الباب السادس

الديناميكا الحرارية الإحصائية

(Statistical thermodynamics)

الفصل	العنوان	الصفحة
I	نموذج العملة والتوزيع الأكثر احتمالاً	119
II	العالم المجهري وميكانيكا الكم	127
	i تكميم الشحنة	128
	ii المظهر الجسيمي للطاقة	128
	iii ازدواجية الجسيم والموجه	129
	iv مبدأ بور المتمم	129
	v مبدأ الشك (عدم اليقين)	130
	vi الفراغ الطوري	130
	vii تكميم الطاقة	137
	viii تكميم كمية الحركة الزاوية	145
III	كثافة المستويات	147
ملحق (6.A)	الجسيمات المتطابقة	150
	تمارين عامة	157

الديناميكا الحرارية الإحصائية
(Statistical thermodynamics)

بنيت الفيزياء الإحصائية على فرعين أساسيين، ألا وهما ميكانيكا الكم ونظرية الاحتمالات. لذلك سوف نستعرض في هذا الباب بعض الأساسيات المهمة لهذين الفرعين. بدايةً نحن نعلم أن قوانين نيوتن في الميكانيكا الكلاسيكية لاقت استحساناً وقبولا منقطع النظير عندما توقعت السلوك العيني لأنظمة الميكانيكا الحرارية. ولكن عندما تم تطبيقها على الأجسام المجهرية وجد أنها تعطى إجابات غريبة وغير منطقية للظواهر المعملية المحسوبة. فعلى سبيل المثال لم تستطع قوانين نيوتن الإجابة على السؤال: لماذا تؤول الحرارة النوعية للمواد للصفر عندما تؤول درجة الحرارة المطلقة للصفر؟! إن هذا القصور في الميكانيكا الكلاسيكية لم يحل إلا بافتراض بلانك وهو أن طاقة الجسيمات يجب أن تكون مكممة (منفصلة discrete). وتبعاً لهذا الفرض ظهرت أساسيات ميكانيكا الكم، والتي سوف نتعرض لها باختصار في هذا الباب.

ونقف هنا لنسأل: لماذا نلجأ إلى القوانين الإحصائية؟ والإجابة تأتي من أن النظام المجهري يتكون من أعداد فلكية من الجسيمات. ولو طبقنا قوانين نيوتن على كل جسيم في النظام فسوف نصل لعدد لانهائي من المعادلات المطلوب حلها والتي تحتاج لعقود كي يتم حلها بواسطة الكمبيوتر. وحتى لو استطعنا إيجاد حل لهذه المعادلات بعد هذه الفترة فسوف نجد أن النظام نفسه قد تغير. ولهذا سوف نلجأ إلى القوانين الإحصائية حيث تمكننا من أن نتعامل مع أعداد لانهائية من الجسيمات المميزة وغير المميزة.

وقد استخدمت الطرق الإحصائية قبل ظهور أساسيات ميكانيكا الكم بأعوام وذلك نظراً لأن النظريات الذرية أصبحت حجر الأساس في مجالات عدة مثل التفاعلات الكيميائية. ونظراً لصغر الذرات والجزيئات فقد اقترح العديد من العلماء، مثل ماكسويل وبولتزمان، استخدام الطرق الإحصائية كي يتم فهم العلاقة بين سلوك الذرات والطاقة. وبالرغم من المعارضة الشديدة لهذا الاتجاه في بداية الأمر، إلا أن هذه الطريقة استطاعت أن تستنتج وتتوقع خواص الأنظمة الحرارية كما توقعتها الطرق الاستقرائية. وهذا الاتجاه يسمى بالفيزياء الإحصائية أو "الإحصاء الديناميكي الحراري".

سوف نلاحظ هنا أن الهدف الأساسي للإحصاء الديناميكي الحراري هو تقديم نظرية جسيمية نستطيع من نتائجها تفسير خواص الاتزان للنظام العيني. ولكن أساس هذه النظرية مبني على

(Statistical thermodynamics)

نظرية ميكانيكا الكم. ولحسن الحظ فإنها نظرية مرضية يمكن تطويرها باستخدام المبادئ البسيطة لمستويات الطاقة وقوى التفاعل الداخلية بين الجزيئات. الفكرة الرئيسية هنا هي البحث عن دالة تعبر عن الكثافة الاحتمالية، وندعوها دالة الكثافة الإحتمالية (Probability density function)، ليتم تطبيقها على تجمعات كبيرة من الجسيمات المتطابقة. لذلك سوف نتعامل مع النظام الديناميكي الحراري المجهري على أنه كمية من المادة عدد جسيماتها هائل (N)، يقارب عدد أفوجادرو (N_A)، بمستويات مجهرية متغيرة وله خواص عينية مميزة. ويبنى الإحصاء الديناميكي الحراري على الفرض الأساسي التالي وهو:

"أن وجود الجسيمات بكل مستوى من المستويات المجهرية لمجموعة معزولة لها احتمالات متساوية"

والآن نحن بحاجة إلى تعريف بعض المصطلحات الجديدة حتى يتسنى لنا فهم الموضـوع. لـذلك سوف نستخدم المصطلح "تجمع" (Assemply) للتعبير عن عدد الجسيمات (N) الـذي لـه نفس الصفات، مثل الجزيئات، الذرات، الإلكترونات، الفوتونـات، الفونونـات، إلـخ. ويـستخدم المـصطلح نظامـا كمـرادف للمـصطلح "مجموعـة" (Group). و"الحالـة العينيـة للنظـام" (Macrostate of a system) أو "الترتيب النسبي" (Configration) تُعرف هنا لتحديد ترتيـب معين لعدد الجسيمات في كل منسوب طاقة للنظام. دعونا بالفصل التالي نستعرض بعـض الأمثلـة ومن خلالها سوف نقوم بتعريف بعض المصطلحات الأخرى مع الأمثلة التوضيحية.

I– نموذج العملة والتوزيع الأكثر احتمالاً

(Coin model and the most probable distribution)

نبدأ هنا بتجربة بسيطة سوف نستخاص منها بعض المصطلحات الإحصائية الأخرى التي سوف تخدمنا في دراسة الفيزياء الإحصائية. نبدأ بتجربة رمي عملة معدنية واحدة بالهواء. عند سقوط العملة على الأرض بحرية، نعلم مسبقاً أننا سوف نحصل على الحالة العينية للحدث وهي صورة لأعلى، ونرمز لها بالحرف H، أو الحالة العينية الأخرى للحدث وهي كتابة لأعلى، ونرمز لها بالحرف T. إحتمال الحصول على أي من الحدثين هو 50% وهذا ناتج من أن:

فرض احتمال الحصول على الحدث صورة لأعلى هو $P(H)$

فرض احتمال الحصول على الحدث كتابة لأعلى هو $P(T)$

ونعلم أن $P(T)+P(H)=1$

ولذلك فإن $P(T)=P(H)=\frac{1}{2}$

بالطبع فإن هذه النتيجة لا تتأتى بإجراء التجربة برمي قطعة واحدة عدد محدود من المـرات، أو رمي عدد محدود من العملات مرةً واحدةً، حيث إن الشخص يستطيع أن يتحكم بطريقـة الرمـي. لذلك فسوف نقوم بدراسة رمي عدد من العملات، ونستخلص منها بعض النتـائج والمـصطلحات المهمة.

دعونا ندرس نتائج رمي أربع عملات، متطابقة ولكن مميزة (ويمكن التمييز بينهـا عـن طريـق ترقيمها بعدد أو التاريخ أو اللون، مثلاً)، مع استخدامنا للرموز التالية:

الرمز	المعنى
k	تعبر عن ترقيم الحالات العينية
$N_{1k}=N_{Hk}$	العدد الكلي لحالات الحصول على الحدث صورة (H) بالمستوى العيني k
$N_{2k}=N_{Tk}$	العدد الكلي لحالات الحصول على الحدث كتابة (T) بالمستوى العيني k
ω_k	احتمالية الديناميكا الحرارية $\equiv$ عدد الحالات المجهرية للمستوى العيني k
$\Omega=\sum_{k=1}\omega_k$	العدد الكلي للحالات المجهرية
$p_k=\frac{\omega_k}{\Omega}$	الاحتمالية الحقيقية للمستوى العيني k

من التعريفات السابقة نستطيع تكوين الجدول (1). مع ملاحظة أن عدد الحالات العينية المختلفـة خمس وهي $k=1,2,3,4,5$ والحالات العينية هي الحالات المحتملة ولا تتطلب تحديـداً لأي مـن العملات، أما الحالات المجهرية فتتطلب تحديد رقم العملة.

جدول (1): الحالات العينية والمجهرية لأربع عملات متطابقة ومميزة

الترقيم	الحالات العينية		الحالات المجهرية				الإحتمال	
k	N_{1k}	N_{2k}	العملة 1	العملة 2	العملة 3	العملة 4	ω_k	$p_k = \frac{\omega_k}{\Omega}$
1	4	0	H	H	H	H	1	1/16
2	3	1	H H H T	H H T H	H T H H	T H H H	4	4/16
3	2	2	H T H T H T	H T T H T H	T H H T T H	T H T H H T	6	6/16
4	1	3	H T T T	T H T T	T T H T	T T T H	4	4/16
5	0	4	T	T	T	T	1	1/16

ومن الجدول(1) نجد أن:

$$\Omega = \sum_{k=1}^{5} \omega_k = 1+4+6+4+1 = 16. \qquad (1)$$

ولحساب متوسط (أو معدل) الحصول على الحدث N_j نستخدم المعادلة:

$$\overline{N_j} = \frac{\sum_k N_{jk}\,\omega_k}{\Omega} = \sum_k N_{jk}\,\frac{\omega_k}{\Omega} = \sum_k N_{jk} P_k \qquad (2)$$

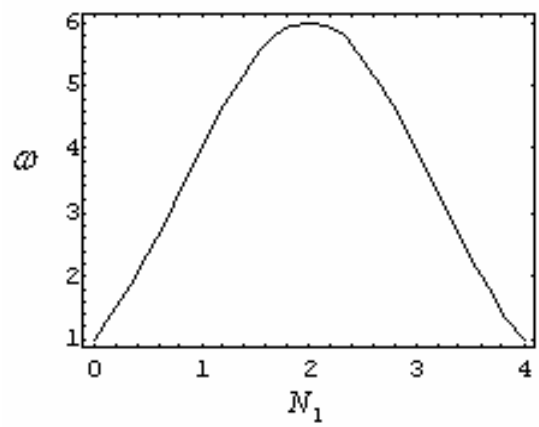
لنجد أن متوسط الحصول على الحدث صورة H هو:

$$\overline{N_1} = \frac{1}{16}\left[(4\times1)+(3\times4)+(2\times6)+(1\times4)+(0\times1)\right] = 2$$

كما هو متوقع الحصول عليه من رمى أربع عملات.

واجب منزلي: احسب متوسط الحصول على الحدث كتابة T واثبت أن $\overline{N_2} = 2$. بالتالي فإن $\overline{N_1} + \overline{N_2} = 4$.

الشكل (1) يحاكي عدد الحالات المجهرية، المعرفة بالجدول (1)، كدالة في عدد الصور العلوية الناتجة، N_1، مع ملاحظة القيمة العظمى للحالات المجهرية عندما $N_1 = N_2 = N/2 = 2$.



