nabla^2\psi(\underline{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(\underline{r})\big)\psi(\underline{r}) = 0 \qquad (2.8)$$

المعادلة (2.8) تسمى بمعادلة شرودنجر التي لا تعتمد على الزمن

٢ - مسائل في بعد واحد One-dimensional problems

ابسط المسائل عندما يكون طاقة الجهد للجسيم يعتمد على احداثي واحد فقط وليكن X مثلا وفي هذه الحالة يمكن التعبير عن طاقة الجهد في صورة مجموع

$$V(x, y, x) = V_1(x) + V_2(y) + V_3\,(z) \qquad (2.9)$$

وتصبح معادلة شرودنجر (2.8) :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_{\,1} - V_{\,2} - V_{\,3})\,\psi = 0 \qquad (2.10)$$

$$\psi(x, y, x) = \psi_1(x) + \psi_2(y) + \psi_3\,(z) \qquad (2.11)$$

ويمكن فصل المعادلة (2.10) الى ثلاث معادلات

$$\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1(x))\psi_1(X) = 0 \qquad (2.12)$$

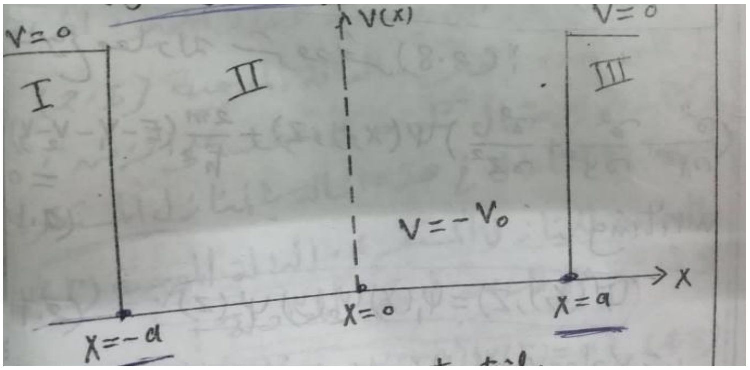
$$\frac{\partial^2\psi_2(y)}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2(y))\psi_2(y) = 0 \qquad (2.13)$$

$$\frac{\partial^2\psi_3\,(z)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_3\,(z))\psi_3\,(z) = 0 \qquad (2.14)$$

مع اعتبار أن الطاقة :

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \qquad (2.15)$$

وهذا يتضح أن كل معادلة تحتوي على بعد واحد فقط وأبسط مثال نعتبر البعد البئري شكل ٢



$$\begin{cases} V(x) = -V_0 \ for \quad -a < x < a \\ V(x) = 0 \quad for \quad |x| > 0 \end{cases} \qquad (2.16)$$

بكتابة معادلة شرودنجر على الصورة

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\psi(x) = 0 \qquad (2.17)\ inside\ the\ wall$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = 0 \qquad (2.17)\ outside\ the\ wall$$

وسوف ننظر الى حلول هذين المعادلتين عندما $E < 0$ ونتوقع حركة الجسيم الموجود في المنطقة $|x| < a$ ومن ثم نجد أن:

$$\psi_I = A\exp(Kx) \quad ,x < -a \qquad (2.18)$$

$$\psi_{IL} = B\sin kx + C\cos Kx, \quad -a < x < a \qquad (2.19)$$

$$\psi_{III} = D\exp(-kx) \quad ,x > a \qquad (2.20)$$

في المعادلتين (2.18) و (2.19) قد أهمل الحل $exp(k|x|)$ حيث يتباعد الحل بالنسبة للقيم الكبيرة ل $|x|$ وهذا يكون مخالف للشروط الحدية بمساواة $\psi_{(x)}$ و $\frac{d\psi}{dx}$ عند $x = a\ ,\ x = -a$ نحصل على أربع معادلات

$$B\sin Ka + c\cos Ka = Ae^{-\mathrm{ka}}$$

$$B\cos \mathrm{Ka} + kc\sin Ka = kAe^{-\mathrm{ka}}$$

$$B\sin \mathrm{Ka} + c\cos \mathrm{Ka} = De^{-\mathrm{ka}}$$

$$B\cos \mathrm{Ka} - kc\sin Ka = -kDe^{-\mathrm{ka}} \qquad (2.21)$$

ومن هنا نحصل على

$$\left.\begin{aligned} B\sin Ka &= (D - A)e^{-\mathrm{ka}} \\ KB\cos Ka &= K(-D + A)e^{-\mathrm{ka}} \end{aligned}\right\} (2.22)$$

$$\left.\begin{aligned} C\ cos\ Ka &= (D + A)e^{-Ka} \\ kc\ sin\ Ka &= K(D + A)e^{-ka} \end{aligned}\right\} (2.23)$$

مالم $B = 0$ ، $D = A$ فإن (2.22) تصبح

$$k\ cot\ ka = -k \qquad (2.24)$$

وبالمثل مالم $B = 0$ ، $D = -A$ فإن (2.23) تصبح

$$K\tan ka = k \qquad (2.25)$$

وهذا الاحتمال بالنسبة للمعادلتين (2.25) ، (2.24) يتحقق في آن واحد وبحذف K نحصل على المطلوب

$$tan^2(ka) = -1$$

وعلاوة على ذلك لا نريد أن تنعدم A,B,C,D

و هذا الحل يمكن تقسيمه الى جزئين كالاتي :

$$i) \quad B = 0, D = A$$

$$and \quad k \tan ka = k$$

$$\text{or} \sqrt{\frac{|E|}{V_0 - |E|}} = \tan\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - |E|)}\right) \qquad (2.26)$$

وتناظر الدوال الموجبة المتماثلة في x

$$ii) \quad C = 0, D = -A$$

$$and \quad k \cot ka = -k$$

$$\text{or} \sqrt{\frac{|E|}{V_0 - |E|}} = -\cot\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - |E|)}\right) \qquad (2.27)$$

وتناظر الدوال الموجبة الغير متماثلة في x

وعند معرفة قيم m, a, V_0 *يمكن حل المعادلتين* (2.27) و(2.26) باستخدام التحليل العددي ونحصل على مستويات الطاقة. وفي حالة معرفة قيمة E يمكن تعيين $\psi_{(x)}$ *باستخدام المعادلتين* (2.26) و (2.18) *فمثلا اذا كانت* E *جذر المعادلة* (2.26) *اذن*

$$B = 0\,, \qquad \frac{D}{A} = 1\ , and\ \frac{C}{A} = e^{-ka}/cos\ ka$$

والقيم القياسية ل A يمكن تعيينها من شرط المعايرة.

٣- المتذبذب التوافقي الخطي

3-The linear Harmonic oscillator

يمثل المتذبذب التوافقي في بعد واحد مشكلة ذات جانب كبير من الأهمية للمجموعة الديناميكية ويعتبر قاعدة لنظريات الاشعاع.

اذا نظرنا الان الى المشكلة من خلال ميكانيكا الكم فإنه يلزمنا كتابة دالة هاميلتون للمتذبذب التوافقي على الصورة:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\omega^2 x^2 \quad (2.28)$$

في ميكانيكا الكم تصبح:

$$H = \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} + m^2\omega^2 x^2\right) \quad (2.29)$$

حيث ω هي زاوية التردد للمتذبذب الكلاسيكي وبكتابة معادلة شرودنجر (انظر 2.7)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi \qquad (2.30)$$

ومن المناسب ادخال الابعاد المتغيرة

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad , \quad \varepsilon=\frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (2.31)$$

معادلة شرودنجر تصبح

$$\frac{d^2\omega}{d\xi^2}+(\varepsilon-\xi^2)\psi=0 \qquad (2.32)$$

عند المسافات الكبيرة سوف تكون طاقة الجهد أكبر من الطاقة الكلية وناحية الكلاسيكية الحركة للمجموعة يأخذ مكان قريب في المنطقة أي أن الكلاسيكي

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2<E$$
$$\text{or} \quad \xi^2<\varepsilon$$

اذا نظرنا الى سلوك المعادلة (2.32) في المنطقة $\xi^2 \gg \varepsilon$ نلاحظ أن

$$\psi\sim\xi^n e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2} \qquad (2.33)$$

وهذا الاقتراح يمكن إيجاد الحل المضبوط للمعادلة *(2.32)* على الصورة

$$\psi=U(\xi)\exp\left(-\tfrac{1}{2}\xi^2\right) \qquad (2.34)\,.$$

(وسنكتفي بالإشارة السالبة لكي تكون الدالة الموجية محدودة عن اللانهاية)

وبالتعويض من *(2.33)* في *(2.32)* نحصل على

$$\frac{d^2U}{d\xi^2}-2\xi\frac{dU}{d\xi}+(\varepsilon-1)U=0 \qquad (2.35)$$

سوف نبحث عن حل هذه المعادلة في صورة متسلسلة القوى

$$U=\xi^s(a_0+a_1\xi+a_2\xi^2+\cdots)\,, \quad a_0\neq0 \; and s\geq0$$

نفاضل هذه السلسلة ثم التعويض في المعادلة *(2.35)* نجد أن

$$[(r+s)(r+s-1)a_r\xi^{r+s-2}-2(r+s)a_r\xi^{r+s}+(\varepsilon-1)a_r\xi^{r+s}]=0 \qquad (2.36)$$

وبمساواة معاملات قوى ξ بالصفر نجد أن

$$s(s-1)a_0=0 \qquad (2.37)$$
$$s(s+1)a_1=0 \qquad (2.38)$$

$$and \quad (r+s+2)(r+s+1)a_{r+2} = (2r+2s+1-\varepsilon)a_r, \qquad r = 0,1,2, \dots.. \qquad (2.39)$$

وحيث أن $a_0 \neq 0$ من المعادلة *(2.37)* نحصل على

$$s = 0 \text{ or } S = 1 \qquad (2.39)$$

ويمكن كتابة المعادلة *(2.39)* على الصورة

$$\frac{a_{r+2}}{a_r} = \frac{(2r+2s+1-\varepsilon)}{(r+s+2)(r+s+1)} \qquad (2.40)$$

ولاختبار تباعد وتقارب المتسلسلة (1.40) *نجد أن*

$$\lim_{r\to\infty} \frac{a_{r+2}}{a_r} = \frac{2}{r} \text{ for larger} \qquad (2.41)$$

نجد أن المتسلسلة تقاربية ، كما يلاحظ أنه اذا لم تكن المتسلسلة *(2.39)* محدودة بدرجة كبيرة جدا فإن الدالة الموجية تؤول الى الحل $exp\left(\frac{1}{2}\xi^2\right)$ عندما $\xi \to \infty$ وهذا الحل قد أهمل قبل ذلك ، ونرى من المعادلة *(2.40)* فإن جميع معاملات a_{r+2} ، a_{r+4} .... الخ سوف تنعدم. اذن

$$2r + 2s + 1 - \varepsilon = 0 \qquad (2.42)$$

ولكن $s = 0$ أو $s = 1$ *نجد أن*

$$\varepsilon = 2n+1\,, \quad n = 0,1,2, \dots \dots (2.43)$$

$$\text{or} \quad E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (2.44)$$

ويتضح أن الاعداد المميزة للطاقة هي $\frac{1}{2}\hbar\omega, \frac{3}{2}\hbar\omega, \frac{5}{2}\hbar\omega \dots \dots$

وبذلك نحصل على مستويات الطاقة الممكنه

القيمة المحدودة لمستوى الطاقة لادنى منزلة (*the ground state*) هي $\frac{1}{2}\hbar\omega$ وتسمى بالطاقة الصفرية ، وباستخدام (*2.43*) يمكن كتابة المعادلة (*2.35*) على الصورة

$$\frac{d^2U}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dU}{d\xi} + 2n(\xi) = 0 \quad (2.45)$$

ولهذه المعادلة حل هو $H_n(\xi)$ دالة هرمينية كثرة الحدود من الدرجة n ، وهذه الدالة تعرف كالآتي: -

$$H_n(\xi) \; = (-1)^n \exp(\xi^2)\frac{d^n}{d\xi^n} exp(-\xi^2) \qquad (٢.٤٦)$$

وتكون الدالة الموجية المتطبعة للمتذبذب التوافقي تأخذ الصورة

$$\psi_n(x) = N_n \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x)$$
$$N_n = \left[\alpha/\sqrt{\pi}\ \ 2^n n!\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\xi = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \qquad (٢.٤٧)$$

وتحقق شرط المعايرة العمودي

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi_n{}^*(x)\, \psi_m(x) = \delta_{nm} \qquad (2.48)$$

وسوف نذكر بعض الخواص للدالة الهرميتية H_n علي النحو التالي

$$H_0 = 1\,, H_1(\xi) = 2\xi\,, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2\,, H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \qquad (2.49)$$