شكل (1): احتمالية الديناميكا الحرارية كدالة لعدد الصور العلوية في تجربة العملات، لعدد 4 عملات

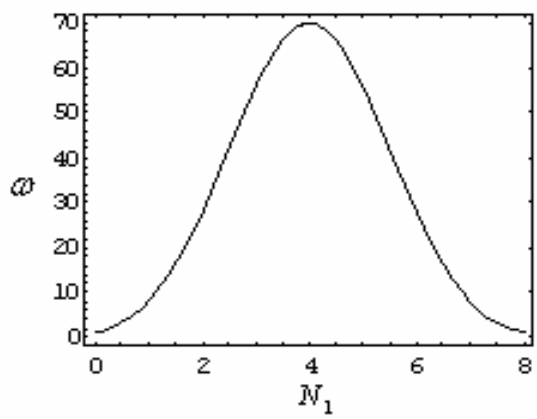
وحتى تصبح النتائج منطقية ويُعتمد عليها، يجب أن نتعامل مع عدد لانهائي من العملات. وقبل أن نتعامل مع عدد لانهائي من العملات دعونا نسأل: هل توجد طريقة لحساب ω_k بدون أن نلجأ إلى جدولة النتائج المتوقعة؟ والإجابة نعم. يتم ذلك باستخدام قوانين التباديل (انظر الملحق C)، فنجد أنه لعدد من العملات المميزة N فإن عدد الطرق لاختيار (للحصول على) عدد N_k من الصور وعدد $(N - N_k)$ من الكتابة تعطى بالعلاقة:

$$\omega_k = \binom{N}{N_k} = \frac{N!}{N_k!(N - N_k)!} \qquad (4)$$

ومن الجدول السابق نجد أن أعلى معدل توزيع لعـدد الحـالات المجهريـة، $\omega_k = \text{maximum}$، تحدث عندما $N_1 = N_2 = N/2$. ومنها نجد أن $\omega_3 = 6$. وسوف نطلق علـى $\widetilde{\omega}$ "التوزيـع الأكثر احتمالاً" Most Probabile Distribution.

واجب منزلي: تحقق من جميع قيم ω_k بالجدول السابق باستخدام المعادلة (4).

لعدد أكبر من العملات نستطيع، باستخدام المعادلة (4) وآلة حاسبة، أن نحـسب ونرسـم توزيـع احتمالية الديناميكا الحرارية كدالة لعدد الصور. شكل (2) يظهر الاحتمالية لعدد 8 مـن العمـلات، وفيه نجد أن $\widetilde{\omega} = 70$ عندما $N_1 = N_2 = 4$.



شكل (2): احتمالية الديناميكا الحرارية كدالة لعدد الصور العلوية لعدد 8 عملات

وقبل أن نسترسل في زيادة عدد العملات واستخلاص نتائج التجربة، دعونا نتعامـل مـع المثـال التالي.

مثال: احسب $\widetilde{\omega}$ للقيم $N = 4, 8, 1000$.

الحل: باستخدام المعادلة (4):

$$\widetilde{\omega} = \binom{N}{\frac{N}{2}} = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}\right)!\left(\frac{N}{2}\right)!}$$

وباستخدام آلة حاسبة عادية! نستطيع تكوين الجدول التالي:

N	$N_1 = N/2$	$\widetilde{\omega}$
4	2	$\frac{4!}{2!2!} = 6$
8	4	$\frac{8!}{4!4!} = 70$
1000	500	$\frac{1000!}{500!500!} \overset{?!}{=} 10^{300}$

ولكن بالطبع لن نستطيع حساب $500!$ باستخدام أي آلة حاسبة ولكن نستطيع حسابها باستخدام تقريب استرلنج (Stirling's approximation)، انظر الملحق A، بالشكل:

$$\ln(N!) = N\ln(N) - N$$

فكيف نستخدم هذا التقريب لحساب قيمة $\widetilde{\omega} = \frac{1000!}{(500!)\times(500!)}$ ؟

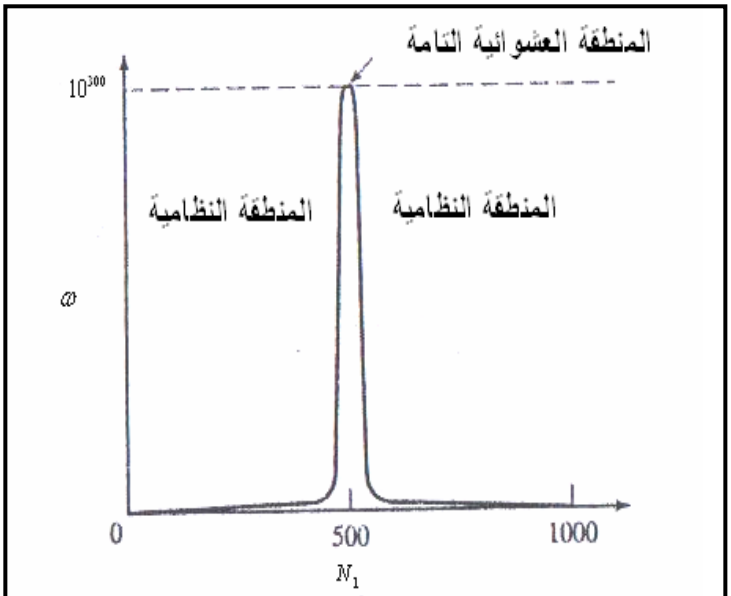
الطريقة هي أن نأخذ لوغاريتم الطرفين فنجد أن:

$$\ln(\widetilde{\omega}) = \ln(1000!) - 2\ln(500!)$$

باستخدام تقريب استرلنج نجد أن:

$$\ln(\widetilde{\omega}) = 1000 \times \ln(1000) - \cancel{1000} - 2[500 \times \ln(500) - \cancel{500}]$$
$$= 1000 \ln\left(\frac{1000}{500}\right) = 693,$$
$$\ln_{10}(\widetilde{\omega}) = \left(\ln_{10} e\right) \ln(\widetilde{\omega}) = 0.4343 \times 693$$
$$= 300,$$
$$\Rightarrow \quad \boxed{\widetilde{\omega} = 10^{300}}$$

من المثال السابق نستطيع أن نرسم الشكل (3) لعدد 1000 من العملات لنجد أن القمـة المطابقـة لحدوث عدد الوجوه الأكثر احتمالاً تزداد حدتها، وتصبح كدالة دلتا لديراك، انظر الملحق A، كلما زاد عدد القطع المعدنية من 4 عملات إلى عدد 1000. وحيث إننا نتعامل مع أعداد مقاربـة لعـدد أفوجادرو، فإننا نتوقع أن نحصل على توزيع يتمركز تماماً حول النقطة الأكثر احتمالاً.



شكل (3): احتمالية الديناميكا الحرارية كدالة لعدد الصور العلوية لعدد 1000 من العملات

واجب منزلي: في حالة إلقاء 1000 عملة مميزة وحصولنا على النتيجة 400 صورة لأعلـى و 600 كتابة لأعلى، اثبت أن احتمالية الديناميكا الحرارية هي 10^{291}.

والآن دعونا نستخلص بعض النتائج المهمة من التجربة السابقة وذلك عند رسم ω كدالـة فـي عدد الصور الناتجة "N_1" وهي كالتالي:

1- ω تأخذ قيمة عظمى، $\widetilde{\omega}$، عندما $N_1 = N/2$.

2- مع زيادة N نجد أن $\widetilde{\omega}$ تأخذ أرقاماً فلكية.

3- بداية ونهاية المنحنى دائماً تكون عند القيمة $\omega = 1$.

4- الحدث، أن عدد العملات ذات الصور لأعلى تتساوى مع عدد العملات ذات الكتابة لأعلى، أي بنسبة 50-50، نتيجة تعتبر متوقعة وذلك مع زيادة عدد العملات N.

5- من المنحنى نجد أن منطقة النظامية، حيث $\left|\omega - \widetilde{\omega}\right| >> 0$، تقل احتمالية تواجدها مع زيادة عدد العملات N.

6- من النتائج السابقة، ومن المنحنى مع الزيادة الكبيرة للعدد N، نستطيع أن نستنتج أن المجموع الكلي للحالات المجهرية يتساوى تقريباً مع $\widetilde{\omega}$،

$$\Omega = \sum \omega_k \approx \widetilde{\omega}$$

7- المنحنى أيضاً يعطينا طريقة بسيطة لحساب $\widetilde{\omega}$، كيف؟ نحن نعلم أن الميل عند قمة المنحنى مساو للصفر. ولإيجاد قيمة $\omega(N_1)$، نحسب تفاضل الدالة ω_k بالنسبة إلى N_1 ونساوي النتيجة بالصفر. بهذا نستطيع أن نحسب N_1 عند $\omega = \widetilde{\omega}$، ومنها نستطيع أيضاً حساب N_2. النتيجة بهذه الطريقة تعطينا الحالة العينية الأكثر احتمالاً.

واجب منزلي: اعتبر تجربة إلقاء عدد N من العملات المتطابقة والمميزة وحصولنا على النتيجة N_1 صورة لأعلى و $N_2 = N - N_1$ كتابة لأعلى.

أ- في حالة N كبيرة جداً، بحيث نستطيع استخدام تقريب استيرلنج، اثبت أن القيمة العظمى للقيمة $\ln\omega$ تحدث عندما $N_1 = \frac{N}{2}$.

ب- اثبت أن $\widetilde{\omega} \approx e^{N\ln 2}$.

ملخص:

كملخص لما هو مطلوب لمسائل الديناميكا الحرارية، فإننا نسعى إلى إيجاد توزيع إحصائي لعدد الجسيمات الموجودة بكل مستوى طاقة n. ومهمتنا هنا أن نوجد الدالة $\omega(N_1, N_2, \cdots, N_j, \cdots, N_n)$، بالطبع مع بعض الشروط أو القيود، ومساواة تفاضلها بالصفر. ومن الخطوة السابقة نحصل على فئة خاصة من الأعداد $\{N_j\}$، تمثل أعلى احتمالية للحالة العينية المطلوبة. والحالة العينية التي لها أعلى احتمالية تعبر عن حالة الاتزان للمجموعة. وهذه هي المسألة الأساسية التي نبحث عنها في الديناميكا الحرارية الإحصائية- ألا وهي إيجاد حالة الاتزان للنظام.

وقبل أن نختم هذا الجزء نود أن ننوه على أن نموذج العملة افترض أن العملات جميعها متطابقة ولكنها مميزة (برقم، بتاريخ، أو لون .....). إن نموذج العملة هذا يشبه في الديناميكا الحرارية الجسيمات بشبكة البلورة، حيث إن اماكنها تميزها. ولكن هذا لا ينطبق على جسيمات أو جزيئات الغاز، حيث إنها متشابهة ولكن غير مميزة، وبالتالي فإن عدد الحالات المجهرية سوف تصبح أقل. وسوف نقوم بدراسة هذه الحالة في الأبواب القادمة.

II– العالم المجهري وميكانيكا الكم

(Quantum mechanics and the microscopic world)

العالم المجهري هو عالم ملئ بالألغاز. وقد تم التعرف على الكثير من خواصه وصفاته من خلال التجارب المعملية. ولشرح خواصه فهو يحتاج منا الكثير من المعلومات التفصيلية والمرتبطة بأفرع كثيرة في الفيزياء. لكننا هنا، ولمحاولة الإيضاح، سوف نستعيد، وباختصار، معلوماتنا

الأساسية عن أحد أهم فروع الفيزياء ألا وهو ميكانيكا الكم. من خلال مناقشتنا لهذا الفرع سوف تتضح بعض من خواص العالم المجهري.

i– تكميم الشحنة: (Quantization of charge)

تعتبر شحنة الإلكترون $(|e| = 1.6\times10^{-19}\ C)$ هي أقل شحنة يمكن أن تُقاس. والشحنة المتراكمة على أي مستوى عيني ما هي إلا أعداد صحيحة من شحنة الإلكترون. C هي وحدة قياس الشحنة وتسمى كولومب.

ii– المظهر الجسيمي للطاقة: (Particle aspect of Radiation)

افترض العالم بلانك أن الإشعاع، ذا التردد ν، يمكنه أن يتبادل الطاقة مع المادة بوحدات صحيحة من القيمة $h\nu$، حيث h هو ثابت بلانك. وبأسلوب آخر، فإن الإشعاع ذا التردد ν يتصرف كأنه جسيم، يدعى فوتون، وله الطاقة:

$$E = h\nu \qquad (1)$$

وكمية حركته الخطية هي:

$$p = \frac{E}{c} \qquad (2)$$

حيث c هي سرعة الضوء.

دعونا أيضاً أن نستخدم التردد الزاوي للإشعاع ω بالصورة:

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi\frac{c}{\lambda} = kc \qquad (3)$$

حيث k هو العدد الموجي، مع ملاحظة أن ω هنا لا تمت بصلة إلى احتمالية الديناميكا الحرارية. باستخدام المعادلات (1) و(2) و(3) لحذف c نجد:

$$E = \hbar\omega \qquad (4)$$

و

$$p = \hbar k \qquad (5)$$

حيث عرفنا $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. بالتالي فإن المعادلتين (4) و(5) تحدد العلاقة بين الخواص الجسيمية (E, p) والخواص الموجية (ω, k) المرتبطة للجسيم.

iii– ازدواجية الجسيم والموجة: (Wave-Particle duality)

كما نعلم أن الطبيعة تعشق التماثل، لذلك إذا أصبح للإشعاع طبيعة جسيمية، فإن الجسيم أيضاً سوف يصبح له طبيعة موجيه. وقد توقع دي- برولى أن المعادلتين (4) و(5) يطبقان أيضاً على جسيمات المادة، مثل الإلكترون. وتصبح هناك موجة مصاحبة لحركة الجسيم لها توصف بالشكل:

$$\psi \approx e^{-i(\omega t - kx)} \qquad (6)$$

حيث $\omega = E/\hbar$ و $k = p/\hbar$. وقد تم التأكد من الصفات الموجية للجسيمات من خلال تجارب العلماء دافيسون- جيرمر وأيضاً تومسون. وقد اقترح دي- برولى أن الجسيم الذي يتحرك بسرعة v يمكن التعامل معه كموجة ترددها هو $\nu = \frac{mc^2}{h}$ وطولها الموجى:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\mathrm{v}} \qquad (7)$$

iv– مبدأ بور المتمم: (Bohr's complementary principle)

ينص هذا المبدأ على أن "*السلوك الإزدواجي للطاقة الكهرومغناطيسية هو متمم لبعضه البعض*" وهذا معناه ببساطة أن أي قياسات معملية تستخدم الطاقة الكهرومغناطيسية بالإمكان تفسيرها بنموذج واحد فقط لا غير وهو أن الطاقة الكهرومغناطيسية إما جسيمات أو موجات، وليس الاثنين معاً. هذا المبدأ أيضاً أدى إلى فهم ازدواجية الجسيم والموجة. فعندما تظهر إحدى الصفات بالتجربة المعملية فإن الصفة الأخرى تنعدم. وكمثال على ذلك، إذا ظهرت الصفة الموجية

لإلكترون، كالحيود مثلاً، فلن تظهر صفته الجسيمية، ولكن إذا انحرف الإلكترون في مساره، نظراً لوجود مجال كهربي خارجي، مثلاً، فإن الصفة الموجية له تنعدم.

v− مبدأ الشك (عدم اليقين): (Uncertainty principle)

في الميكانيكا الكلاسيكية تم افتراض أن المكان (ولنقل x) وكمية الحركة الخطية المرافقة لها (ولنقل p_x) يمكن تحديدهما بدقة متناهية في آن واحد. ولكن وجد هيزنبرج أن ذلك غير ممكن في ميكانيكا الكم عند التعامل مع الجسيمات المجهرية، ولا دور لكفاءة أجهزة القياس في هذه الفرضية. وقد اشتق العالِم هيزنبرج بعض المتباينات ومنها:

$$\Delta x \, \Delta p_x \geq h \qquad (8)$$

وتبين هذه المعادلة قاعدة عدم التحديد (الدقة) لهيزنبرج، وتنص على أنه "*من المستحيل قياس كميتين مترافقتين (مثل x و p_x) بدقة متناهية في آنٍ واحد*". بمعنى آخر أنه كلما ازداد التحديد (الدقة) في قياس موضع الجسيم (مثلاً Δx تكون كمية صغيرة) ازداد عدم التحديد (عدم الدقة) في قياس كمية الحركة الخطية المرافقة لها (بمعنى أن Δp_x تكون كمية كبيرة) وحاصل ضربهما يعطى بالمعادلة (8). إن أهمية هذا المبدأ ظهرت في التحقق من بعض الفرضيات المهمة ومنها إثبات عدم احتمالية وجود الإلكترون بالنواة.

vi− الفراغ الطوري والمستويات الكمية: (Phase space and quantum states)

علمنا من قوانين نيوتن في الميكانيكا التقليدية، أننا نستطيع تحديد حالة (مسار) النظام الميكانيكي عند أي زمن وذلك من خلال استعمال القانون الثاني لنيوتن وهو:

$$\vec{F} = \frac{d\,\vec{p}}{dt}$$

حيث $\vec{F}$ هي القوة المؤثرة و $\vec{p}$ هي كمية الحركة الخطية. وأيضاً من العلاقة،

$$\vec{p} = m\,\frac{d\,\vec{q}}{dt} = m\,\vec{v}$$

حيث $\vec{q}$ هي الإزاحة و $\vec{\mathrm{v}}$ هي السرعة المتجهة و m هي الكتلة. فنجد أن:

$$\vec{F} = m\frac{d^{\,2}\vec{q}}{dt^{\,2}}$$

وهي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية، وبحلها نستطيع تحديد المسار. ولكن عندما نتعامل مع أعداد كبيرة " N " من الأجسام المكونة لنظام مغلق، فإن القوى الوحيدة المؤثرة هي الناتجة من الأجسام نفسها، بحيث تكون للنظام:

أ- كمية الحركة الخطية ثابتة، أي أن:

$$\sum_{i=1}^{N}\vec{p}_i = \text{constant}$$

ب- وكمية الحركة الزاوية ثابتة، أي أن:

$$\sum_{i=1}^{N}\vec{p}_i \times \vec{q}_i = \text{constant}$$

ت- والطاقة الكلية " E " ثابتة، وهذا حينما توجد بالنظام قوى محافظة (أو غير مبددة للطاقة Nondissipative) أي أن:

$$E = \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i = \sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + V\,(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\cdots,\vec{q}_N) = \text{constant}$$

حيث $\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i}$ هي طاقة الحركة للجسم i و V هي طاقة الوضع للنظام نتيجة لإحداثيات الأجسام $(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\cdots,\vec{q}_N)$.

وإذا افترضنا أن جسيما يتحرك في اتجاه واحد، دعونا نعتبره في اتجاه المحور x، في نظام الإحداثيات الكارتيزية، نجد أن:

$$F_x = \frac{d\,p_x}{dt} = m\frac{d\,\mathrm{v}_x}{dt}$$

ومنها نصل إلى:

$$\left.\begin{aligned} F_x dx &= m\frac{d\,\mathrm{v}_x}{dt}dx = m\frac{dx}{dt}d\,\mathrm{v}_x = m\,\mathrm{v}_x d\,\mathrm{v}_x \\ &= \frac{m}{2}d\,\mathrm{v}_x^2 = \frac{m}{2}d\left(\frac{p_x^2}{m^2}\right) = d\left(\frac{p_x^2}{2m}\right) \end{aligned}\right\} \Rightarrow F_x = \frac{d}{dx}\left(\frac{p_x^2}{2m}\right)$$

ومن المعادلة السابقة ومعادلة الطاقة الكلية نستنتج أن:

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}}$$

وبصفة عامة فإن معادلات الحركة للجسم هي:

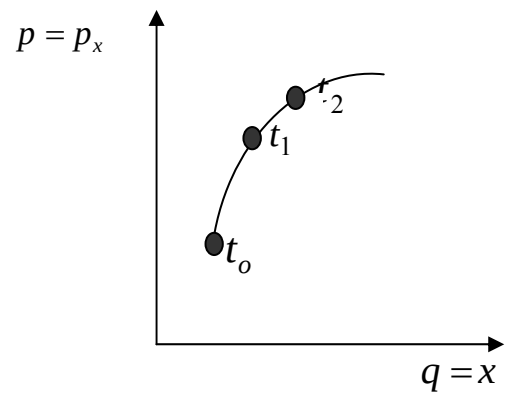
$$\frac{dp}{dt} = F = -\left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)_p = -\left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)_p , \qquad \text{(A)}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} = -\left[\frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{p^2}{2m}\right)\right]_q = -\left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_q \qquad \text{(B)}$$

المعادلتان (A) و (B) تسميان معادلات الحركة القانونية (Cannonical equations of motion) أو معادلات هاملتون، نسبةً للعالم هاملتون، وذلك إذا وضعنا $E = H$، حيث H هى دالة هاملتون. وهما معادلتان تفاضليتان من الدرجة الأولى، وحلهما يستخدمان في إيجاد المسار لجسم. وهما يحلان مكان المعادلات التفاضلية من الدرجة الثانية لنيوتن. ولعدد N من الجسيمات فإننا نحصل على عدد $2N$ من معادلات هاملتون.

من خلال تكامل المعادلتين (A) و (B) نستطيع أن نحدد التغير في الإحداثيات p و q بدقة مع الأزمنة المستقبلية t إذا افترضنا أن الإحداثيات p و q معلومة لنظام محافظ عند الزمن الابتدائي t_o. بالتالي فإن حالة الجسم يمكن تمثيلها (تحديدها) في نظام الإحداثيات (p,q)، والتي تسمى فراغا طوريا . والآن إذا افترضنا أن جسيما يتحرك في اتجاه واحد، دعونا نعتبره في اتجاه المحور x، فإن الحالة الحركية له عند أي زمن تتحدد بموقعة x وسرعته v_x. ومن الملائم هنا أن نستبدل سرعة الجسيم v_x بكمية حركته الخطية $p_x = m\,v_x$. ومع تعيين الزمن فإن الجسيم سوف يرسم مساراً في المستوى $(p = p_x, q = x)$. والشكل 4 يوضح المسار اللحظي لجسيم عند الأزمنة المتتالية (t_o, t_1, t_2) وهكذا.