وللحصول على علاقة عدم التثبيت أو التحديد

بالنسبة لمنازل المتذبذب التوافقي من السهل اثبات هذه العلاقة على الصورة

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \qquad (2.50)$$

باستخدام دالة التوليد لكثيرة الحدود الهرميتية يمكن اثبات أن

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x) dX = |N_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\alpha x)\exp(-\alpha^2 x^2)\cdot x^2 dx$$
$$\langle x^2 \rangle = (2n+1)/2\alpha^2$$
$$there\ fore$$
$$\langle V \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left[\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi_n(x) dx$$
$$= \frac{1}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{1}{2}E_n$$
$$further$$
$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_n = \langle H \rangle_n - \langle V \rangle_n = \frac{1}{2}E_n$$
$$\therefore \langle p^2 \rangle_n = mE_n$$

Now

$$\langle x \rangle_n = 0 \text{ and } \langle p \rangle_n = 0$$
$$\therefore \Delta x \Delta p = \left[\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle\right]^{\frac{1}{2}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar$$

وهذه هي علاقة عدم التحديد للمنازل المتذبذب التوافقي

٤ ـ الدوال الموجية المتعامدة تناظر مستويات الطاقة المختلفة

Orthogonality of wave functions corresponding to different energy levels

سوف نثبت أن كل قيم E_n تكون حقيقيي واذا كان$E_n \neq E_k$ فإنها تناظر الدوال الموجية المتعامدة بالنسبة الى منزلتين ، فإن معادلة شرودنجر تعطى بواسطة

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n + v(\underline{r})\psi_n = E_n\psi_n \quad (2.51)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_k + v(\underline{r})_k = E_k\psi_k \quad (2.52)$$

بضرب المعادلة (2.51) في ψ_k^* وبضرب مرافق المعادلة (2.25) في ψ_n ثم الطرح نحصل على :

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\omega_k^*\nabla^2\psi_n - \psi_n\nabla^2\psi_k^*) = (E_n - E_k^*)\psi_k^*\psi_n \quad (2.53)$$

$$\text{or } \frac{\hbar^2}{2m} - \text{div}\int(\psi_k^*\nabla\psi_n - \psi_n\nabla\psi_k^*)dr = (E_n - E_k^*)\int\psi_k^*\psi_n d\tau$$

ويمكن تحويل التكامل في الطرف الأيسر الى تكامل سطحي وهذا التكامل ينعدم اذا كان التكامل الحجمي على الفراغ الكلي، فإن

$$(E_n - E_k^*)\int\psi_k^*\psi_n d\tau = 0$$

وعندما $n=k$ نجد أن $E_n = E_n^*$

وهذا يثبت أن الاعداد المميزة يجب أن تكون حقيقة بالنسبة الى $E_n \neq E_k$

$$\therefore \int \psi_k^*\psi_n d\tau = 0 \quad (2.54)$$

وهذا يحقق شرط التعامد.

اذا كانت $E_n = E_k$ فإن ψ_k و ψ_n لا يعتمد خطيان ومنسوبتان الى نفس مستوى الطاقة وليس بالضرورة أن يكون الدالتان الموجيتان متعامدتان.

وعلاوة على ذلك يمكن دائما ضرب الدالة المميزة بأي ثابت اختياري بحيث أن

$$\int |\psi_n|^2 d\tau = 1 \quad (2.55)$$

وهذا هو شرط المعايرة ويمكن كتابة المعادلتين (2.55) و(2.54) بالعلاقة الاتية

$$\int \psi_k^*\psi_n d\tau = \delta_{kn} \quad (2.56)$$

$$where \quad \delta_{kn} = \begin{cases} 0 & if \quad k \neq 0 \\ 1 & if \quad k = 0 \end{cases}$$

والمعادلة (2.56) تعرف بشرط المعايرة العمودي

5- Expansion theorem

مؤثرها هاميلتون H وهو عبارة عن مؤشر خطي حقيقي

والدوال المميزة لمؤثر هاميلتون في الصورة الكاملة تحقق شرط المعايرة والتعامد ، أي أن يمكن التعبير عن الدالة الاختيارية $\phi(\underline{r})$ بالدوال المميزة ψ_n على الصورة :

$$\phi(\underline{r}) = \sum_n C_n \psi_n(\underline{r}) \qquad (2.57)$$

حيث المعاملات الثابتة C_n من السهل إيجاد قيمتها بضرب المعادلة السابقة في ψ_n^* ثم التكامل واستخدام الشرط (2.56) نحصل على

$$C_n = \int \psi_n^*(\underline{r}) \varphi(\underline{r}) d^3 r \qquad (2.58)$$

وبالتعويض من (2.58) في (2.57) نجد أن

$$\varphi(\underline{r}) = \int \varphi(\underline{r}') \left(\sum_n \psi_n^*(\underline{r}') \psi_n(\underline{r}) \right) d^3 r' \qquad (2.59)$$

وهذه المعادلة تحتوي على الدالة الاختيارية $\varphi(\underline{r})$ ونلاحظ أن

$$\sum_n \Psi_n^*(\underline{r}') \psi_n(\underline{r}) = \delta(\underline{r} - r') \qquad (2.60)$$

حيث $\delta(\underline{r} - \underline{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')$

هي دالة دلتا في ثلاث ابعاد. والمعادلة (2.60) تصف الخاصية المقفلة لشرط المعايرة او التعامد للدوال $\psi_n(\underline{r})$

بالنسبة الى المتذبذب التوافقي الخطي الذي يصف الطيف فقط (لا يوجد أي أعداد مميزة $E < 0$) فإن الدوال المميزة الكاملة تأخذ الصور

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x) exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right), n = 0,1,2, \ldots. \;\; (see\ Eq(2.47))$$

$$\sum_{n=0,1,2,\cdots}^{\infty} |N_n|^2 H_n(\alpha x') e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x'^2} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} == \delta(x - x') \qquad (2.61)$$

المعاملات C_n *(2.57)* ولها تفسير فيزيائي بسيط. اذا كانت المجموعة معرفة في المنزلة $\varphi(\underline{r})$ اذن $|C_n|^2$ هي كثافة الاحتمال

لايجاد منزلة الطاقة الخاصة المميزة E_n بواسطة الدالة الموجية $\psi_n(\underline{r})$ ويمكن أن نبين $P_n = (= |C_n|^2)$ ومجموعها يساوي الوحدة

$$\sum_n |C_n|^2 = \sum_n \left[\int \psi_m(\underline{r}) \varphi^*(\underline{r}) d^3 r\right]\left[\int \psi_n^*(\underline{r}') \varphi(\underline{r}') d^3 r\right]$$

$$= \iint d^3 r d^3 r' \varphi^*(\underline{r}) \varphi(\underline{r}') \delta(r - \underline{r}')$$

حيث استخدمت العلاقة (2.60).

$$\sum_n |C_n|^2 = \int \varphi^*(\underline{r})\varphi(\underline{r}')d^3r = 1 \qquad (2.62)$$

الآن سوف نحسب القيمة المتوسطة للطاقة من دالة الاحتمال :

$$\langle E\rangle = \sum E_n P_n = \sum E_n C_n^* C_n$$

$$= \sum_n \iint E_n \psi_n(\underline{r}')\varphi^*(\underline{r}')\psi_n^*(\underline{r})\varphi(\underline{r})d^3r d^3r'$$

But

$$\int E_n \psi_n^*(\underline{r})\varphi(\underline{r})d^3r = \int \varphi(\underline{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\underline{r})\right]\cdot \psi_n^*(\underline{r})d^3r$$

$$= \int \psi_n^*(\underline{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\underline{r})\right]\varphi(\underline{r})d^3r$$

thus

$$\langle E\rangle = \int d^3r \int d^3r' \left[\sum \psi_n(\underline{r}')\psi_n^*(\underline{r})\right]\varphi^*(\underline{r}')\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\underline{r})\right]$$

$$= \int d^3r \int d^3\underline{r'}\, \delta(\underline{r}-\underline{r}')\varphi^*(\underline{r}')\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\underline{r})\right]\varphi(\underline{r})$$

$$= \int \varphi^*(\underline{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\underline{r})\right]\varphi(\underline{r})d^3r \qquad (2.63)$$

وهذه هي القيمة المتوسطة للمؤثر وحسب بواسطة التأثير على المؤثر بين $\varphi(\underline{r})$ و $\varphi^*(\underline{r})$ ونلاحظ أن القيمة $\phi(r,t)$ المعتمدة على الزمن تعطى بواسطة العلاقة التالية

$$\varphi(\underline{r},t) = \sum C_n \psi_n(\underline{r})exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \qquad (2.64)$$

حيث أن c_n تتعين من الشروط الابتدائية بالنسبة الى φ .

٦ ـ الحواجز في بعد واحد :

6- one-dimensional barriers:

نفرض أن شعاع من الجسيمات ولها الطاقة الكلية E ويمكن كتابة شعاع الالكترونات الساقطة من اليسار بالدالة الموجية

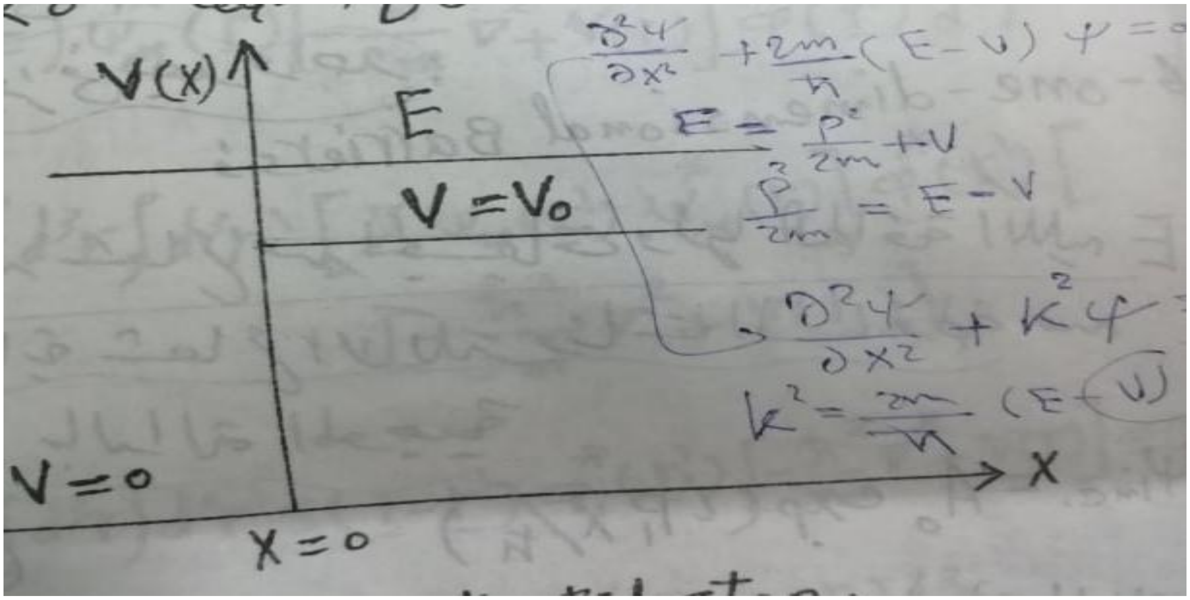
$$\psi_{inc} = A_0 exp(ip_1 x/\hbar) \qquad (2.65)$$

ونعتبر خطوة الجهد (شكل ٣) تتمثل بواسطة الدالة

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ v_0 & x > 0 \end{cases} \qquad (2.66)$$

اذا كانت $E < v_0$ *اذن المقدار* $\sqrt{2m(E - v_0)}$ *كمية تخيلية والناحية الكلاسيكية للجسيم لم يكن له طاقة كافية في المنطقة* $x > 0$

بينما $E > v_0$ *فإن المقدار* $\sqrt{2m(E - v_0)}$ *كمية حقيقية والجسيم يكون له طاقة كافية في المنطقة* $x > 0$ *وكذلك في المنطقة* $x < 0$



أولا: نعتبر الحالة $E > v_0$

ويمكن التعبير عن معادلة شرودنجر في المنطقتين

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + K_1^2\psi_1 = 0 \quad ; k_1 = (2mE/\hbar^2)^{\frac{1}{2}} \qquad \text{for } x < 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + K_2^2\psi_2 = 0 \quad ; K_2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - v_0)^{\frac{1}{2}} \qquad \text{for } x > 0 \quad (2.67)$$

الحلين هما

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad \text{for } x < 0$$

$$\psi_2 = ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \qquad \text{for } x > 0 \qquad (2.68)$$

حيث *A,B,C and D* ثوابت اختيارية.

الدالتين e^{-ik_1x}, e^{ik_1x} *(عندما نضربها في المعامل* $exp - \frac{i\,E\,t}{\hbar}$ *، انظر المعادلة (2.5) تمثل انتشار الموجتين في اتجاه* x *والاتجاه* $-x$ *على الترتيب، والحد الذي يحتوي على الثابت الاختياري A يمثل الموجة الساقطة (incident wave) التي تصف حركة الجسيم وجزء منها يرتد عند حاجز الجهد ويسمى بالموجة المنعكسة (reflected wave)* وهو الحد الذي يحتوي على الثبات الاختياري *B* ، *وجزء منها ينتقل أو يعبر ثم ينتشر في المنطقة* $x > 0$ *وتسمى بالموجة النافذة* (transmitted wave) *وهو الحد الذي يحتوي على الثابت الاختياري C* ، *بينما الحد الذي يشتمل على الثابت الاختياري D يمثل الالكترون*

الساقط من ناحية اليمين ومن المناسب وضع $D = 0$ في هذه الحالة والحلين في المنطقتين يجب أن يحقق الشروط الحدية، نلاحظ من شرط الاستقرار للدالة الموجبة ومشتقتها عند $X = 0$ هما

$$\psi_1(x) = \psi_2(x)$$

$$\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x} = \frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x} \; at \;\; X = 0 \qquad (2.68)$$

ومن هذين الشرطين نجد أن

$$A + B = C$$

$$ik_1(A - B) = iK_2C \qquad (2.69)$$

الحلين بدلالة

$$B = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}A$$

$$c = \frac{2K_1}{k_1 + k_2}A \qquad (2.70)$$

كثافة التيار (انظر المعادلة (1.48)) تعطى بالعلاقة

$$J = \mathrm{Re}\left(\psi^* \frac{\hbar}{im}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

فإن كثافة التيار في المنطقة $x < 0$ يمكن تعيينها

$$J_{x<0} = \mathrm{Re}\frac{\hbar}{im}\left(A^*e^{-ik_1x} + B^*e^{ik_1x}\right)ik_1\left(Ae^{ix_1x} - Be^{-ik_rx}\right)$$

$$= \frac{\hbar k_1}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{P_1}{m}(|A|^2 - |B|^2), \text{ where } P_1 = \hbar k_1 \qquad (2.71)$$

والحدين $\frac{P_1}{m}|A|^2$ ، $\frac{P_1}{m}|B|^2$ يمثلان كثافتي التيار الساقطة والمنعكسة على الترتيب وبالمثل يمكن الحصول على كثافة التيار النافذة

$$J_{x>0} = \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2$$

$$= \frac{P_2}{m}|c|^2, \quad p_2 = \hbar k_2 \qquad (2.72)$$

ويعرف معامل النفاذية T بأنه القيمة المطلقة للنسبة بين كثافتي التيار النافذة J_{tr} *والساقطة* J_{in} *وتعرف معامل الارتداد R بأنه القيمة المطلقة للنسبة بين كثافتي التيار المنعكسة J_{re} والساقطة J_{in}*

$$R = \frac{J_{reflected}}{J_{incident}} = \frac{\frac{P_1}{m}|B|^2}{\frac{p_1}{m}|A|^2} = \frac{(K_1 - K_2)^2}{(K_1 + K_2)^2}$$

$$and \quad T = \frac{J_{transmited}}{J_{incident}} = \frac{\frac{\hbar k_2}{m}|c|^2}{\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(K_1+k_2)^2} \qquad (2.73)$$

وبذلك يتحقق الشرط $R + T = 1$

والان نعتبر الانعكاس والنفاذية للحزمة الموجية ، وتكون الحزمة الموجية في حدين للمنزلتين المتميزتين ،

وبالنسبة الى $x < 0$ نكتب المعادلة (انظر المعادلة *(1.10)* على الصورة:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int_0^\infty dp\, a(p)\left[e^{-ip_1x/\hbar} + \left(\frac{p_1-P_2}{p_1+p_2}\right)\cdot e^{-ip_1x/\hbar}\right].e^{-iEt/\hbar} \qquad (2.74)$$

بالنسبة الى $x > 0$ *تكون*

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int_0^\infty dpa(p)\left(\frac{2p_1}{p_1+p_2}\right)\cdot e^{ip_2x/\hbar}.\exp(-iEt/\hbar) \qquad (2.75)$$

وفي المنطقة $x < 0$ نجد أن الحزمة الموجية تتكون من حزمتين ، أي أن

$$\psi = \psi_{inc} + \psi_{ref}$$

$$where \;\; \psi_{inc}(x,t) = \int_0^\infty \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} a(p) exp\left[\frac{i(p_1x - Et)}{\hbar}\right] \qquad (2.76)$$

$$and \; \Psi_{ref}(x,t) = \int_0^\infty \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \alpha(p)\left(\frac{P_1-P_2}{P_1+p_2}\right) exp\left[-\frac{i(p_1x+Et)}{\hbar}\right] \qquad (2.77)$$

وحدود التكاملات من 0 الى ∞ ولهذا فإن الموجة الساقطة سوف تحتوي فقط على المركبات التي تغادر الى الطرف الأيمن.

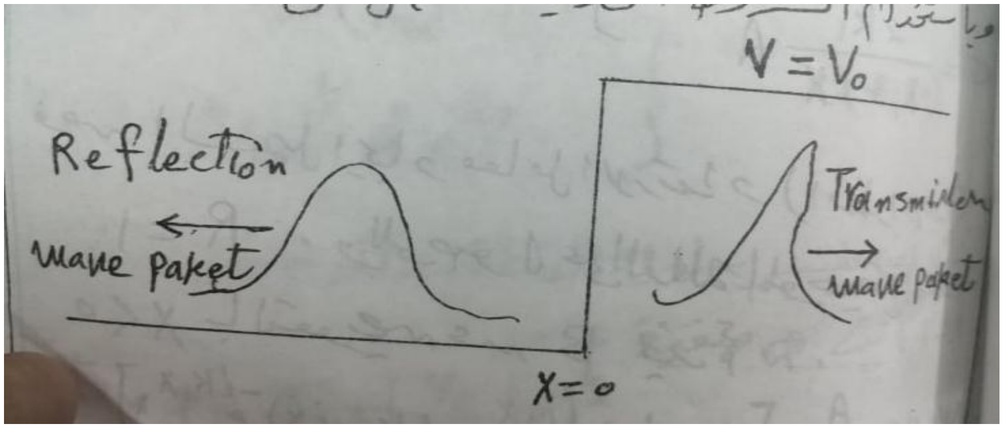
<u>الحالة الثانية</u>: عندما $E < V_0$ فان حل معادلة شرودنجر في المنطقتين تأخذا العلاقتين التاليتين:

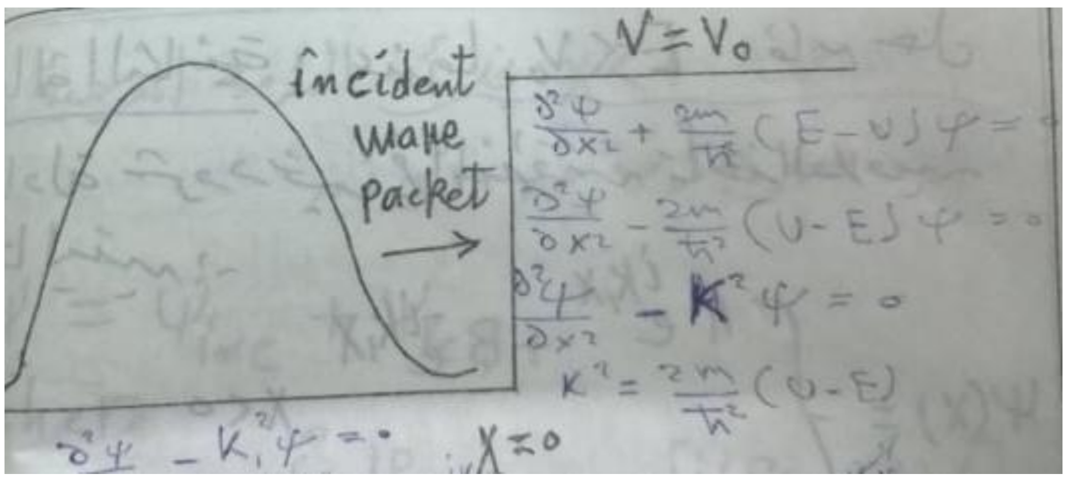
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{lkx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ ce^{-x\chi} & x > 0 \end{cases} \qquad (2\cdot 78)$$

$$\left(k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}(v_0 - E)\right)^{\frac{1}{2}}\right)$$

حيث أننا اهملنا الحل $exp[kx]$ (في المنطقة $x > 0$) لانها تباعدية عند $x \to \infty$

وباستخدام الشروط الحدية نحصل على





الشكل ٤ : الاسقاط والانعكاس والنفاذية للحزمة الموجية بواسطة حاجز الجهد في الشكل ٣

$$\left.\begin{aligned} B &= \frac{K_1 - ix}{K_1 + ix} A \\ C &= \frac{2K_1}{K_1 + ix} A \end{aligned}\right\} (2.79)$$

ومن السهل إيجاد معامل الارتداد (انظر *(2.73)*. $R = 1$. وللحصول على الدالة الموجية في المنطقة $x < 0$ بالتعويض عن B نجد أن

$$\psi_1(x) = \frac{A}{k_1 + ix}\left[(k_1 + ix)e^{ik_1 x} + (k_1 - ix)\cdot e^{-ik_1 x}\right]$$

سوف نعبر عن الكمية المركبة $k_1 + ix$ باستخدام الاحداثيات القطبية $\rho\, e^{i\phi}$

مع ملاحظة أن

$$\rho^2 = k_1^2 + x^2 = 2mV_0/\hbar^2 \text{ and } \tan\varphi = x/k_1$$

ومن ثم نحصل على

$$\psi_1 = 2Ae^{-i\phi}\cos(k_1 x + \varphi)$$

بالمثل في المنطقة $x > 0$ *تكون الدالة الموجية*

$$\psi_2 = 2\frac{k_1}{\rho}Ae^{-i\varphi}e^{-k\,x}$$

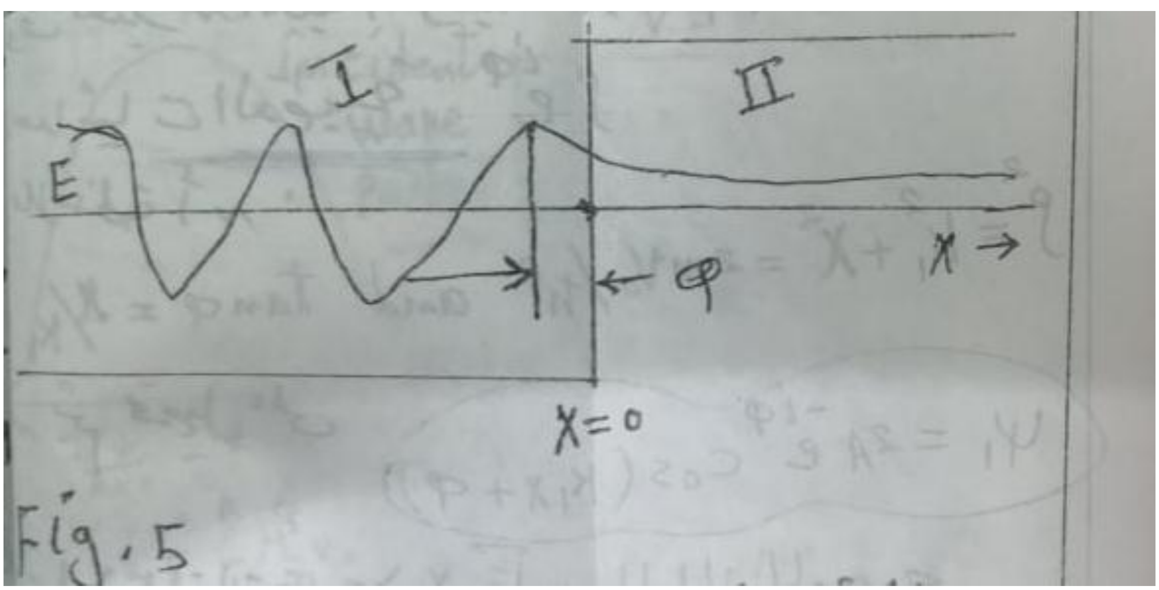
ولكن A ثابت اختياري ومن السهل التعبير عن المقدار $2Ae^{-i\phi}$ بسعة جديدة A'

$$\left.\begin{aligned}\psi_1 &= A'\mathrm{Cos}(K_1 x + \phi)\\ \psi_2 &= (E/V_0)^{\frac{1}{2}}\,A'e^{-k\chi}\end{aligned}\right\}(2.80)$$

شكل (٥) يفسر سلوك الدالتين الموجيتين

اذا كانت φ صغيرة فإن

$$tan\,\varphi = \frac{x}{K_1} = \left(\frac{V_0 - E}{E}\right)^{\frac{1}{2}}$$



نلاحظ أن لكي نراقب الجسيم في المنطقة $x > 0$ يجب أني يكون البعد الداخلي $x \simeq \frac{1}{\chi}$