حالة الجسيم في هذا المستوى تسمى (طور) (Phase)، وأي نقطة على المسار تسمى نقطة طوريه (Phase point)، والمسار يسمى مسار طوريا ، والمستوى المفترض، ذو المحورين هنا، يسمى فراغا طوريا (Phase space)، والمثال التالي يوضح هذه التعريفات.



شكل(4):مسار جسيم في فراغ طوري حيث تظل الطاقة الميكانيكية ثابتة خلال الانتقال فى المسار

مثال: عين المسار الطوري للمتذبذب الخطي.

الحل: لنفترض أن كتلة المتذبذب هي m وثابت القوة هو k. من هنا نجد أن الطاقة الكلية للجسيم المتذبذب "E" تعطى بالعلاقة:

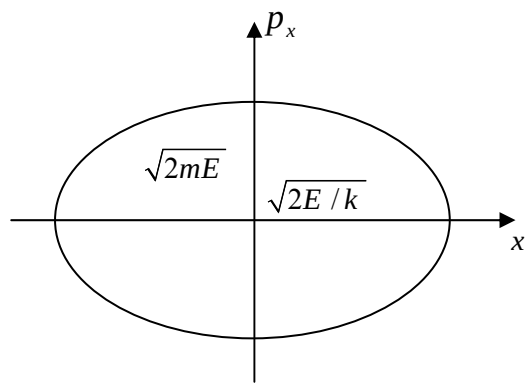
$$E = \frac{1}{2} m \, \mathrm{v}_x^2 + \frac{1}{2} k x^2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

لذلك

$$\frac{p_x^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k} = 1 \qquad (9)$$

وحيث إن E هي قيمة ثابتة، فإن القيمتين $2mE$ و $2E/k$ هما قيمتان ثابتتان أيضاً. ومن هنا نجد أن المحل الهندسي المعبر عن نقط الطور للمتذبذب يمثل بمسار بيضاوي (Ellipse) في فضاء الطور (p_x, x) كما هو موضح في شكل (5)، حيث $\sqrt{2E/k}$ تمثل نصف المحور الأكبر (Semi-major axis) و $\sqrt{2mE}$ تمثل نصف المحور الأصغر (Semi-minor axis).

والشكل (5) يوضح أن أي نقطة على المسار البيضاوي يمثل الطور عند نفس الزمن. وبتأرجح المتذبذب ذهاباً وإياباً بصفة دورية، نجد أن نفس المكان وكمية الحركة تتكرر بصفة دورية أيضاً. بالتالي نقاط الطور التي توصف بالمسار البيضاوي تتكرر بصفة دورية وتكون مسار مغلقا (Closed path)، ولكن هذه المسارات لا تتقاطع.



شكل (5): المسار الطوري للمتذبذب الخطي

ولنا هنا سؤال: لماذا نقترح هذا الفراغ التجريدي؟ السبب يرجع هنا لأننا سوف نقوم بحساب عدد المستويات المجهرية، وهذه مرتبطة بحجم المستويات المجهرية والتي تتبع مبدأ الشك لهيزنبرج. لذلك دعونا نتكلم عن حركة جسيم في الفراغ والتي تتطلب الآن ثلاث إحداثيات مكانية (x, y, z) بالإضافة إلى ثلاث إحداثيات أخرى مرافقة لها وهي كمية الحركة الخطية (p_x, p_y, p_z). مع وجود العلاقات المماثلة في اتجاهي (y, z) وهما:

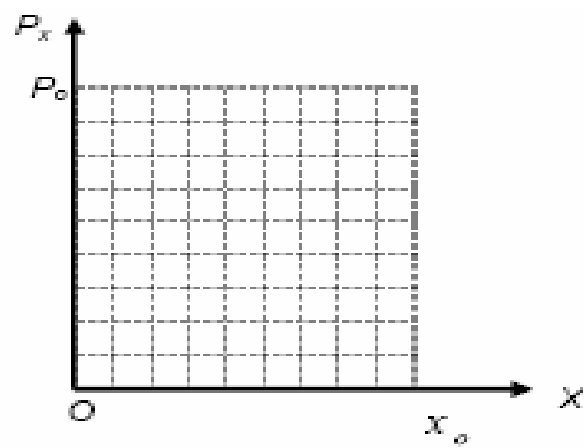
$$\left.\begin{aligned} \Delta y\, \Delta p_y &\geq h \\ \Delta z\, \Delta p_z &\geq h \end{aligned}\right\} \qquad (10)$$

وبضم المعادلات (8) و (10) واستخدام علامة $=$ بدلاً من $\geq$، نجد أن:

$$\Delta x\, \Delta y\, \Delta z\, \Delta p_x\, \Delta p_y\, \Delta p_z = h^3 \qquad (11)$$

فعلى ماذا تدل المعادلة (11) فيزيائياً؟ تدل على أنه إذا أردنا تحديد المكان وكمية الحركة الخطية لأي جسيم، فإن أفضل تحديد هو أن تكون الإحداثيات محتوية من خلال إحداثيات ستة لصندوق كمي أو مستوى كمي بحجم h^3.

ولتوضيح ذلك، دعونا هنا للتبسيط أن نفترض أن الجسيم يتحرك باتجاه المحور x-. وسوف نفترض أيضاً أن الجسيم يتحرك بين النقطتين ذات الإحداثيات $x \equiv (0, x_o)$ و $p_x \equiv (0, p_o)$، كما هو موضح في شكل (6).



شكل(6) : المستويات في فراغ ثنائي الأبعاد

ولفراغ ثنائي الأبعاد فإن عدد المستويات "n" المسموح بها للجسيم تحسب من العلاقة

$$n = \frac{\text{total area}}{\Delta x \, \Delta p_x} = \frac{x_o p_o}{h} \qquad (12)$$

ولفراغ سداسي الأبعاد، نجد أن:

$$n = \frac{\text{total 6-dimesional volume}}{\Delta x \, \Delta y \, \Delta z \, \Delta p_x \, \Delta p_y \, \Delta p_z} = \frac{V_r V_p}{h^3} \qquad (13)$$

حيث V_r هو الحجم في الفراغ الكارتيزي، V_p هو الحجم في فراغ كمية الحركة. وعدد المستويات الكمية المسموح بها للجسيم لعنصر الحجم في فراغ سداسي الأبعاد هو:

$$dn = \frac{dxdydzdp_x dp_y dp_z}{h^3} = \frac{d^3r\, d^3p}{h^3} \qquad (14)$$

حيث d^3r هو عنصر الحجم في الفراغ الكارتيزي، d^3p هو عنصر الحجم في فراغ كمية الحركة. ومن هنا نستطيع القول: إن عدد المستويات المسموح بها للجسيم خلال مسافة معينة، بأي إحداثيات طورية، تتناسب مع هذه المسافة. بمعنى أنه إذا كانت q هي الإحداثيات الطورية فإن:

$$\boxed{n \propto q}$$

مثال: احسب عدد المستويات الكمية المسموح بها للحالات التالية:

1- جسيم يتحرك في بعد واحد في مسافة طولها 10^5 m وكمية حركته الخطية لها القيمتـان 10^{-28} kg s^{-1} و -10^{-28} kg s^{-1} .

2- بروتون بداخل النواة (نصف قطرها 10^{-14} m) وكمية حركته الخطية هي 10^{-22} kg s^{-1}.

الحل:

1- من المعادلة (12) نجد أن:

$$n = \frac{x_o p_o}{h} = \frac{(10^5\ \text{m})(2\times10^{-28}\ \text{kg s}^{-1})}{(6.626\times10^{-34}\ \text{J s}^{-1})} = 3000$$

2- من المعادلة (13) نجد أن:

$$n = \frac{V_r V_p}{h^3} = \frac{\left(\frac{4}{3}\pi^2(10^{-14}\ \text{m})^3\right)\left(\frac{4}{3}\pi^2(10^{-22}\ \text{kg s}^{-1})^3\right)}{(6.626\times10^{-34}\ \text{J s}^{-1})^3} = 600$$

---

vii− تكميم الطاقة: (Quantization of energy)

تعين حالة النظام بقيم لكميات فيزيائية ثابتة. فمثلاً، نجد أن الطاقة الكلية "E" للنظام المحافظ (Conservative system) هي واحدة من هذه القيم. وفي عالم ميكانيكا الكم نجد أن مستويات الطاقة للنظام تكو ن قيما منفصلة وليست متصلة، ماعدا الجسيمات الحرة فطاقتها تأخذ شكل الطيف المستمر. هذه الصفة الكمية ناتجة من وجود الجسيمات بوعاء ذي حجم ثابت. وفي ميكانيكا الكم سوف نتعامل مع منسوب للطاقة (Energy level) وكل منسوب له مدار (Orbit) واحد أو أكثر. وكل مدار له عدد (واحد أو أكثر) من مستويات الطاقة (Quantum states) توصف بدالة موجية ψ، حقيقية أو تخيلية، وهي حل لمعادلة شرودنجر، والتي تأخذ الصورة العامة:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\,\psi = E\,\psi \qquad \text{(A)}$$

حيث ∇^2 هو مؤثر لابلاس التفاضلي ويأخذ الشكل: $\nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}$ في الإحداثيات الكرتيزية، m هي كتلة الجسيم، و V هي طاقة الوضع للنظام. الدالة الموجية ψ تُعرف بإحداثيات مكانية وزمنية، وتُعرف الكثافة الاحتمالية (ρ) لها بالمعادلة:

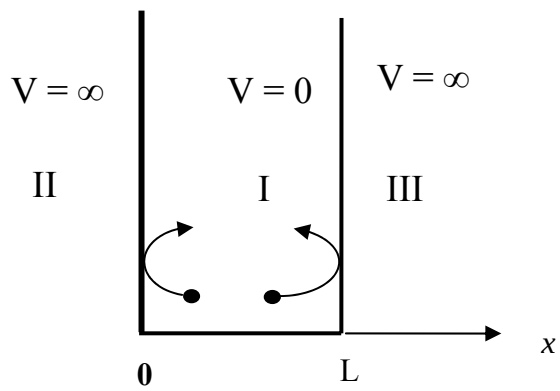
$$\rho = \psi^*\psi = |\psi|^2$$

وهي كمية ثابتة لا تعتمد على الزمن.

في بعض الحالات نجد أن المعادلة (A) تكون لها أكثر من حل مستقل لنفس قيمة الطاقة. فإذا كان لمنسوب الطاقة الواحد أكثر من دالة، أو مستوى، فإن المنسوب يصبح متعدد الانتماء (Degenerate level). ومستوى الطاقة المرتبط بأقل منسوب يسمى المستوى الأرضي (Ground state) والمستويات المرتبطة بطاقات أعلى تسمى مستويات مثارة (Excited states). ومنسوبات الطاقة نستطيع تشبيهها بأرفف المكتبة ذات الارتفاعات المختلفة، والمدارات ما هي إلا الصناديق التي توضع على كل رف، والمستويات هي ما بداخل الصناديق. ولكل منسوب طاقة i، سوف نحدده بالطاقة ε_i، ونحدد عدد مستوياته المختلفة التي تنتمي للطاقة ε_i بالرمز g_i (و g_i سوف تسمى درجة الانتماء).