ومن ثم فإن كمية الحركة (من علاقة عدم التحديد) تصبح

$$\Delta P \geqslant \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq hX = \sqrt{2m(V_0 - E)} \qquad (2.81)$$

فإن عدم التحديد في طاقة الحركة تقريبا هي

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} \geqslant (V_0 - E)$$

٧- حركة الجسيمات في مجال مركزي متماثل

7- motion in a spherically field

وتعتبر من المشاكل الهامة في الثلاث ابعاد ويكون حركة الجسيم في الجهد الذي يعتمد فقط على مقدار المسافة من نقطة ثابتة

$$V(\underline{r}) = V(r) \qquad (2.82)$$

معادلة شرودنجر بالنسبة لهذا الجهد هي:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - v(r))\psi(\underline{r}) = 0 \qquad (2.83)$$

وفي حالة الاحداثيات القطبية نجد أن

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi \qquad (2.84)$$

نرمز الى المؤشر داخل القوس بالرمز Λ. وفي هذه الحالة تكون الدالة الموجية دالة في الاحداثيات الكروية ونعبر عنها بهذه العلاقة

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi) \qquad (2.85)$$

وبالتعويض عن الدالة الموجية ψ *(وهي في صورة حاصل ضرب جزء قطري* (يعتمد على r) في جزء زاوي (يعتمد على الزوايا) في (*2.83*) نجد أن

$$\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - v)R\right]Y(\theta,\varphi) + \frac{R}{r^2}\Lambda Y(\theta,\varphi) = 0 \qquad (2.86)$$

بالقسمة على RY/r^2 نحصل على

$$r^2\left[\frac{1}{rR(r)}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{2m}{\hbar}(E - v) = -\frac{\Lambda V(\theta,\varphi)}{Y(\theta,\varphi)} = \lambda \qquad (2.87)\right.$$

ويتضح أن العلاقة (*2.87*) لا تتحقق الا اذا كان كل من طرفيها يساوي مقدار ثابت λ مثلا حيث أن كلا منهم يعتمد على متغيرات لا يعتمد عليها الاخر ومن المناسب ادخال تعريف جديد للدالة القطرية

$$U(r) = rR(r) \qquad (2.88)$$

وبهذا نحصل على

$$\frac{d^2U(r)}{\partial r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-v-\frac{\hbar^2\lambda}{2mr^2}\right)U(r)=0 \qquad (2.89)$$

$$and \qquad \Lambda Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0 \qquad (2.90)$$

يجب ملاحظة أن Y حل المعادلة (2.90) لا يعتمد على صورة دالة الجهد حيث أن هذه المعادلة لا تعتمد على المتغير r وبذلك فإن هذا الحل صالح لجميع الحالات المركزية . والمؤثر Λ يكون منسوب الى كمية الحركة الزاوية. ونرى أن مؤثر عزم كمية الحركة في ميكانيكا الكم يأخذ الصورة

$$\underline{L}=\underline{r}\times\underline{p}=-i\hbar\left(\underline{r}\times\nabla\right) \qquad (2.91)$$

مع ملاحظة استبدال $\underline{p}$ بالمؤثر $-i\hbar \underline{\nabla}$ فإن مركبات $\underline{L}$ تعطى بالعلاقات التالية :

$$\left.\begin{aligned}L_x&=yP_z-zP_y=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\ L_y&=zP_x-xP_z=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\ L_z&=xP_y-yP_x=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\end{aligned}\right\}(٢.٩٢)$$

يمكن تحويل هذه المعادلات باستخدام الاحداثيات الكروية وتعطى بالعلاقات :

$$L_x=i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (2.93)$$

$$L_y=i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (2.94)$$

$$L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (2.95)$$

$$this\ gives \qquad L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\text{or}\ \ L^2=-\hbar^2\Lambda \qquad (2.96)$$

ومن المناسب ادخال المؤثرين

$$L_+=L_x+iL_y=-i\hbar(ie^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\, e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$L_-=L_x-iL_y=-i\hbar\left(-ie^{-i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta e^{-i\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (2\cdot 97)$$

وللحصول على الصورة الصريحة لحل المعادلة (2.90) نستخدم طريقة فصل المتغيرات (θ,φ) وذلك بوضع Y في الصورة

$$Y(\theta,\varphi) = \Phi(\varphi) + \theta(\vartheta) \quad (2.98)$$

نجد أن بعد فصل المتغيرات في المعادلة (٢.٩٠)

$$-\frac{1}{\Phi} = \frac{d^2\emptyset}{d\emptyset^2}\frac{\sin^2\theta}{\theta}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) + \lambda\right]\theta = m^2 \quad (2.99)$$

ونلاحظ أن كل حد يساوي مقدار ثابت موجب m^2 وخلاف ذلك Φ سوف لا تكون دورية وتعتمد على ϕ والحل بالنسبة الى Φ هو :

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}; m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \, (2.100)$$

ويجب أن تكون قيم m هي ... ,$0, \pm1, \pm2$ وهذا لكي تكون الدالة Φ وحيدة القيمة فيجب أن تحقق شرط الدورية.

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \qquad (2.101)$$

ومنه نجد أن

$$m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \quad \text{أي أن} \quad \exp(2i\pi m) = 1$$

المعامل $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ في المعادلة (2.100) وجد من شروط المعايرة

$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \qquad (2.102)$$

$$\left[\int \psi^2 d\tau = \int_0^{\infty} R^* R r^2 dr \int_0^{\pi} \theta^* \theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi = 1\right]$$

فالحل (٢.١٠٠) يمثل موجة تنتشر في دائرة فتناظر مثلا الكترون يدور بانتظام

The θ equation is (from Eq. (2.29))

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right) + \lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Big)\theta(\theta) = 0 \qquad (2.103)$$

بوضع $\cos\theta = \mu \quad \theta(\theta) = F(\mu),$ نجد أن

$$\frac{d}{d\mu}\left[(1-\mu^2)\frac{dF}{d\mu}\right] + \left[\lambda - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right]F(\mu) = 0 \qquad (2.104)$$

وفي حالة $m = 0$، فهذه تتحول الى معادلة لاجندر $(legendre)$

$$(1-\mu^2)\frac{d^2P}{d\mu^2} - 2\mu\frac{dP}{d\mu} + \lambda P = 0 \qquad (2.105)$$

وحلها يمكن وضعه في صورة متسلسلة وهذه الحالة تشبه حالة المتذبذب التوافقي الخطي

$$P(\mu) = \sum_{r=0} a_r \mu^{r+s} \qquad (2.106)$$

وسبق أن حصلنا في المتذبذب التوافقي بأن s = 0 ، s = 1 وعندما تكون s = 0 هو الحل الضروري المستقل ، وبذلك تكون العلاقة التكرارية هي

$$a_{r+2} = \frac{r(r+1)-\lambda}{(r+1)(r+2)} a_r \qquad (2.107)$$

ولكي تكون هذه العلاقة محدودة يجب أن تنتهي عند درجة عظمى $r = l$ (حيث l هو العدد الكمي) ، أي أن $a_{r+2} = 0$ ، $a_r \neq 0$ ومنها نجد أن

$$\lambda(l+1), \quad l = 0,1,2, \dots \dots \dots \qquad (2.108)$$

ونتائج كثيرة الحدود تكون كثيرة الحدود للاجندر $P_l(\mu)$ ونلاحظ أن

$$P_0(\mu) = 1 \; ; P_1(\mu) = \mu; \;\; P_2(\mu) = \frac{1}{2}(3\mu^2 - 1) \dots \text{etc} \qquad (2.109)$$

فإن حل المعادلة (2.103) عندما $m = 0$ تعطى بالعلاقة الاتية

$$\Theta(\theta) = P(\cos\theta) \qquad (2.110)$$

تحصل على حل المعادلة (2.104) عندما $m \neq 0$ ، نلاحظ أن اذا فاضلنا المعادلة (2.105) m من المرات نجد أن

$$(١ - \mu^2)\frac{d^2 p^{(m)}}{d\mu^2} - 2(m+1)\frac{dp^{(m)}}{d\mu} + \big(\lambda - m(m+1)\big)P^{(m)} = 0 \qquad (2.111)$$

$$where \qquad p^{(m)}(\mu) = \frac{d^m p}{d\mu^m}$$

وبالطبع تكون m موجبة ، وثم في المعادلة (2.104) اذا استخدمنا التعويض

$$F(\mu) = (1-\mu^2)^{m/2} G(\mu)$$

سوف نجد أن $G(\mu)$ تحقق نفس المعادلة مثل $P^{(m)}(N)$ ولهذا عندما $m \neq 0$ فإن حل المعادلة (2.104) تكون مقترنة بكثيرة الحدود للاجندر

$$p^m(\mu) = (1-\mu^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\mu^m} p(\mu) \qquad (2.112)$$

وتعرف فقط بالنسبة للاعداد الغير سالبة $m \ll l$ ومن المناسبة ادخال الدالة $Y_{lm}(\theta,\phi)$ وتسمى the spherical harmonic

$$Y_{Lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{2\pi} \cdot \frac{(L-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}} \cdot P_L^m(\cos\theta) e^{im\varphi} m \geqslant 0 \qquad (2.113)$$

and

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y_{\mathrm{lm}}^*(\theta,\varphi)$$

$$l = 0,1,2,3, \dots \dots .. \qquad m = -l, -l+1, \dots \dots \dots ., l, \dots \dots$$

وشرط المعايرة العمودي لهذه الدالة تأخذ الصورة

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi} Y_{Lm}^{*}(\theta,\varphi)Y_{L'm'}-(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi=\delta_{Ll'},\delta_{mm'} \qquad (2.114)$$

من المعادلتين (2.90) ، (2.96) يمكن الحصول على الاعداد المميزة بالنسبة ال l^2 :

$$L^2Y_{\text{lm}}(\theta,\varphi)=-\hbar^2\Lambda Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (2.114)$$

وأيضا من المعادلتين (*2.95*) ، (*2.113*) نجد أن:

$$L_zY_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (2.115)$$

العدد m يسمى بالعدد الكمي المغناطيسي حيث تكون المستويات منفصلة في المجال المغناطيسي المنتظم المعتمد على m

ولهذا فإن الدالة $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ لها اعداد مميزة في آن واحد بالنسبة الى l^2 ، L_z

ومن السهل اثبات ان ليس لها اعداد مميزة بالنسبة الى L_x ، L_z

سوف نثبت الآن L_x ، L_y ، L_z غير متبادلة

مثال على ذلك

$$[L_x,l_y]=L_xL_y-L_yL_x$$

$$=(yp_z-zP_y)(xP_z-zP_x)-(x\rho_z-zP_x)(yP_z-zP_y)$$

$$=y\mathrm{P}_x(zP_z-P_zz)-xP_y(zP_z-P_zz)$$

$$but \quad [Z,p_z]=zP_z-P_zz=i\hbar \qquad (2.116)$$

$$\left.\begin{aligned}\therefore [L_x,L_y]&=i\hbar L_z\\ [L_y,L_z]&=i\hbar L_x\\ [L_z\cdot L_x]&=i\hbar l_y\end{aligned}\right\}(2.117)$$

مسائل محلولة

١- أوجد الدوال المميزة للمؤثر x ومؤثر كمية الحركة $P\left(=-i\hbar\frac{d}{dx}\right)$ صورة المجموعة تكاملية ، وأوجد عدد الطيف المميز

$$x\delta(x-x')=x'\delta(x-x') \qquad (1)$$

حيث $\delta(x-x')$ هي دالة دلتا دراك ، تبين أن الدالة $\delta(x-x')$ هي الدالة المميزة للمؤثر x منسوبة الى العدد المميز x' . ولهذا فإن لها طيف مستمر للاعداد المميزة الحقيقية $-\infty<x'<\infty$ المتباينة

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x'')\delta(x-x')dx=\delta(x'-x'') \qquad (2)$$

وهذه توضح أن الدوال المميزة لها صورة المعايرة العمودية وعلاوة على ذلك المعادلة

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x'')f(x')dx'' \qquad (3)$$

ويتضح أن الدالة الاختيارية $f(x)$ يمكن التعبير عنها في صورة الارتباط الخطي للدوال المميزة

وبالمثل الدوال المميزة لكمية الحركة هي حلول لمعادلة العدد المتميز

$$-i\hbar\frac{d\psi}{dx} = p\psi \qquad (4)$$

حيث اعتبرنا كمية الحركة في حالة بعد واحد، والدوال المميزة تعطى بالعلاقة التالية

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\frac{i}{\hbar}p_x \qquad (5)$$

حيث P لها أيضا الطيف المستمر للاعداد المميزة الحقيقية $-\infty < P < \infty$

ولهذا فإن

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*(x)\psi_{p'}(x)dx = \delta(p-p') \qquad (6)$$

التي تمثل شرط المعايرة العمودية ، معادلة فورير

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty}a(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[\frac{i\rho_x}{\hbar}\right]dp \qquad (7)$$

ويتضح أن الدوال المميزة صورة المجموعة المتكاملة ، معادلة العدد المميز في حالة الثلاث ابعاد تعطى بالعلاقة التالية

$$-i\hbar\nabla\psi = \underline{P}\psi \qquad (8)$$

والدوال المميزة المتطبعة هي

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}exp\left[\frac{i}{\hbar}\underline{P}.\,\underline{r}\right] \qquad (9)$$

بحيث أن

$$\int\psi_{\underline{p}}^*(\underline{r})\psi'_{\underline{p'}}(\underline{r})d^3r = \delta\left(\underline{p}-p'\right) \qquad (10)$$

$$f(r) = \int a(P)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\,exp\left[\frac{i}{\hbar}\underline{P}.\,\underline{r}\right]d^3p \qquad (11)$$

التي تمثل المعايرة العمودية والعلاقات الكاملة على الترتيب

الباب الثالث

الفراغ الاتجاهي والمؤثرات الخطية

Vector space and linear operators: -

١- تمثيل المنازل المتجة :-

في الميكانيكا الكلاسيكية يمكن وصف المنزلة للمجموعة بالمواضع وكميات حركتها المعطاه بالنسبة للجسيمات بمقارنتها بالمجموعة عند اي لحظة ، أما في الميكانيكا الكم لا يمكن تحديد المنزلة بنفس الطريقة حيث لا يمكن تعيين جميع المتغيرات الديناميكية للمجموعة عند أي لحظة. والمنزلة في الميكانيكا الكم تتعين بواسطة تحديد القيم العديدة للمتغيرات الديناميكية والتي تعطي في ان واحد . ولقد مثل دراك (١٩٥٨) المنزلة بواسطة المؤثر الاتجاهي ويسمي a ket vector أو في صورة مختصرة a ket ويرمز له بالرمز ⟨ | . ويمكن تمثيل ket A بالرمز $|A\rangle$.

الفراغ الاتجاهي الخطي: -

أي أرتباط خطي لعددين ket vectors يكون ايضا ket vectors .

مثال علي ذلك نفرض أن أي اثنين من kets هما$|B\rangle$, $|A\rangle$. ونفرض أن c_1 , c_2 عددان اختياريان مركبان. ومن ثم يكون الارتباط الخطي

$c_1|A\rangle + c_2|B\rangle$ يكون متجه في the ket space ولهذا فان لكل منزلة للمجموعات الديناميكية عند اللحظة الخاصة تناظر a ket vector . وهذا التناظر اذا كان قيم المنازل من انطباق المواضع لتأثير علي المنازل الاخري.

بينما التناظر الاحادي (one-to-one-corres*ponding*) بين المنازل للمجموعات الديناميكية واتجاهات ket vectors . *ولهذا فان* , $|A\rangle$ $|A\rangle$ C حيث C عدد مركب، *تناظر نفس المنزلة. وهذا يعطي اختلاف بين انطباق المواضع الاساسية للنظريات الكمية وأي نوع لا نطبق المواضع الكلاسيكية.*

والان نعرف الجبر الخطي لكل فراغ اتجاهي مع اعتبار أن هذا الفراغ الاتجاهي مزدوج بشرط أن نحصل علي حاصل الضرب القياسي لمتجهي الفراغ. والفراغ الاتجاهي المزدوج يتكون من ket vectors *والاخري يسمي* bra vectors أو بصورة مختصرة bras . *ويرمز له بالرمز* | ⟩ . *ويرمز لحاصل الضرب القياسي بالنسبة الي* $|A\rangle$ *و* $\langle B|$ *بالرمز* $\langle B|A\rangle$. *وهذا هو حاصل الضرب ويكون عدد مركب* .

تعريف في حالة انعدام $\langle B|$bra إذا كان حاصل الضرب القياسي منعدم لجميع قيم قيم $ket\ |A\rangle$ أي أن

$$\langle B| = 0\,, if\ \langle B|A\rangle = 0 \quad for\ any\ \ |A\rangle \qquad (3.1)$$

وبالمثل اذا تساوي اثنين من bras أي ان

$$\langle B_1| = \langle B_2|\,,\ \ if\ \ \langle B_1|A\rangle = \langle B_2|A\rangle \qquad for\ any\ \ |A\rangle \qquad (3.2)$$

لبناء النظريات الرياضية يكفي أن نفرض ان :-

(١) يوجد تناظر احادي بين bras , kets فان أي منزلة للمجموعة الديناميكية عند اللحظة الخاصة ربما يحدد بواسطة اتجاه a bra vector وهذا يؤكد اتجاه ket vector.

(I) $|A\rangle + \ \ |B\rangle \rightarrow \langle A| + |B\rangle$

And

$C|B\rangle = \overline{C}\langle A|$

حيث C عدد مركب ومرافقها هو $\overline{C}$

(II) $\langle A|B\rangle = \overline{\langle B|A\rangle}$

بوضع $|A\rangle = |B\rangle$ *وهنا نجد* أن العدد $\langle A|A\rangle$ يحب أن يكزن حقيقي. *وبهذا الافتراض نجد* أن

$$\langle A|A\rangle \geq 0 \text{ واشارة المتباينة تحسب فقط عندما } |\mathrm{A}\rangle = 0 \qquad (3.4)$$

أذا كانت $\langle A|B\rangle = 0$ *اذن يقال عن* $\langle A|$ bra vector انها عمودي علي $|\mathrm{B}\rangle$ *the ket vector*

أي أثنين من bras أو اثنين من kets سوف يقال عنهما متعامدان اذا كان حاصل الضرب القياسي لاحداهما مع مرافق الاخر المساوي للصفر ولهذا أذا كان المتجهان

ولهذا اذا كان المتجهان , $|A_2\rangle$ $|A_1\rangle$ يكونان متعامدان أذا كان $\langle A_2|A_1\rangle = 0$ وعلاوة علي ذلك المنزلتان للمجموعة الديناميكية سوف يقال انهما متعامدان اذا كان المتجهان تناظران هاتان المنزلتان المتعامدان

يقال عن a ket $|A\rangle$ انها متطبعة اذا كانت (3.5) $\langle A|A\rangle = 1$

٢- <u>المؤثرات الخطية</u>:-

نفرض أن كل ket $|A\rangle$ للفراغ الاتجاهي لها نظير مؤثر ket $|B\rangle$ وسوف نرمز للمؤثر الخطي بالرمز α أي أن

$$|B\rangle = \alpha|A\rangle \qquad (3.6)$$

ينعدم المؤثر α (the null operator) اذا كان $|B\rangle = 0$ لجميع قيم $|A\rangle$. الشرط الضروري والكافي لجميع قيم $|A\rangle$ في حالة انعدام المؤثر α هو

$$\langle A|\alpha|A\rangle = 0 \qquad (3.7)$$

اذا تساوي المؤثران α, β فان الشرط الضروري والكافي لجميع قيم $|A\rangle$ هو:

$$\langle A|\alpha|A\rangle = \langle A|\beta|A\rangle \qquad (3.8)$$

وفي حالة جمع المؤثرات $(\alpha + \beta)$ نجد أن

$$(\alpha + \beta)|A\rangle = \alpha|A\rangle + \beta|A\rangle \qquad for\ any\ |A\rangle \qquad (3.9)$$

حاصل ضرب المؤثرين α, β نجد أن

$$\{\alpha\, \beta\}|A\rangle = \alpha\{\beta|A\rangle\} \qquad for\ any\ |A\rangle \qquad (3.10)$$

وفي حالة علاقة عدم التبديل نجد أن

$$\alpha\beta|A\rangle \neq \beta\alpha\,|A\rangle \qquad for\ any\ |A\rangle \qquad (3.11)$$

في هذة الحالة نجد أن α, β يتبادلان ، اي أن $\alpha\beta = \beta\alpha$

اذا اثر المؤثر الخطي α علي $bra\ A$ والناتج يكتب علي صورة حاصل ضرب $\langle A|\alpha$ وبهذا الفرض نجد أن

$$\{\langle B|\alpha\}|A\rangle = \langle B|\{\alpha\,|A\rangle\} \qquad for\ any\ |A\rangle \qquad (3.12)$$

اذا اعطي $ket\ |A\rangle, bra\langle B|$ ونعبر عن حاصل ضربهم بالصورة $|A\rangle\,\langle B|$ التي يمكن تفسيره بواسطة قانون ترتيب الحدود

$$\{|A\rangle\langle B|\}|P\rangle = |A\rangle\{\langle B|P\rangle\} = C|A\rangle \qquad for\ any\ |P\rangle$$

حيث $C = \langle B|P\rangle$ يكون عدد مركب . ويتضح أن تاثير $|\mathrm{A}\rangle\langle B|$ علي $ket\ |\mathrm{P}\rangle$ يعطي ket اخر الذي يعتمد علي المؤثر الخطي ومن ثم هو مؤثر خطي.

وبالمثل المؤثر $|\mathrm{A}\rangle\langle B|$ علي $bra\ |\mathrm{P}\rangle$. وفي الحالة العامة المؤثرات الخطية يمكن اعتبارها مركبة اذا اعطي أي مؤثرخطي α يكون لها مؤثر خطي مرافق $\overline{\alpha}$ ويعرف كالاتي

$$\langle A|\overline{\alpha}|B\rangle = \overline{\langle\ B|\alpha|A\ \rangle} \qquad (3.13)$$

حيث $\overline{\langle\ B|\alpha|A\ \rangle}$ تكون مرافق للعدد المركب $\langle\ B|\alpha|A\ \rangle$ والان

$$\left\langle A\middle|\overline{\overline{\alpha}}\middle|B\right\rangle = \langle A|\overline{\beta}|B\rangle\,; \qquad (\beta = \overline{\alpha})$$

$$= \overline{\langle\ B|\beta|A\ \rangle}$$

$$= \overline{\langle\ B|\overline{\alpha}|A\ \rangle}$$

$$= \overline{\overline{\langle\ A|\alpha|B\ \rangle}}$$

$$= \langle A|\alpha|B\rangle$$

للحصول علي المرافق لحاصل ضرب المؤثرين الخطيين α, β بوضع

$$\alpha|\mathrm{A}\rangle = |\mathrm{P}\rangle$$

Thus

$$\langle A|\overline{\alpha}|B\rangle = \overline{\langle\ B|\alpha|A\ \rangle} = \overline{\langle B|P\rangle} = \langle P|B\rangle$$

وهذه المعادلة تعتبر لجميع قيم $ket\ |\mathrm{B}\rangle$ *كذلك* $\langle A|\overline{\alpha} = \langle P|$ *هي مرافق* $\alpha|\mathrm{A}\rangle$

والخطوة التالية: بالنسبة إلي المؤثران α, β نجد أن $\langle A|\overline{\alpha\beta}$ *يكون مرافق* $\alpha\beta|\mathrm{A}\rangle$ *ولكن*

$$conjugate\ of\ \alpha\beta|\mathrm{A}\rangle = conjugate\ of\ |\mathrm{Q}\rangle = \langle Q|\overline{\alpha}$$

$Where\ |\mathrm{Q}\rangle = B|\mathrm{A}\rangle$

$$= \langle A|\overline{\alpha\beta}$$

ولذلك فان . $\overline{\alpha\beta} = \overline{\beta}\,\overline{\alpha}$ *وبالمثل أذا كان اكثر من مؤثران نجد ان*

$$\overline{\alpha\beta\gamma \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots} = \overline{\gamma}\,\overline{\beta}\,\overline{\alpha} \qquad (3.15)$$

وفي بعض الاحيان يقال عن المؤثر الخطي α *مؤثر مرافق لنفسه عندما*

$$\alpha = \overline{\alpha} \qquad (3.16)$$

٣- الاعداد المميزة والمتجهات المميزة

3- Eigen values and Eigen vectors

نعتبر المعادلة

$$\alpha|p\rangle = a|\mathrm{p}\rangle \qquad (3.17)$$

حيث α مؤثر خطي، a عدد و $|p\rangle \neq 0$ وفي هذه الحالة تعرف a بالعدد المميز للمؤثر α ، $|p\rangle$ تكون *eigen ket* للمؤثر α . المنسوبة إلي العدد المميز. ومن خاصية *eigen ket* تكون معتمدة فقط علي أتجاه *the ket* . اذا كان لدينا اثنين من *eigen kets* منسوبة إلي نفس العدد المميز، واي أرتباط خطي لهم سوف يكون ايضا *eigen ket* منسوبة إلي نفس العدد المميز: إذا كان

$$|\mathrm{p}\rangle = c_1|A_1\rangle + c_2|A_2\rangle$$

حيث c_1, c_2 عددان مركبان مع أعتبار أن

$$\alpha|A_1\rangle = a|A_1\rangle \quad and \quad \alpha|A_2\rangle = a|A_2\rangle$$

Then

$$\alpha|p\rangle = \alpha[c_1|A_1\rangle + c_2|A_2\rangle]$$

$$= a[c_1|A_1\rangle + c_2|A_2\rangle]$$

$$= a|p\rangle$$

بما أن الصيغة تكون متماثلة بالنسبة إلي kets, bras ، *سوف نعتبر أيضا معادلة* العدد المميز

$$\langle Q|\alpha = b\langle Q|$$

حيث عدد و $\langle Q| \neq 0$ وكذلك لدينا لأي مؤثر خطي يوجد نوعان للعددان المميزان المصاحبان إلي $kets, bras$ علي الترتيب.