وكمثال توضيحي دعونا نسترجع المسألة الرئيسية في ميكانيكا الكم ألا وهي دراسة حركة جسيم في مجال جهد يوصف بالتالي (انظر شكل7):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \qquad (1)$$



شكل(7) : جسيم داخل صندوق مغلق تماماً

وهذا المثال ينطبق عملياً على حركة إلكترون حر بداخل قطعة معدنية، لها طاقة توتر سطحي يفوق الطاقة الحركية للإلكترون، وبالتالي فإن الإلكترون يتحرك داخل المعدن ولا يتمكن من الهروب منه، إلا بإعطائه طاقة خارجية. ولحل هذه المسألة نلاحظ من شكل (7) أن حركة الجسيم حرة ولكنها مقيدة في المدى $0 \le x \le L$ حيث إن الجهد $V = \infty$ خارج هذا المدى هو المسئول عن انعكاس الجسيم من حائل الجهد.

والطريقة المثلى لحل هذه النوعية من المسائل هو اتباع التالى:

أولاً: كتابة معادلة شرودنجر، المعادلة (A)، في المنطقة التي يمكن أن يوجد فيها الجسيم.

من الشكل (7) نجد أن الجسيم يوجد في المنطقة (I) فقط، ولذلك فإن معادلة شرودنجر تأخذ الصورة:

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= E\,\psi_I \\ \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= -k^2\psi_I\,, \end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و m هو كتلة الجسيم و E هي الطاقة الكليـة. المنطقتـان $(II),(III)$ غير مسموح للجسيم بالانتقال أو الوجود فيهما نتيجة الجهد $V=\infty$ بالتالي فإن دالة الموجة تتلاشى عند $x=0$ و $x=L$، بمعنى أن الشرط الحدودي يكتب كالتالي:

$$\psi_{II}(x=0)=\psi_{III}(x=L)=0.$$

ثانياً: نقترح حلاً للمعادلة (المعادلات) المعطاة في الفقرة الأولى. نلاحظ هنا أن المعادلة (2) تمثل معادلة حركة توافقية بسيطة وحلها يأخذ الصورة:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \qquad (3)$$

أو

$$\psi_I(x) = a\,e^{ikx} + b\,e^{-ikx} \qquad (4)$$

حيث $i=\sqrt{-1}$ و a,b,A,B ثوابت تعين بواسطة الشروط الحدودية أو الشروط العيارية.

ثالثاً: اختر أحد الحلول وليكن الحل المعرف بالمعادلة (3).

رابعاً: استخدم الشروط الحدودية للتخلص من الثوابت غير المنطقية. مثلاً الشرط:

$$\psi_I(0) = 0 \qquad (5)$$

يتيح لنا التخلص من الثابت B وتؤول المعادلة (3) إلى الدالة المميزة:

$$\psi_I(x) = A\sin(kx) \qquad (6)$$

خامساً: نبدأ في حساب الثوابت A, k

أ- لحساب الثابت k استخدم الشرط الحدي $\psi_I(x=L)=0$، بمعنى:

$$\left.\begin{aligned} \because \quad \psi_I(x=L)&=0 \\ \therefore \quad A\sin(kL)&=0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{k_n = \frac{n\pi}{L}}, \qquad n=1,2,3,\cdots \qquad (7)$$

حيث n يعرف بأنه العدد الكمي.

ب- لحساب الثابت A استخدم شرط العيارية كالتالي:

$$\left.\begin{aligned} &\because \quad \int_0^L |\psi_I|^2\, dx = 1 \\ &\therefore A^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2(k_n x)\,dx}_{\frac{L}{2}} = 1 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}} \qquad (8)$$

وتصبح الدالة المميزة على الصورة:

$$\boxed{\psi_I(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}, \qquad n = 1,2,3,\cdots \qquad \textbf{(9)}$$

ملاحظات:

1- بمعلومية k_n نستطيع أن نحسب الطاقة الكلية E_n وهي:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = n^2 \underbrace{\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)}_{E_1} = n^2 E_1, \qquad n = 1,2,3,\cdots \qquad \textbf{(10)}$$

وهي قيم مكماة (غير متصلة). وتعتبر القيمة $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ هي طاقة المستوى الأرضي للجسيم.

2- القيمة $n = 0$ أهملت لأنها تعطى حلاً صفرياً للطاقة ومعناه أن الجسيم لا يتحرك. وأيضاً تعطي حلاً صفرياً للدالة ومربعها، أي $|\psi_I(0 < x < L)|^2 = 0$، وهو حل غير فيزيائي لأننا نعرف أن الجسيم موجود وله طاقة حركة.

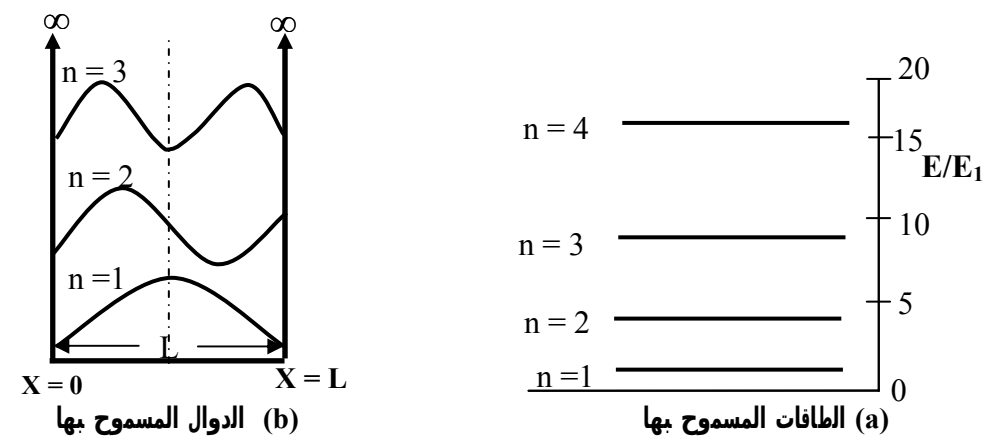
3- القيم السالبة تعطى نمطاً متماثلاً للقيم الموجبة.

4- قيم الطاقة تتناسب مع n^2.

5- المسافة بين مستويات الطاقة "ΔE" تزداد مع زيادة n تبعاً للعلاقة:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (n+1)^2 E_1 - n^2 E_1 = (2n+1)E_1$$

(انظر الشكل $8-a$)



(b) الدوال المسموح بها **(a) الطاقات المسموح بها**

شكل (8): جسيم في صندوق لانهائي الإرتفاع

6- عند حساب متوسط الإزاحة $< x >$ نجد أن:

$$\langle x \rangle = \int_0^L x \, |\psi_I|^2 \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L x \sin^2(k_n x)dx = \frac{2}{L}\left(\frac{L^2}{4}\right) = \frac{L}{2} \qquad \textbf{(11)}$$

ويفسر هذا فيزيائياً بأن كثافة الاحتمال (وأيضاً الدالة) متماثلتان حول مركز الصندوق، أي عند $\frac{L}{2}$. ولهذا فإن احتمالية وجود الجسيم في النصف الأيمن يكون مساوياً لاحتمالية وجوده في النصف الأيسر. (انظر الشكل $8-b$)

7- متوسط كمية الحركة الخطية $\langle \hat{p} \rangle$ تحسب كالتالي:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \psi_I^* \hat{p} \, \psi_I \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(k_n x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\sin(k_n x)\right)dx = 0 \qquad \textbf{(12)}$$

وتفسر المعادلة (12) فيزيائياً بأن انعدام متوسط كمية الحركة الخطية لا تعني أن الجسيم لا يتحرك، ولكن تعني أن احتمالية تحرك الجسيم للشمال يكون مساوياً لاحتمالية تحرك الجسيم لليمين. وذلك لأن كمية الحركة الخطية هي كمية متجهة وليست قياسية.

من السهل أن نعمم هذا الحل، المعادلة (10)، على جسيم يتحرك بداخل صندوق ذي ثلاثة أبعاد $\left(L_x, L_y, L_z\right)$، ومنها نجد أن الطاقة:

$$\varepsilon_j = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right), \qquad \left(n_x, n_y, n_z\right) = 1,2,3,\cdots \tag{13}$$

حيث تم تعريف أي مستوى طاقة بواسطة الأعداد الكمية $\left(n_x, n_y, n_z\right)$. إذا وضعنا الأطوال $L_x = L_y = L_z = L$، فإن

$$\varepsilon_j = \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right) = E_1 n_j^2 \tag{14}$$

حيث n_j هو العدد الكمي الكلي (Total quantum number) لمنسوب الطاقة ε_j. ومن هنا فإن منسوب الطاقة يعتمد فقط على قيمة n_j^2 العددية ولا يعتمد على القيمة العددية لكل من $\left(n_x, n_y, n_z\right)$ على حده. ومن المعادلة (14) نستطيع أن نُعرف درجة الانتماء (أو التعددية) "g_j" بأنها عدد الدوال التي لها نفس الطاقة انظر الجدول (2). هذا الانتماء ناتج من تماثل أطوال المكعب ويزول تماماً بتغير أطوال الصندوق. والجدول (2) يصف درجات الانتماء للمستويات الأولى الخاصة بالمكعب.

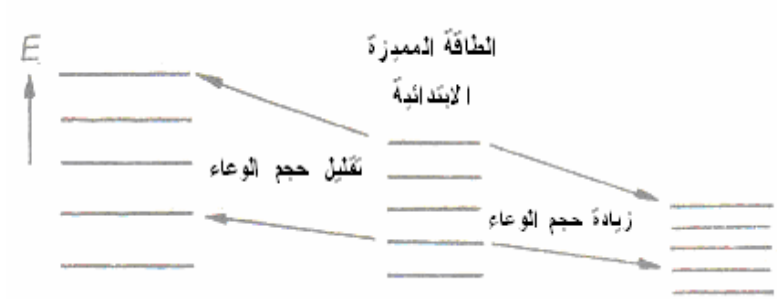
جدول (2): درجة الانتماء للمستويات الأولى لجسيم داخل صندوق ثلاثي الأبعاد

Level	المستوى	$\left(n_x, n_y, n_z\right)$	n_j^2	g_j
$j=1$	المستوى الأرضي	$(1,1,1)$	3	1
$j=2$	المستوى المثار الأول	$(1,1,2),(1,2,1),(2,1,1)$	6	3
$j=3$	المستوى المثار الثاني	$(1,2,2),(2,2,1),(2,1,2)$	9	3
$j=4$	المستوى المثار الثالث	$(2,2,2)$	12	1
$j=5$	المستوى المثار الرابع	$(1,2,3),(3,2,1),(2,3,1)$ $(1,3,2),(2,1,3),(3,1,2)$	14	6

نعلم أن حجم المكعب هو $V = L^3$، ومنه $L^2 = V^{2/3}$، وبالتالي:

$$\varepsilon_j = n_j^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} V^{-2/3} \qquad (15)$$

هذه النتيجة تطبق على أي وعاء له أبعاد اكبر من طول دي- برولي الموجي $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$. وكما هو ملاحظ من المعادلة (15) وشكل (9) فإنه مع زيادة حجم الوعاء نجد أن طاقة المنسوب j تقل وتتزاحم.