نفرض أن α يكون حقيقي $\alpha = \overline{\alpha}$ ونفرض أن $\alpha|p\rangle = a|\mathrm{p}\rangle$

وبضرب طرفيها بواسطة $\langle p|$ نحصل علي

$$\langle p|\alpha|p\rangle = a\langle p|p\rangle$$

الان $\langle p|p\rangle$ يكون حقيقي ولا يساوي الصفر وبما أن

$$\langle p|\alpha|p\rangle = \overline{\langle p|\overline{\alpha}|p\rangle} = \overline{\langle p|\alpha|p\rangle}$$

يكون أيضا حقيقي ، a يجب أن يكون حقيقي.

لذلك فان الاعداد المميزة للمؤثر الخطي الحقيقي يكون اعداد حقيقة

المعادلة المرافقة هي

$$\langle p|\overline{\alpha} = a\langle p| \qquad or\ \langle p|\alpha = a\langle p|$$

لذلك فان العددان المميزان واحد بالنسبة لكلا النوعين و $eigen\ kets$ يكون لها مرافقات هي $eigen\ bras$

سوف نثبت الان شرط التعامد بالنسبة للمؤثرات الخطية. اذا كان لدينا عددان مميزان $a\ , b\ (\neq 0)$ مع $|B\rangle\ \ , |A\rangle$ اذن

$$\alpha|A\rangle = a|\mathrm{A}\rangle$$

$$\alpha|B\rangle = b|\mathrm{B}\rangle$$

بأخذ مرافق للمعادلة التانية $\langle B|\alpha = b\langle B|$ وبعد اجراء عملية الضرب

$$\langle B|\alpha|A\rangle = a\langle B|A\rangle = b\langle B|A\rangle \qquad (3.18)$$

ومن ثم اذا كانت $a \neq b$ ، $\langle B|A\rangle = 0.$ فان المتجهان المميزان للمتغيرات الديناميكية القياسية منسوبة إلي العددان المميزان المختلفان يكونان متعامدان وهذا هو شرط التعامد.

نعتبر eigen kets $|n\rangle$ للمؤثر الخطي القياسي يحقق الشروط الاتية

(i) لهم صورة المجموع الكاملة أي أن لكل $|p\rangle$ ket يمكن التعبير عنها بالارتباط الخطي ل the eigen kets

$$|p\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \qquad (3.19)$$

(ii) يكون لهم شرط المعايرة العمودية

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \qquad (3.20)$$

(iii) يكون لهم الاستقلال الخطي أي أن

$$\sum_n a_n |n\rangle = 0 \qquad (3.21)$$

اذن لكل حد يحب ان يساوي الصفر لذلك فأن (3.22) $a_n = 0$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \qquad (3.23)$$

حيث 1 يكون مؤثر الوحدة الخطي . ونلاحظ من الشرطان السابقان(i) ,(ii) يمكن اشتقاق علاقتان هامتان. بضرب العلاقة (3.21) بواسطة $\langle m|$ نجد أن

$$0 = \sum a_n \langle m|n\rangle = \sum_n a_n\, \delta_{mn} = a_m$$

الخطوة التالية بضرب $|p\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$ في $\langle m|$ نحصل علي

$$\langle m|p\rangle = \sum a_n \langle m|n\rangle = \sum_n a_n\, \delta_{mn} = a_m$$

لذلك فان

$$|p\rangle = \sum_n \{\langle n|p\rangle\} |n\rangle$$

Or

$$|p\rangle = \left[\sum_n |n\rangle\langle n|\right]|p\rangle \qquad (for\ any\ ket\ |p\rangle) \qquad (3.24)$$

وعلي ذلك فان $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$. الان اي $ket\ |p\rangle$ يمكن التعبير عنها بدلالة $ket\ |n\rangle$ مع المعاملات $\langle n|p\rangle$. وهذه المعاملات تكون احداثيات $|p\rangle$. بالمثل $bra\langle Q|$ *يمكن التعبيرعنها بدلالة* $bra\langle n|$ مع المعاملات $\langle Q|n\rangle$ التي تكون هذه احداثيات $bra\langle Q|$

اذا كانت α *هي اي مؤثر خطي اذن يكون لها نظام مزدوج للاحداثيات* $\langle n|\alpha|m\rangle$

التي يمكن كتابتها في صورة مصفوفة مربعة:-

$$\begin{bmatrix} \langle 1|\alpha|1\rangle & \langle 1|\alpha|2\rangle & \langle 1|\alpha|3\rangle \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \langle 2|\alpha|1\rangle & \langle 2|\alpha|2\rangle & \langle 2|\alpha|3\rangle \ldots\ldots\ldots \\ . & . & . \ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ & & \\ & & \end{bmatrix} \qquad (3.25)$$

والشرط الذي يحقق ان α *تمثل المتغير الديناميكي هو* $\alpha = \overline{\alpha}$ *ولهذا فان*

$$\langle n|\alpha|m\rangle = \overline{\langle\, m|\alpha|n\,\rangle}$$

٤- العلاقة بين ket والدوال الموجية

4-Relationship between kets and wave functions

الان نوجد العلاقة المتطورة بين وصف المنازل للجسيم بدلالة دوال شرودنجر الموجية ومتجهات ket,bra المتطورة في هذا الباب. وتخصص دراستنا في حالة بعد واحد.

نعتبر ان $|\Psi\rangle$ و $|D\rangle$ تمثل kets التي تناظر المناظر الموصوفة بالدوال الموجية $\Psi(X), \emptyset(X)$ علي الترتيب ، حاصل ضربهما القياسي يعرف بالعلاقة الاتية: اي أن

$$\langle D|\Psi\rangle = \int \emptyset^* \ \Psi(X)\ dx = \overline{\langle\Psi|\emptyset\rangle} \qquad (3.26)$$

نعتبر $|\acute{X}\rangle$ تمثل المنزلة ويكون الجسيم مرتكزعند النقطة $\acute{x}$ والتي تناظر الدالة المميزة $\delta(X-\acute{X})$ لذلك فان

$$\langle\acute{X}|\Psi\rangle = \int \delta(X-\acute{X})\Psi(X)dx = \Psi(\acute{x})$$

Or

$$\Psi(X) = \langle X|\Psi\rangle \qquad (3.27)$$

Now

$$\langle\emptyset|\Psi\rangle = \int \emptyset^*(X)\Psi(X)dX = \int dX\ \overline{\langle X|\emptyset\rangle}\ \ \langle X|\Psi\rangle$$

$$\langle\emptyset|\Psi\rangle = \int dX\ \langle\emptyset|X\rangle\ \ \langle X|\Psi\rangle$$

$$= \int\langle Q|\{\int dX\ |X\rangle\ \langle X|\}\,|\Psi\rangle$$

ومن هذه العلاقة يتضح أن الكمية داخل القوس يحب أن يكون مؤثر الوحدة . أي أن

$$\int dX\ |X\rangle\ \langle X| = 1 \qquad (3.28)$$

Or

$$|\Psi\rangle = \int dX\ |X\rangle\ \langle X|\Psi\rangle = \int dX\ \Psi(X)|X\rangle$$

التي تمثل التعبير $ket\ |\Psi\rangle$ بدلالة $ket\ |X\Psi\rangle$ ولذلك فان

$$\Psi(X) = \langle X|\Psi\rangle = \int dX\langle X|X\rangle\ \Psi(X)$$

حيث أن $\Psi(X)$ أختيارية نجد أن

$$\langle X|\acute{X}\rangle = \delta(X-\acute{X}) \qquad (3.29)$$

نعمم المعادلات السابقة في حالة الثلاث ابعاد علي النحو التالي

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} \,|\Psi\rangle \qquad (3.30)$$

$$\int d^3r \,|\vec{r}\rangle \,\langle \vec{r}| = 1 \qquad (3.31)$$

$$\langle \vec{r}|\acute{\vec{r}}\rangle = \delta(r - \acute{r}) \qquad (3.32)$$

الخطوة التالية ، نعتبر تحويل فورير بالنسبة إلي $\Psi(\vec{r})$:

$$a(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}.\vec{r}\right) \Psi\,(\vec{r}) \qquad (3.33)$$

وعكس هذا التحويل يعطي بالعلاقة

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}.\vec{r}\right) a\,(p) \qquad (3.34)$$

التي تؤدي الي أي منزلة يكون لها ارتباط خطي لكمية حركة المنازل المميزة

$exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}.\vec{r}\right)$ نعتبر$|\vec{p}\rangle$ ترمز الي *ket vector* التي تناظر الدالة الموجية المستوية $exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}.\vec{r}\right) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$ اذن

$$\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}.\vec{r}\right) \qquad (3.35)$$

$$a(\vec{p}) = \int d^3r\,\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\Psi\rangle = \langle \vec{p}|\Psi\rangle \qquad (3.36)$$

حيث استخدمنا المعادلتان (3.29), (3.28) فان المعادلة(3.34) يمكن كتابتها علي الصورة

$$\langle \vec{r}|\Psi\rangle = \Psi(\vec{r}) = \int d^3p\,\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\Psi\rangle$$

Or

$$\langle \vec{r}|\Psi\rangle = \langle \vec{r}|\{\int d^3p\ |\vec{p}\rangle\ \langle \vec{p}|\}|\Psi\ \rangle \qquad (3.37)$$

التي تؤول الي

$$|\Psi\rangle = \int d^3p\ |\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\Psi\rangle \qquad (3.38)$$

المعادلة (3.37) تعطي مركبات المعادلة الاتجاهية (3.38) في القاعدة $|\vec{r}\rangle$ وبما ان $|\Psi\rangle$ تكون تكون اختيارية

نجد ان

$$\int d^3p\ |\vec{p}\rangle\langle \vec{p}| = 1 \qquad (3.39)$$

حيث ان الطرف الايمن من هذه المعادلة يرمز الي مؤثر الوحدة . باخذ

$|\Psi\rangle = |\vec{r}\rangle$ في المعادلة (3.38) *نحصل علي*

$$|\vec{r}\rangle = \int d^3p\ |\vec{p}\rangle\ \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle \qquad (3.40)$$

Or

$$\langle \acute{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \int d^3p\ \langle \acute{\vec{r}}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle$$
$$= \delta(\vec{r} - \acute{\vec{r}}) \qquad (3.41)$$

حيث استخدمنا المعادلة (3.32) لهذا نجد أن

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\ p\,.(\vec{r} - \acute{\vec{r}})\right] d^3p = \delta(\vec{r} - \acute{\vec{r}}) \qquad (3.42)$$

٥- <u>المتذبذب التوافقي الخطي</u>

<u>5- The linear Harmonic Oscillator: -</u>

سوف نوضح استخدام ملاحظات دراك لحل اهم مسألة للمتذبذب . وبما أن دالة هاميلتون تعطي بالعلاقة التالية

$$H = (p^2 + m^2\omega^2x^2) \qquad (3.43)$$

والهدف الان هو حل معادلة العدد المميز

$$H|\acute{H}\rangle = \acute{H}\,|\acute{H}\rangle \qquad (3.44)$$

مع المتغيرات الديناميكية p,x التي تحقق العلاقة الغير متبادلة

$$[x, p] = xp - px = i\hbar \qquad (3.45)$$

في المعادلة (3.44) ، $|\acute{H}\rangle$ هي eigen ket *للمؤثر* H *منسوب اليه العدد المميز* $\acute{H}$
من المناسب ادخال المتغير الديناميكي المركب

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\,m\,\hbar\omega}}(m\omega x + ip) \qquad (3.46)$$

ومرافقتها هو

$$\overline{a} = \frac{1}{\sqrt{2\,m\,\hbar\omega}}(m\omega x - ip) \qquad (3.47)$$

بدلالة المؤثرات السابقة نجد أن :-

$$\hbar\omega a\overline{a} = \frac{1}{2m}(m\omega x + ip)(m\omega x - ip)$$

$$\hbar\omega a\overline{a} = \frac{1}{2m}[m^2\omega^2x^2 + p^2 - im\omega(xp - px)]$$

$$= H + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3.48)$$

حيث استخدمنا المعادلتان(3.43), (3.45) *بالمثل*

$$\hbar\omega a\overline{a} = H - \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3.49)$$

Thus

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(\,\overline{a}a + a\overline{a}) \qquad (3.50)$$

And

$$(a\overline{a} - \overline{a}a) = [a, \overline{a}] = 1 \qquad (3.51)$$

For Eq. (3.48)

$$\hbar\omega\overline{a}a = Ha + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3.52)$$

And from Eq.(3.49)

$$\hbar\omega a\overline{a}a = aH - \frac{1}{2}\hbar\omega a \qquad (3..53)$$

Thus

$$aH - Ha = [a, H] = \hbar\omega a \qquad (3.54)$$

Similarly

$$\overline{a}H - H\overline{a} = [\overline{a}, H] = -\hbar\omega a \qquad (3.55)$$

Let

$$|p\rangle = \alpha|\acute{H}\rangle$$

حيث $|\acute{H}\rangle$ يكون eigen ket *للمؤثر* H *وينسب العدد المميز* $\acute{H}$ *الي المؤثر* H
(انظرالمعادلة *3.44*) اذن

$$\hbar\omega\langle P|P\rangle = \hbar\omega\langle\acute{H}\,|\overline{a}a|\acute{H}\rangle$$

$$= \langle\acute{H}|H - \tfrac{1}{2}\hbar\omega|\acute{H}\rangle \quad using\ Eq.(3.49)$$

$$= \left(\acute{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\langle\acute{H}|\acute{H}\rangle \qquad using\ Eq.(3.44)$$

ولكن $\langle p|p\rangle$ *و* $\langle\acute{H}|\acute{H}\rangle$ *يكونان اعداد موجبة (انظر المعادلة 3.4) ولذلك نجد أن*

$$\acute{H} > \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3.56)$$

والمتابينة علي هذه الحالة تحدث فقط اذا كانت $a|\acute{H}\rangle = 0$

الخطوة التالية، *نعتبر ان المؤثر* Ha *يؤثر علي* $|\acute{H}\rangle$

$$Ha|\acute{H}\rangle = [aH - \hbar\omega a]|\acute{H}\rangle \qquad using\ Eq.(3.44)$$

$$= (a\,\acute{H} - \hbar\omega a)|\acute{H}\rangle$$

$$= (\acute{H} - \hbar\omega)a|\acute{H}\rangle$$

ولهذا أذا كانت $\acute{H} - \hbar\omega$ ، $a|\acute{H}\rangle \neq 0$ *وطبقا ألي المعادلة (3.57) اذن هي* *eigen ket* *للمؤثر* H *منسوب اليه العدد المميز* $\acute{H} - \hbar\omega$. ولهذا اذا كانت $\acute{H}$ هي لاي عدد مميز للمؤثر H لا تساوي $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ، $\acute{H} - \hbar\omega$ هي العدد المميز الاخر للمؤثر H . ويمكن تكرار هذه المناظرة، واذا كانت $\acute{H} - \hbar\omega \neq \frac{1}{2}\hbar\omega$ اذن $\acute{H} - \hbar\omega$ تكون ايضا المميز للمؤثر H . وباستمرار هذه الطريقة ، نحصل علي متسلسلة الاعداد المميزة

$$\acute{H}\,, \acute{H} - \hbar\omega, \acute{H} - 2\hbar\omega, \acute{H} - 3\hbar\omega, \dots\dots\dots\dots\dots$$

التي لا يمكن فكها الي الانهاية والسبب انها تحتوي علي الاعداد المميزة المخالفة الي المعادلة (3.56) ولهذا يمكن تعيينها بالقيمة $\frac{1}{2}\hbar\omega$ من المعادلة (3.55)

$$H\bar{a}|\acute{H}\rangle = [\,\bar{a}H + \hbar\omega\bar{a}]$$

$$= (\,\bar{a}\,\acute{H} + \hbar\omega\bar{a})|\acute{H}\rangle$$

$$= \;(\acute{H} + \hbar\omega)\bar{a}|\acute{H}\rangle \qquad (3.58)$$

ينتج أن $(\acute{H} + \hbar\omega)$ هي العدد المميز الاخير للمؤثر H، مع $\bar{a}|\acute{H}\rangle$ هي eigen ket *منسوبة ألي العدد المميز ، ما لم* $\bar{a}|\acute{H}\rangle = 0$ *بينما* $|\acute{H}\rangle$ *لا يمكن أن تساوي الصفر أي أن*

$$0 = \hbar\omega a\bar{a}\;|\acute{H}\rangle = \left(H + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)|\acute{H}\rangle \qquad using\ Eq.(3.48)$$

$$= (\acute{H} + \frac{1}{2}\hbar\omega)|\acute{H}\rangle$$

وهذه تعطينا $\acute{H} + \frac{1}{2}\hbar\omega = 0$ *،والتي تخالف المعادلة (3.56) ولهذا اذا كانت* $\acute{H}$ *هي العدد المميز، اذن* $\acute{H} + \hbar\omega$ هي دائما العدد المميز الاخر للمؤثر H وكذلك تكون $\acute{H} + 2\hbar\omega,\ \acute{H} + 3\hbar\omega,\ \acute{H} + \hbar\omega, \dots\dots\dots\dots\dots\dots$

وهكذا ولهذا فان الاعداد المميزة لمؤثر هامليتون بالنسبة الي المتذبذب التوافقي هي

$$\frac{1}{2}\hbar\omega, \frac{3}{2}\hbar\omega, \frac{5}{2}\hbar\omega, \frac{7}{2}\hbar\omega, \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots..$$

ويمكن فكها الي الانهاية .

والن نعبر عن الدوال المميزة بالدليل n ، فان $|n\rangle$ ترمز الي الدالة المميزة التي تناظر العدد المميز $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle \qquad (3.60)$$

نفرض أن المنازل $|n\rangle$ تحقق شرط المعايرة العمودي. اي ان $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$

والان $a|n\rangle$ هي eigen ket للمؤثر H منسوب اليه العدد المميز $\left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ (انظر المعادلة (*3.57*) اي ان

$$a|n\rangle = a_n|n-1\rangle \qquad (3.62)$$

والمطلوب الان تعيين a_n

$$where\ \langle n|\bar{a}\ a|n\rangle = |a_n|^2\langle n-1|n-1\rangle = |a_n|^2 \quad (3.63)$$

But

$$\hbar\omega\langle n|\bar{a}\ a|n\rangle = \left\langle n\middle|(H - \frac{1}{2}\hbar\omega\middle|n\right\rangle \qquad using\ Eq.(3.49)$$

$$= \left\langle n\middle|\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega\middle|n\right\rangle$$

$$= n\hbar\omega\langle n|n\rangle = n\hbar\omega$$

Thus

$$|a_n|^2 = n$$

And therefore

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad (3.64)$$

Similarly

$$\bar{a}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad (3.63)$$

المؤثر a *طبقا للمعادلة* (3.64) *يطلق عليه مؤثر اخفاء او امتصاص للجسيمات*

Annihilation or destruction operator

بالمثل المؤثر $\bar{a}$ *طبقا للمعادلة* (3.65) *يطلق عليه مؤثر اظهار أو توليد الجسيمات*
Greation operator *ولهذا فان* $|0\rangle$ *ترمز الي ادني منزلة* *(ground state)*
اذن

$$|1\rangle = \frac{\bar{a}}{\sqrt{1}}|0\rangle \ ; \qquad |2\rangle = \frac{\bar{a}\,\bar{a}}{\sqrt{1}\sqrt{2}}|0\rangle$$

$$|0\rangle = \frac{(\bar{a}\,)^2}{\sqrt{2!}}|0\rangle \ ; \qquad |3\rangle = \frac{(\bar{a}\,)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle$$

And in general ,

$$|n\rangle = \frac{(\bar{\alpha})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \qquad (3.66)$$

والان المطلوب تعيين الدالة الموجية للمتذبذب المعطي بواسطة $\langle x|n\rangle$
انظرالمعادلة (3.28)

ادني منزلة the eigen ket هي $|0\rangle$ بحيث ان $a\,|0\rangle = 0$ لذلك

$$\langle x|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\langle x|m\omega x + ip|0\rangle \qquad using\ Eq.(3.46)$$

$$= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, \frac{d}{dx}\right) \langle x|0\rangle \qquad (3.67)$$

حيث استخدمنا العلاقة $\langle x|p|0\rangle = -i\,\hbar \frac{d}{dx}\, \langle x|0\rangle \qquad (3.68)$

Thus

$$\frac{d}{dx}\, \langle x|0\rangle + \frac{m\omega}{\hbar} x\, \langle x|0\rangle = 0$$

وحل هذه المعادلة تعطي بالعلاقة

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \qquad (3.69)$$

حيث عين الثابت باستخدام شرط المعايرة

$$\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\langle x|0\rangle|^2 = 1$$

لكي نحسب الدوال الموجية بالنسبة الي المنازل المثارة سوف ندخل الاشكال التالية:

$$\langle x|1\rangle = \langle x|\bar{a}|0\rangle = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, \frac{d}{dx}\right] \langle x|0\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x\, \left[\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right]^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

In general,

$$\langle x|n\rangle = \left[\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\; x\right) \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \qquad (3.70)$$

حيث هي الدوال الهرميتية كثيرة الحدود.

وهذه الدوال الموحية تخضع لشرط المعايرة العمودية :-

$$\langle m|n\rangle = \int \langle m|x\rangle\langle x|n\rangle\, dx = \delta_{mn} \qquad (3.71)$$

٦- صور شرودنجر وهيزنبرج:

6- the Schrodinger and Heisenberg pictures: -

سوف نحصل اولا علي ket الاختياري الذي يعتمد علي الزمن ، ويمكن التعبير عن منزلة المجموعة بواسطة ket التي يمكن دائما التعبير عن eigen kets بالارتباط الخطي للمجموعة الكاملة. وباختيار eigen kets (t = 0) للمؤثر هامليتون H . اي ان

$$H|E\rangle = E|E\rangle \qquad (3.72)$$

اذن يعبر عن اي $|\Psi\rangle$ بالعلاقة الاتية

$$|\Psi\rangle = \sum_E a_E\, |E\rangle \qquad (3.73)$$

بضرب هذه العلاقة من ناحية اليسار بواسطة $\langle \acute{E}|$ ونستخدم شرط المعايرة العمودي، نجد ان

$$\langle \acute{E}|\Psi\rangle = a_{\acute{E}} \qquad (3.74)$$

فان (3.73) تكتب علي الصورة

$$|\Psi\rangle = \sum_E |E\rangle\, \langle E|\Psi\rangle \qquad (3.75)$$

وهي توضح الصورة الكاملة للمجموعة حيث $|E\rangle$ eigen ket عند الزمن $t=0$ ، والمعادلة (3.57) تكزن صحيحة ايضا بالنسبة الي الزمن $t \neq 0$ ولهذا تكتب علي الصورة

$$|\Psi(t)\rangle = \textstyle\sum_E |E\rangle\, \langle E|\Psi(t)\rangle \qquad (3.76)$$

معادلة شرودنجر التي تعتمد علي الزمن هي

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \qquad (3.77)$$

اذا كانت دالة هامليتون لا تعتمد صراحة علي الزمن . يمكن اجراء التكامل علي المعادلة السابقة نحصل علي

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle \qquad (3.78)$$

وهذه المعادلة هي حل المعادلة التفاضلية (3.77) *وباستخدام المعادلة* (3.75) نجد *ان*

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}\sum_{E}|E\rangle\,\langle E|\Psi(0)\rangle \qquad (3.79)$$

Or

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{E} e^{\frac{-i\,Et}{\hbar}}\,|E\rangle\langle E|\Psi(0)\rangle \qquad (3.80)$$

وبما أن H هي دالة هرميتية ، نحصل علي

$$\langle\Psi(t)| = \left\langle\Psi(0)|e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}\right. \qquad (3.81)$$

اذن the ket (3.80) تصف منزلة المجموعة التي تعتمد صراحة علي الزمن.