شكل(9): تأثير تغير حجم الصندوق على القيم المميزة لطاقة الجسيم بداخله

مثال: لحجم $10^{-3}\ \mathrm{m}^3$ من غاز الهيليوم عند درجة حرارة الغرفة، احسب n_j. مع العلم أن كتلة ذرة الهيليوم هي $m_{He} = 6.65 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg}$

الحل: عند درجة حرارة الغرفة نجد أن متوسط طاقة الحركة لذرات غاز الهيليوم حسب نظرية توزيع الطاقة بالتساوي على درجات الحرية هي:

$$\varepsilon_j = \frac{3}{2}k_B T = \frac{3}{2}\left(1.38\times10^{-23}\right)\left(293\right)$$
$$= 6.06\times10^{-21}\ \text{J} \approx 3.0\times10^{-2}\ \text{eV}$$

ومن المعادلة (15) نجد أن:

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}V^{-2/3} = \frac{\pi^2(1.054\times10^{-34})^2}{2(6.65\times10^{-27})}(10^{-3}\ \text{m}^3)^{-2/3}$$
$$= 8.24\times10^{-40}\ \text{J} \approx 5\times10^{-21}\ \text{eV}.$$

ولذلك

$$n_j = \left(\frac{3.0\times10^{-2}}{5\times10^{-21}}\right)^{1/2} \approx 10^9$$

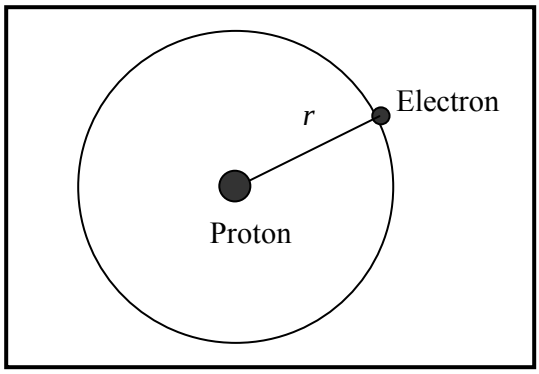
وهذا يعني أن الغالبية العظمى من جزيئات الغاز عند درجة حرارة الغرفة تستقر بالمستويات المثارة العليا ذات الطاقة المرتفعة. وعند القيم العليا للعدد الكمي n_j نجد أن مستويات الطاقة متقاربة جداً بحيث انه لو تغير n_j بمقدار الوحدة $\left(\Delta n_j = 1\right)$ فإن التغير بالطاقة $\left(\Delta\varepsilon_j\right)$ يكون صغيراً جداً. ومن هنا نستطيع أن نتعامل مع الطيف المنفصل للطاقة على أنه طيف مستمر، ومنه نستطيع أن نستبدل التجميع $\left(\sum\right)$ على المستويات بالتكامل $\left(\int\right)$. وهذا هو موضوعنا في الفصل التالي عن كثافة المستويات.

بتغيير الجهد في معادلة شرودنجر (A)، وبدون التعرض لطريقة الحل الرياضية، نجد أنه يمكن حساب الطاقة الكلية والدوال المرافقة لها. على سبيل المثال:

1- الجهد الكولومي $(V = \frac{1}{r})$، كما في ذرة الهيدروجين، والتي تحتوي على نواة بالمركز بها بروتون ويدور حولها إلكترون على مسافة (r) من المركز، كما في الشكل التالي: نجد أن:

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}\ \text{eV}, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

حيث n تعرف بالعدد الكمي الأساسي. العدد $n = 1$ يعبر عن المستوى الأرضي، والأعداد $n > 1$ للمستويات المثارة.



2- الجهد التذبذبي التوافقي $(V = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2)$، حيث r هي الإزاحة عن وضع الاتزان، ويستخدم في تطبيقات فيزيائية كثيرة سوف تذكر لاحقاً، نجد أن:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega,$$

حيث

$$n = n_x + n_y + n_z, \qquad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \cdots$$

viii− تكميم كمية الحركة الزاوية: (Quantization of angular momentum)

نحن نعلم من الفيزياء التقليدية أنه في حالة جسم يتحرك في جهد متماثل كروياً، كما في الجهد الكولومي، فإن كمية الحركة الزاوية "L" للجسم تكون ثابتة. وكمية الحركة الزاوية تلعب دوراً أساسياً في ميكانيكا الكم حيث تستخدم لتعريف مستويات الطاقة وتأخذ قيماً مكماة. عامةً، فإن قيمة L لجسيم (أو أكثر) تعطى بالشكل:

$$\left|\hat{L}\right| = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

حيث l تأخذ قيما صحيحة موجبة. ومركبة كمية الحركة الزاوية في أي اتجاه (مثلاً إتجاه المحور Z) تأخذ القيم:

$$\left|L_z\right| = m_z\,\hbar$$

حيث m_z تعرف بالعدد الكمي المداري المغناطيسي وتأخذ القيم الصحيحة التالية:

$$m_z = l, l-1, \cdots, -l+1, -l$$

وظهرت أيضاً الحركة الذاتية المغزلية "S" (Spin angular momentum) للجسيم، بحيث إن قيمه S لجسيم (أو أكثر) تعطى بالشكل:

$$\left|\hat{S}\right| = \sqrt{s(s+1)}\ \hbar$$

حيث s تأخذ قيما صحيحة، أو أنصاف قيم صحيحة فردية، موجبة. وهذه القيم تعتمد على صفة الجسيم من ناحية التماثل. وسوف نتعرض لهذه النقطة بالملحق ($6.A$). ومركبة كمية الحركة المغزلية في أي اتجاه (مثلاً اتجاه المحور Z) تأخذ فقط القيم التالية:

$$\left|\hat{S}_z\right| = m_s\ \hbar$$

حيث m_s تعرف بالعدد الكمي المغزلي المغناطيسي وتأخذ القيم التالية:

$$m_s = s, s-1, \cdots, -s+1, -s$$

وبجمع الكميتين السابقتين جمعاً متجهاً نحصل على كمية الحركة الزاوية الكلية "J". وقيمة J لجسيم (أو أكثر) تعطى بالشكل:

$$\left|\hat{J}\right| = \sqrt{j(j+1)}\ \hbar$$

حيث j تأخذ قيما صحيحة، أو أنصاف قيم صحيحة، موجبة. ومركبة كمية الحركة الزاوية الكلية في أي اتجاه (مثلاً إتجاه المحور Z) تأخذ القيم:

$$\left|\hat{J}_z\right| = m_j\ \hbar$$

حيث m_j تعرف بالعدد الكمي الكلي المغناطيسي وتأخذ القيم:

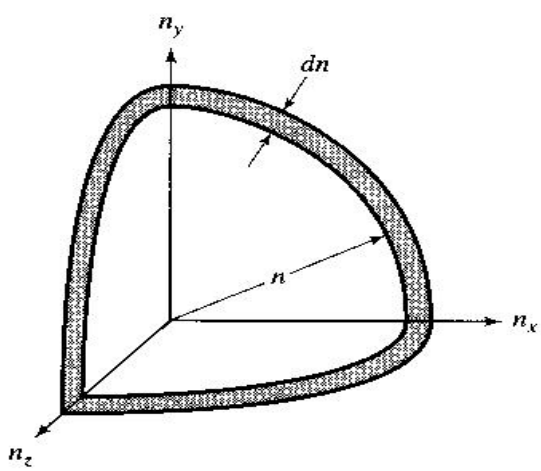
$$m_j = j, j-1, \cdots, -j+1, -j$$

III– كثافة المستويات (Density of states)

تحت الشرط: إن الأعداد الكمية n_j كبيرة ومستويات الطاقة ε_j قريبة من بعضها جداً، نستطيع أن نتعامل مع الأعداد n والطاقات ε على أنها تُكو ن دوالا متصلة وليست كميات من القيم المنفصلة. و سوف ينصب اهتمامنا هنا على إيجاد كثافة المستويات $g(\varepsilon)$ لما لها من أهمية لحساب التوزيع الإحصائي بالأبواب التالية.

ولحساب كثافة المستويات دعونا نفترض، كما بالشكل (7)، أن الأعداد (n_x, n_y, n_z) يمكن تمثيلها بإحداثيات متعامدة. لذلك فإننا نستطيع أن نعرف الكمية $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ بأنها تمثل عدد النقاط ذات الإحداثيات الصحيحة والموجبة، حيث (n_x, n_y, n_z) هي أعداد صحيحة موجبة، وتقع على سطح كرة نصف قطرها n وتصاحب مستويات من الطاقة مختلفة تُعطى بالمعادلة:

$$\varepsilon = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mV^{2/3}} n^2 \qquad \textbf{(1)}$$



شكل (10):قشرة ذات سمك dn لجزء مقداره $\frac{1}{8}$ لكرة نصف قطرها n للإحداثيات الصحيحة والموجبة (n_x, n_y, n_z)

ولإيجاد عدد المستويات $n(\varepsilon)$ التي تتراوح طاقاتها من الصفر إلى ε، يجب أن نوجد الحجم المساوي لحجم $\frac{1}{8}$ من الحجم الكلي للكرة. لذلك نجد أن:

$$n(\varepsilon)=\frac{1}{8}\left(\frac{4}{3}\pi n^3\right)=\frac{\pi}{6}V\left(\frac{8m}{h^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{3/2}, \qquad \textbf{(2)}$$

وعدد المستويات المحصورة بين قيمتي الطاقة ε و $\varepsilon+d\varepsilon$ تأتي من تفاضل المعادلة الأخيرة، لتصبح:

$$dn(\varepsilon)=4\pi V\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon. \qquad \textbf{(3)}$$

وسوف نتعامل مع كثافة المستويات وهي:

$$g(\varepsilon)=\frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon}=4\pi V\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2}=G_sV\,\varepsilon^{1/2} \qquad \textbf{(4)}$$

والتي تمثل عدد المستويات لوحدة الطاقة التي لها نفس الطاقة ε، حيث عرفنا الثابت:

$$G_s=4\pi\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$$

المعادلة (4) ليست هي النتيجة المرجوة تماماً. فهذه المعادلة تأخذ في الاعتبار الحركة الانتقالية فقط للجسيم. ولكن في ميكانيكا الكم توجد للجسيم حركة مغزلية ذاتية " S"، وهذه يجب أن تأخذ في الاعتبار بضرب المعادلة الأخيرة بقيمة التعددية $g_s=(2S+1)$. والقيمة g_s ترمز أيضاً لبعض المعاملات الأخرى والتي يجب أن تأخذ في الاعتبار، مثل الاستقطاب في الموجات الكهرومغناطيسية والمرنة، وسوف نتكلم عنها في مكان لاحق بالكتاب.

ومن المفيد أحيانا أن نعبر عن $g(\varepsilon)$، بالمعادلة (4)، بدلالة كمية الحركة الخطية $p=\sqrt{2m\varepsilon}$ بحيث نجد أن:

$$g(p)=g(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{dp}=\frac{V}{h^3}4\pi p^2 \qquad \textbf{(5)}$$

وتعرف $g(p)$ بأنها عدد المستويات لوحدة كمية الحركة الخطية المحصورة بين قيمتي كمية الحركة الخطية p و $p+dp$ التي لها نفس كمية الحركة الخطية.