الان سوف نعبر عن القيم المتوسطة للمؤثرات علي الصورة التالية

$$\langle 0\rangle = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i\,Ht}{\hbar}}\;o\;e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}\,|\Psi(0)\rangle$$

Or

$$\langle 0\rangle = \langle\Psi(0)|\;O_H(t)|\Psi(0)\rangle \qquad (3.82)$$

حيث المؤثر $O_H(t)$ تعرف بالمعادلة الاتية

$$O_H(t) = e^{\frac{i\,Ht}{\hbar}}\;o\;e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}} \qquad (3.83)$$

المعادلتان (3.83) ,(3.82) *تدل علي نفس القيمتان المتوسطتان واذا كان المؤثر* $O_H(t)$ *يعتمد بالكامل علي الزمن ولكن نفرض أن* kets *تكون غير معتمدة علي الزمن ولذلك يطلق عليها صورة هيزنبرج* Heisenberg picture *ومن ثم تكتب* H *من اسفل المؤثر* O *(*انظر المعادلة (*3.83*)) والصورة العادية في الدالة الموجية التي تعتمد علي الزمن المعبر عنها في المعادلة *(3.80)* يطلق عليها صورة شرودنجر the Schrodinger picture . *من المعادلة* (3.83) *نحصل علي*

$$\frac{dO_H(t)}{dt} = e^{\frac{i\,Ht}{\hbar}}\,\frac{\partial O}{\partial t}\,e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar}\,e^{\frac{i\,Ht}{\hbar}}\,[HO - OH]e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}$$

حيث $\frac{\partial O}{\partial t}$ يدخل في اعتباران المؤثر O يعتمد صراحة علي الزمن، واذا كان المؤثر O لا يعتمد صراحة علي الزمن ($\frac{\partial O}{\partial t} = 0$) فان المعادلة السابقة تصبح

$$i\,\hbar\,\frac{dO_H(t)}{dt} = [\,e^{\frac{i\,Ht}{\hbar}}\,O\,e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}]\,H - H[\,e^{\frac{i\,Ht}{\hbar}}\,O\,e^{\frac{-i\,Ht}{\hbar}}]$$

$$= O_H(t)\,H - H\,O_H(t)$$

Or

$$i\,\hbar\,\frac{dO_H(t)}{dt} = [O_H(t), H] \qquad (3.84)$$

وهي معادلة هيزنبرج للحركة.

والان سوف نحصل ايضا علي صورة التفاعل الكامل وبكتابة دالة هامليتون علي النحو التالي:-

$$H = H_0 + \acute{H} \qquad (3.85)$$

بحيث تكون H_0 تمثل دالة هامليتون للجزء من المجموعة يكون التفاعل بينهما منعدم بينما $\acute{H}$ تمثل التفاعل ذاته نبدأ بصورة شرودنجر، نحصل علي

$$i\,\hbar\frac{\partial|\Psi_s\rangle}{\partial t} = \left(\acute{H}_0 + \acute{H}\right)|\Psi_s\rangle \qquad (3.86)$$

حيث s ترمز الي سلوكه مع صورة شرودنجر، ندخل صورة التفاعل (the interaction picture)

$$|\Psi_{int}\rangle = e^{\frac{i\,H_0 t}{\hbar}}\,|\Psi_s\rangle$$

Or

$$|\Psi_s\rangle = e^{\frac{-i\,H_0 t}{\hbar}}\,|\Psi_{int}\rangle \qquad (3.87)$$

وبالتعويض في (3.86) نحصل علي

$$i\,\hbar e^{\frac{-i\,H_0 t}{\hbar}}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{int}\rangle = \acute{H}\ \ e^{\frac{-i\,H_0 t}{\hbar}}\ \ |\Psi_{int}\rangle \qquad (3.88)$$

بضرب طرفي هذه المعادلة من ناحية اليسار في $e^{\frac{i\,H_0 t}{\hbar}}$ *وتكتب*

$$\acute{H}_{int} = e^{\frac{i\,H_0 t}{\hbar}}\ \acute{H}\ e^{\frac{-i\,H_0 t}{\hbar}} \qquad (3.89)$$

نحصل علي معادلة الحركة في صورة التفاعل هي

$$i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ |\Psi_{int}\rangle = \acute{H}_{int}\ |\Psi_{int}\rangle \qquad (3.90)$$

في الحقيقة كل المؤثرات O تتغير طبقا للعلاقة *(3.89)* اي ان

$$O_{int} = e^{\frac{i\,H_0 t}{\hbar}}\ O\ e^{\frac{-i\,H_0 t}{\hbar}} \qquad (3.91)$$

ويتضح أن صورة التفاعل هي حالة تنسيق للوسط بين صورتي شرودنجر وهيزنبرج ونري من المعادلتان *(3.83),(3.82)* بالنسبة الي اي مؤثر الذي يتبادل مع هاميلتون هو مؤثر صورة شرودنجر الذي يطابق صورة هيزنبرجز

مسائل محلولة

١- نعتبر ان P_0 هو المؤثر الذي يناظر كمية الحركة أثبت أن

$$\text{(i)}\quad \overrightarrow{P_0} = \int d^3p\ \ p\,|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| \qquad (3.92)$$

$$\text{(ii)}\quad \langle\vec{r}|\overrightarrow{P_0}|\vec{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\,\nabla\,\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \qquad (3.93)$$

$$\text{(iii)}\quad \langle\vec{r}|\overrightarrow{P_0}|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\,\nabla\,\langle\vec{r}|\Psi\rangle \qquad (3.94)$$

$$\text{(iv)}\quad \langle\emptyset|\overrightarrow{P_0}|\Psi\rangle = \overline{\langle\Psi|\overrightarrow{P_0}|\emptyset\rangle} \qquad (3.95)$$

ماذا يكون المؤثر $\overrightarrow{P_0}$ الذي يناظر كمية الحركة ؟

نعتبر الجسيم الذي يكون في المنزلة ولها القيمة الكاملة لكمية الحركة $\overrightarrow{P_0}$. الدالة الموحية بدلا من المنزلة هي الموجه المستوية $\exp(i\,\vec{p}\,.\,\vec{r}\,/\hbar)$ $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$ تناظر *ket vector* للمنزلة ويرمز لها بالرمز $|\,\vec{p}\rangle$ ويتضح أن $|\,\vec{p}\rangle$ *eigen ket* للمؤثر $\overrightarrow{P_0}$ مع العدد المميز $\vec{p}$

$$\overrightarrow{P_0}\,|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,|\,\vec{p}\rangle \qquad (1)$$

اذا اثر $\overrightarrow{P_0}$ علي الكات (ket) *الاختياري* $|\,\Psi\rangle$ نحصل علي

$$\overrightarrow{P_0}\,|\Psi\rangle = \int d^3p\ \ \vec{p}\,|\,\vec{p}\rangle\,\langle\vec{p}|\Psi\rangle \qquad (2)$$

حيث استخدمنا المعادلة (3.38)

وبما ان $|\Psi\rangle$ تكون كات أختيارية يمكن تمثيل $\overrightarrow{P_0}$ بالمعادلة الاتية

$$\overrightarrow{P_0} = \int d^3p\ \ \vec{p}\,|\,\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| \qquad (3)$$

$$\text{(ii))}\ \langle\vec{r}|\overrightarrow{P_0}|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle$$

$$= \vec{p}\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp(i\,\vec{p}\,.\,\vec{r}\,/\hbar) \quad using\ Eq. (3.35)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \qquad (4)$$

(iii) $\left\langle \vec{r} \middle| \overrightarrow{P_0} \middle| \Psi \right\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p \, p \; \exp(i \, \vec{p} \, . \, \vec{r} \, /\hbar) \; \langle \vec{p} | \Psi \rangle$

Using Eq.(2)

$$= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \int d^3p \; \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \Psi \rangle \qquad using \; Eq.(3.39)$$

(iv) we can always expand $|\, \emptyset \rangle$ in terms of $|\, \vec{r} \rangle$ (see Eq.(3.28))

$$\left| \, \overrightarrow{\emptyset} \right\rangle = \int d^3r \; | \, \vec{r} \rangle \; \emptyset(\, \vec{r})$$

$$\langle \emptyset | = \int d^3r \; \langle \vec{r} | \emptyset^*(\, \vec{r}) \rangle$$

Thus

$$\left\langle \emptyset \middle| \overrightarrow{P_0} \middle| \Psi \right\rangle = \int d^3r \; \emptyset^* \left\langle \vec{r} \middle| \overrightarrow{P_0} \middle| \Psi \right\rangle$$

$$= \int d^3r \; \emptyset^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \; \Psi(\, \vec{r})$$

حيث استخدمنا المعادلتان (3.30), (3.94)

بالتكامل بالتجزى نجد ان

$$\left\langle \emptyset \middle| \overrightarrow{P_0} \middle| \Psi \right\rangle = \int d^3r \, [-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \, \emptyset^*(\vec{r})] \; \Psi(\, \vec{r})$$

$$\left\langle \emptyset \middle| \overrightarrow{P_0} \middle| \Psi \right\rangle = \overline{\int d^3r \left[\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \, \emptyset^*(\vec{r}) \right] \Psi^*(\, \vec{r})}$$

$$= \langle \Psi | \overrightarrow{P_0} | \emptyset \rangle$$

Thus

$$\overline{\overrightarrow{P_0}} = \overrightarrow{P_0}$$

٢- في مسألة المتذبذب التوافقي عبر عن p, x بدلالة a , $\overline{a}$ /احسب عناصر المصفوفات الاتية

$$\langle m|x|n\rangle, \langle m|p|n\rangle, \langle m|x^2|n\rangle, \langle m|p^2|n\rangle \; and \; \langle m|H|n\rangle$$

من المعادلتان (3.46),(3.47) نجد أن

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + \overline{a}) \quad and \; p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\overline{a} - a)$$

Now

$$\langle m|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\langle m|n-1\rangle \qquad using\; Eq. (3.64)$$

$$= \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}$$

Similarly

$$\langle m|\overline{a}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$$

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\right]$$

$$\langle m|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left[\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\right]$$

Further

$$\langle m|H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,\delta_{m,n}$$

The matrices which represent these operators are

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & .. & \dots & \dots. \\ \dots & \dots & \dots & \dots. & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots. & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots. & \dots. & \dots. & \dots. \end{bmatrix}$$

And

$$p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots\dots & \dots. & \dots. \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots & \dots & \dots. \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots. & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots. & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots. & \dots. & \dots & \dots. & \dots & \dots\dots & \dots \\ \dots & \dots. & \dots. & \dots & \dots. & \dots. & \dots. \end{bmatrix}$$

$$H = \hbar\omega \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \dots\dots & \dots. & \dots. \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots. \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \dots. & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots. & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots. & \dots. & \dots & \dots. & \dots & \dots\dots & \dots \\ \dots & \dots. & \dots. & \dots & \dots. & \dots. & \dots. \end{bmatrix}$$

نلاحظ ان كل المصفوفات تكون هرميتية ودالة هامليتون H يمكن تمثيلها بمصفوفة قطرية.

وبنفس الطريقة يمكن حساب عناصر مصفوفة x^2 و p^2 حيث

$$x^2 = [\frac{\hbar}{2\, m\, \omega}(\bar{a} + a)(\bar{a} + a)], etc$$

٣- باستخدام نتائج المسألة السابقة أثبت أن $\Delta p \Delta x = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar$

من نتائج المسألة السابقة نجد أن

$$\langle x\rangle = \langle n|x|n\rangle = 0$$

$$\langle p\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0$$

Now

$$\langle x^2\rangle = \langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2\,m\,\omega}\langle n|(\overline{a}+a)(\overline{a}+a)|n\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2\,m\,\omega}\{\langle n|\overline{a}\,\overline{a}|n\rangle + \langle n|\overline{a}\,a|n\rangle + \langle n|a\,\overline{a}|n\rangle + \langle n|a\,a|n\rangle\}$$

$$= \frac{\hbar}{2\,m\,\omega}(\mathrm{n}+\mathrm{n}+1)$$

(By repeated application of Eq.(3.64) and (3.65)

$$= \frac{\hbar}{m\,\omega}(n+\frac{1}{2})$$

Similarly

$$\langle p^2\rangle = m\,\omega\hbar\,(n+\frac{1}{2})$$

Therefore

$$\Delta p\Delta x = [\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2]^{\frac{1}{2}}\,[\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2]^{\frac{1}{2}}$$

$$(n+\frac{1}{2})\hbar$$

٤- أثبت أن $a\overline{a}^n - \overline{a}^n a = n\overline{a}^{\,n-1}$

(ارشاد: بضربها بواسطة $\overline{a}$ من ناحية اليسار ويتحقق صحة النظرية)

٥- بين ان دالة هامليتون يمكن كتابتها بدلالة البعدين للمتذبذب في الصورة

$$H = (a_1\,\overline{a_1} + a_2\,\overline{a_2} + 1)\hbar\omega \qquad (3.98)$$

Where

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2\, m\hbar\, \omega}}(m\omega x - i\, p_x) \qquad (3.99)$$

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2\, m\hbar\, \omega}}(m\omega x - i\, p_y) \qquad (3.100)$$

بين أن الاعداد المميزة يجب أن تكون $\hbar\, \omega, 2\hbar\, \omega$ والعدد المميز $n\hbar\, \omega$ سوف يكون منحل (degenerate)

٦ - بين أن مؤثر عزم كمية الحركة L يعرف علي الصورة التالية

$$L = (x\, p_x - y\, p_y) = -\mathrm{i}\hbar(a_1\, \overline{a_2} - \overline{a_1}\, a_2) \qquad (3.101)$$

وتكون مركباتها ثابتة

٧- اثبت أن $\frac{d}{dt}\langle x_i\rangle = \langle\frac{\partial H}{\partial p_i}\rangle, \qquad \frac{d}{dt}\langle p_i\rangle = -\langle\frac{\partial H}{\partial x_i}\rangle,$