وبدلالة التردد $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{pc}{h}$ نستطيع أن نحسب:

$$g(\nu) = g(p)\frac{dp}{d\nu} = \frac{V}{c^3}4\pi\nu^2 \qquad \textbf{(6)}$$

وتعرف $g(\nu)$ بأنها عدد المستويات لوحدة التردد المحصورة بين قيمتي التردد ν و $\nu + d\nu$ التي لها نفس التردد.

وبدلالة التردد الزاوي $\omega = 2\pi\nu$ نجد أن:

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3 c^3}\omega^2 \qquad \textbf{(7)}$$

وتعرف $g(\omega)$ بأنها عدد المستويات لوحدة التردد الزاوي المحصورة بين قيمتي التردد ω و $\omega + d\omega$ التي لها نفس التردد.

وباستخدام العلاقة:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad |d\nu| = \frac{c}{\lambda^2}|d\lambda|$$

نحصل على:

$$g(\lambda) = \frac{4\pi}{\lambda^4}V \qquad \textbf{(8)}$$

ملحوظة: يمكن استنتاج كثافة المستويات بطريقة مبسطة وذلك باستخدام نتائج جسيم بمكعب كالتالي:

$$k_x L = 2\pi n_x \quad \Rightarrow \quad dn_x = \frac{L}{2\pi}dk_x ,$$

$$k_y L = 2\pi n_y \quad \Rightarrow \quad dn_y = \frac{L}{2\pi}dk_y ,$$

$$k_z L = 2\pi n_z \quad \Rightarrow \quad dn_z = \frac{L}{2\pi}dk_z$$

$$d^3n = dn_x dn_y dn_z = \frac{L^3}{(2\pi)^3}d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3}d^3k$$

ملحق (6.A)

الجسيمات المتطابقة وغير المميزة

Identical and indistinguishable Particles

سوف نتعرض هنا للأنظمة الفيزيائية التي تحتوي على جسيمين متطابقين أو أكثر. والجسيمات المتطابقة تعني هنا الجسيمات التي تمتلك نفس الخواص الفيزيائية (كتلة، شحنة، ...) وبالتالي فنحن لا نستطيع أن نميز بينها بواسطة أي قياسات معملية، أو حتى ترقيمها، كما يحدث في الفيزياء الكلاسيكية. إن مبدأ عدم التمييز (Priciple of indistinguishability) يخص جميع الجسيمات غير العينية (المجهرية) مثل الإلكترون والبروتون والنيترون والفوتون، إلخ.

ولتوضيح الصورة، دعونا نأخذ نظاماً يتكون من جسيمين منفصلين (مثلاً إلكترونين)، وسنفترض أنهما يأخذان الترقيم (1) و (2)، بصندوق أحادي الأبعاد بطول L، مع إهمال الحركة المغزلية. الهملتونين لهذا النظام يعرف كالتالي:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla^2(1) + \nabla^2(2)\right] \qquad \textbf{(1)}$$

من الواضح أن الهملتونين متماثل للجسيمين. بمعنى أننا لو بدلنا الترقيم (1) و (2) فإن الهملتونين لن يتغير. ونعلم أن معادلة شرودنجر:

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

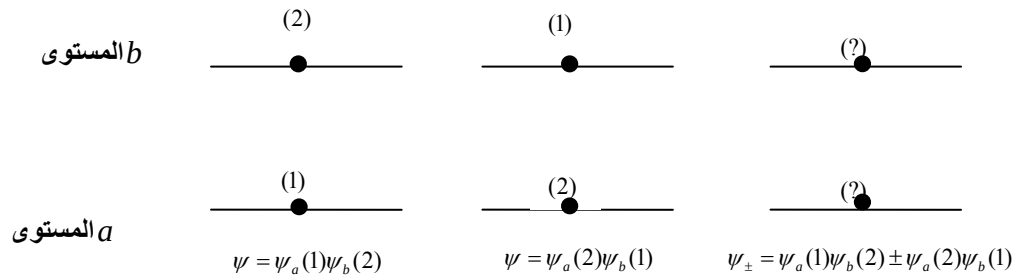
بالإمكان حلها بفصل المتغيرات للجسيمين لنحصل على الدوال المميزة:

$$\psi_a(1) = A\sin\frac{n_a \pi x}{L} \qquad \textbf{(2)}$$

$$\psi_b(2) = A\sin\frac{n_b \pi x}{L} \qquad \textbf{(3)}$$

وسوف نفترض أن أحد الجسيمين بالمستوى a والأخر بالمستوى b. والحل المقبول رياضياً للجسيمين يوضع بالشكل:

$$\psi = \psi_a(1)\psi_b(2) \qquad \textbf{(4)}$$



شكل (11): تواجد الجسيمين (1) وا (2) في المستويين (1) وا (2)

ولنسأل أنفسنا! هل الدالة ψ مقبولة فيزيائياً؟ والإجابة بالطبع لا! لأننا افترضنا مسبقاً أننا قد ميزنا الجسيمين وتأكدنا أن الجسيم (1) بالمستوى a، و الجسيم الثاني (2) بالمستوى b. ونحن نعلم تماماً أن هذا الافتراض غير صحيح ولا نستطيع تأكيده والتحقق منه عملياً. عملياً نستطيع أن نؤكد فقط أن هناك جسيما بالمستوى الأول وجسيما آخر بالمستوى الثاني، ولا أكثر من ذلك، كما في شكل (1) .

وللتغلب على قصورنا في عدم التمييز بين الجسيمات فإنه يوجد طريقة مباشرة لتكوين دالة موجية للجسيمات وخطواتها كالتالي:

1- بالأخذ في الاعتبار أن الهملتونين (1) متماثل للجسيمين، بالتالي فإن الدالة:

$$\psi = \psi_b(1)\psi_a(2) \qquad \textbf{(5)}$$

هي أيضاً تحقق الهملتونين $\hat{H}$.

2- أي تجميع خطي للدوال (4) و(5) سوف يحقق أيضاً الهملتونين (1). على سبيل المثال يوجد تجمعان مهمان وهما:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)\right] \qquad \textbf{(6)}$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)\right] \qquad \textbf{(7)}$$

لو بدلنا الترقيم (1) **و** (2) **بالدالة** ψ_+ **نجد أنها لاتتغير، بمعنى أن:**

$$\hat{P}(1,2)\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(2)\psi_b(1) + \psi_b(2)\psi_a(1)\right] = \psi_+ \qquad \textbf{(8)}$$

وقد استخدمنا بالمعادلة (6) المؤثر التبادلي $\left(\text{Permutation operator}\right)$ $\hat{P}(1,2)$ **الخاص بتبديل الترقيم** (1) **و** (2)**. لذلك يقال عن الدالة** ψ_+ **بأنها تجميع خطي متماثل** (symmetrical linear combination)**. لو أبدلنا الترقيم** (1) **و** (2) **بالدالة** ψ_- **بالمعادلة (7) نجد أنها تتغير في الإشارة، بمعنى أن:**

$$\hat{P}(1,2)\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(2)\psi_b(1) - \psi_b(2)\psi_a(1)\right] = -\psi_- \qquad \textbf{(9)}$$

لذلك يقال عن المعادلة (7) بأنها تجميع خطي $\left(\text{Linear combination}\right)$ **مضاد التماثل** (Antisymmetrical)**. المعادلتان (6) و (7) تدلان على حقيقة مؤكدة وهي أنه يوجد جسيم بالمستوى** a **وجسيم بالمستوى** b**. وبالرغم من هذه الحقيقة المؤكدة فإننا لا نستطيع التكهن مما يوجد بالمستوى** a**، أو بالمستوى** b**، هل هو الجسيم (1)؟ أم الجسيم (2)؟ يتضح من هذا المثال أن مبدأ عدم التحديد لهيزنبرج أرغمنا على أن تصبح الدالة الكلية للجسيمات المتعددة إما متماثلة أو مضادة للتماثل. وحيث إن معظم الدوال ليست بالمتماثلة ولا بالمضادة للتماثل، كما سنرى لاحقاً، لذلك فإن مبدأ عدم التمييز سوف يضع القيود على شكل الدوال المستخدمة.**

صفة التماثل هنا تعكس خاصية مهمة جداً وهي أن طاقة النظام المصاحب للدالة ψ_+ **لايمكن أن يكون كطاقة النظام المصاحب للدالة** ψ_-**، فكيف يحدث هذا؟ نلاحظ أنه في حالة تقارب (تلاصق) الجسيم (1) و الجسيم (2)، فإن الحدين المكونين للدالة** ψ_- **يكونان متساويين (تقريباً)، وبالتالي فإن الدالة** ψ_- **تصبح صغيرة جداً أو تؤول للصفر. ولهذا فإن الدالة** ψ_- **تصف حالة لا يمكن أن يكون فيها الجسيمان متقاربين، ونتيجةً لهذا، فإنه يوجد**

طاقة تنافر (صغيرة في المتوسط) بين الجسيمين. العكس هنا مع الدالة المتماثلة ψ_+، حيث لا تستبعد احتمالية وجود الجسيمين قريبين جدا من بعضهما البعض، لوقت محدد. نتيجةً لذلك، فإن طاقة التنافر للدالة ψ_- تصبح أكبر من طاقة تنافر الدالة ψ_+. وهذا بالطبع ينطبق على الحركة المغزلية للجسيمات.

ومن الملاحظات العملية لأطياف الذرات والجزيئات تم استنباط مبدأ باولي للاستبعاد (Pauli exclusion principle) والذي ينص ببساطة على أنه:

"لا يمكن أن تتشابه الأعداد الكمية الأربعة (l, m_l, s, m_s) لإلكترونين أو أكثر في ذرة واحدة".

والأعداد الكمية المعرفة هنا هي:

1- العدد الكمي الرئيسي (n): وهو الذي يحدد المنسوب الذي يوجد به الإلكترون في الذرة وأيضاً يحدد طاقة المستوى وبعده عن النواة.
2- العدد الكمي المدارى (l): ومنه نحدد قيم المدارات الفرعية في المنسوب الأساسي (**n**). l تأخذ القيم من **0** إلى $n-1$.
3- العدد الكمي المدارى المغناطيسي (m_l): ويحدد اتجاهات المدارات في الفراغ للعدد الكمي المدارى (l) وعدد اتجاهات m_l يحدد بالعلاقة $m_l = 2l+1$
4- العدد الكمي المغزلي (S): ويحدد دوران الجسيم، ويأخذ القيم الصحيحة أو أنصاف أعداد القيم الصحيحة الفردية.
5- العدد الكمي المغزلي المغناطيسي (m_s):ويحدد اتجاهات المدارات في الفراغ للعدد الكمي المغزلي (s) وعدد اتجاهات m_s يحدد بالعلاقة $m_s = 2s+1$

وهناك أعداد كمية أخرى سوف نذكرها لاحقاً.

وقد تم وضع مبدأ باولي للاستبعاد بصورة أخرى وهي:

1- الدالة الكلية (بما فيها الدالة المغزلية) يجب أن تكون مضادة التماثل عند تبديل إحداثيات أي زوج من جسيمات فيرمي (الفيرميون Fermions). وجسيمات الفيرميون

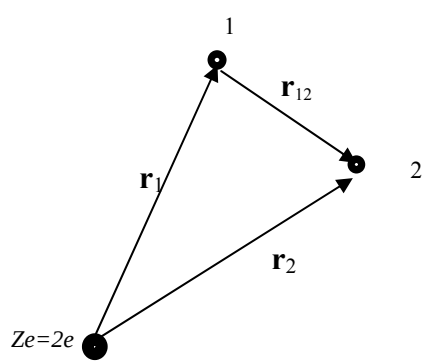
مثل الإلكترون والبروتون والنيوترون, هي التي لها عدد مغزلي "s" يتكون من أنصاف أعداد صحيحة فردية للقيمة $\hbar$.

2- الدالة الكلية (بما فيها الدالة المغزلية) يجب أن تكون متماثلة عند تبديل إحداثيات أي زوج من جسيمات بوز-اينشتاين (بوزون Bosons). وجسيمات البوزون والديوترون، وجسيمات α هي التي لها عدد مغزلي "s" يتكون من أعداد صحيحة للقيمة $\hbar$، مثل الفوتون.

ولقد لعبت خواص التماثل للدالة الكلية دوراً أساسياً في تطوير ميكانيكا الكم الإحصائية. وسوف نناقش هذه الخواص بشيء من التفصيل لاحقاً.

مثال: استعرض جميع الدوال الكلية الممكنة للمستوى الأرضي لذرة الهيليوم.

الحل: نعلم أن المستوى الأرضي لذرة الهيليوم يتكون من إلكترونين (1و2)، مرتبطين بنواة شحنتها $Ze = 2e$، بالمدار 1s (كما في الشكل المجاور)، ولذلك فإن الدوال الأربع الممكنة للمستوى الأرضي لذرة الهيليوم هي:



$$\psi_1 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\alpha(1)\alpha(2)$$
$$\psi_2 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\alpha(1)\beta(2)$$
$$\psi_3 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\beta(1)\alpha(2)$$
$$\psi_4 = \psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\beta(1)\beta(2)$$

هذه الدوال الأربع تعتبرالحل الصحيح لمعادلة شرودنجر:

$$\left(-\frac{1}{2}\left[\nabla^2(1)+\nabla^2(2)\right]-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+\frac{2}{r_{12}}\right)\psi_i = E_o\psi_i$$

ولكن لا توجد أي منها تحقق مبدأ باولي للاستبعاد لجسيمات الفيرميون. وبالإمكان التحقق من ذلك باستخدام المؤثر التبادلي $\hat{P}(1,2)$ لنجد:

$$\hat{P}(1,2)\psi_1 = \psi_{1s}(2)\psi_{1s}(1)\alpha(2)\alpha(1) = \psi_1$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_2 = \psi_3$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_3 = \psi_2$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_4 = \psi_4$$

ولنحافظ على مبدأ عدم التمييز للإلكترونين، يجب أن نأخذ التجميع الخطي لكل من الدالتين ψ_3 و ψ_2. وأنسب التجمعات هي:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\left[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)\right]$$
$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\left[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\right]$$

ومنها نجد أن:

$$\hat{P}(1,2)\psi_+ = +\psi_+$$
$$\hat{P}(1,2)\psi_- = -\psi_-$$

ولذا فإن الدالة المطلوبة التي تحقق مبدأ باولي للاستبعاد هي ψ_-.

باستطاعتنا أن نضع الدالة ψ_- في صورة محدد من الدرجة الثانية، 2، يقال عنه "محدد سلاتر" نسبة إلى العالِم سلاتر، حيث العدد 2 يرمز إلى عدد الجسيمات بالنظام ويأخذ الصورة:

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_{1s}(1)\alpha(1) & \psi_{1s}(1)\beta(1) \\ \psi_{1s}(2)\alpha(2) & \psi_{1s}(2)\beta(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_{1s}^{\alpha}(1) & \psi_{1s}^{\beta}(1) \\ \psi_{1s}^{\alpha}(2) & \psi_{1s}^{\beta}(2) \end{vmatrix} \qquad \textbf{(10)}$$

لاحظ هنا أنه في حالة وجود إلكترونين لها نفس الأعداد الكمية فإن المحدد يأخذ الشكل:

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_{1s}^{\alpha}(1) & \psi_{1s}^{\alpha}(1) \\ \psi_{1s}^{\alpha}(2) & \psi_{1s}^{\alpha}(2) \end{vmatrix} = 0$$

ولهذا انعدم المحدد نظراً لوجود صفين (أو عمودين) متطابقين. بالتالي فإن هذه الدالة سوف تستبعد، وهي تحقق مبدأ باولي للاستبعاد.

وعامةً فإن محدد سلاتر للدالة $\psi_$ من درجة N ، حيث N هو عدد الجسيمات بالنظام، يكتب بالصورة:

$$\psi(1,2,\cdots,N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \psi_c(1) & \cdots \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \psi_c(2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_a(N-1) & \psi_b(N-1) & \psi_c(N-1) & \cdots \\ \psi_a(N) & \psi_b(N) & \psi_c(N) & \cdots \end{vmatrix} \qquad \textbf{(11)}$$

حيث إن للمحدد الخواص التالية:

1- بتبديل أي زوج من الجسيمات يغير المحدد صفة التماثل، لأن قيمة المحدد تتغير إشارته بتبديل أي صفين (أو أي عمودين).

2- عند تطابق صفين (أو عمودين)، تنعدم قيمة المحدد.

وللاختصار يكتب المحدد بالشكل $\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left|\psi_1(1)\psi_2(2)\cdots\psi_N(N)\right|$ أو بالشكل $\left\|\psi_1(1)\psi_2(2)\cdots\psi_N(N)\right\|$.

واجب منزلي:

1. تحقق من أن مفكوك محدد سلاتر لثلاثة الكترونات يعطى بالشكل:

$$\Psi(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{3!}}[\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3)+\psi_1(2)\psi_2(3)\psi_3(1)+\psi_1(3)\psi_2(1)\psi_3(2)$$
$$-\psi_1(1)\psi_2(3)\psi_3(2)-\psi_1(2)\psi_2(1)\psi_3(3)-\psi_1(3)\psi_2(2)\psi_3(1)]$$

تمارين عامة

1- احسب عدد الطرق الممكنة لتوزيع أربع جسيمات متطابقة، ولكن مميزة، على صندوقين متطابقين بحيث يحتوي كل صندوق على جسيمين. (الحل: 6)

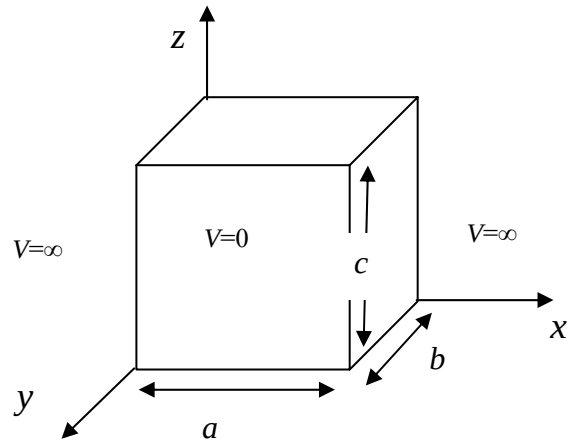
2- احسب عدد الطرق الممكنة لتوزيع أربع جسيمات متطابقة وغير مميزة على صندوقين متطابقين بحيث يحتوي كل صندوق على جسيمين. (الحل: 1)

3- الكمية x تأخذ القيم $-20,-10,30$ بالاحتمالية $\frac{3}{10},\frac{1}{5},\frac{1}{2}$ لكل منهما بالترتيب. اثبت أن:
$\overline{x}=7$ **و** $\overline{x^2}=?$ **و** $\Delta x=\sqrt{\overline{x^2}-\overline{x}^2}=23.26$ **.**

4- ادرس حركة جسيم بداخل صندوق مقفل ثلاثي الأبعاد في مجال جهد كما هو موضح في الشكل(12) ويوصف بالتالي:

$$V(x,y,z)=\begin{cases} 0, & 0\langle x\langle a,\ 0\langle y\langle b,\ 0\langle z\langle c \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

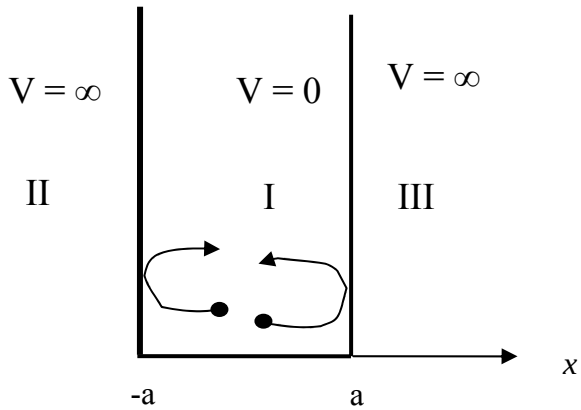
طاقة الوضع ($V=0$) بداخل الصندوق فقط.



شكل(12): جسيم داخل صندوق (ثلاثي الأبعاد)

5- ادرس حركة جسيم في مجال جهد متماثل كما هو موضح في شكل(13) ويوصف كالتالي:

$$V(x)=\begin{cases}0, & -a\le x\le a\\ \infty, & \text{otherwise}\end{cases}$$



شكل(13):جسم داخل صندوق لانهائي الإرتفاع

وأثبت أن

$$\psi_I(x) = \begin{cases} A\sin(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is even} \\ B\cos(\frac{n\pi}{2a}x) & n \text{ is odd} \end{cases}$$

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad A = B = \sqrt{\frac{1}{a}}$$

6- نظام يتكون من جسيمين من جسيمات البوزون في مجال جهد يوصف بالتالي:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

أ- مع إهمال الحركة المغزلية، إحسب دالة المستوى الأرضي للنظام، وطاقته.

ب- إحسب دالة المستوى المثار الأول للنظام، وطاقته.

ت- حل الجزئين أ و ب بإعتبار وجود الحركة المغزلية.

ث- حل الأجزاء أ و ب وت لجسيمين من الفيرميون.

7- تحقق من أن مفكوك محدد سلاتر لثلاثة إلكترونات بذرة الليثيوم "Li" يعطى بالشكل:

$$\psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} \psi_{1S}(1)\alpha(1) & \psi_{1S}(1)\beta(1) & \psi_{2S}(1)\alpha(1) \\ \psi_{1S}(2)\alpha(2) & \psi_{1S}(2)\beta(2) & \psi_{2S}(2)\alpha(2) \\ \psi_{1S}(3)\alpha(3) & \psi_{1S}(3)\beta(3) & \psi_{2S}(3)\alpha(3) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}}[\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) + \psi_1(2)\psi_2(3)\psi_3(1) + \psi_1(3)\psi_2(1)\psi_3(2)$$
$$-\psi_1(1)\psi_2(3)\psi_3(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)\psi_3(3) - \psi_1(3)\psi_2(2)\psi_3(1)]$$