

الباب الأول

المتذبذب التوافقي الخطي باستخدام نظرية المؤثرات

Linear Harmonic Oscillator Using Operator Theory Approach

لقد تمت دراسة المتذبذب التوافقي الخطي باستخدام المتسلسلات (دالة هيرميت) ووجد أن الحل يتطلب خبرة رياضية مكثفة بالمعادلات التفاضلية. ولكننا هنا سوف نتعامل مع المسألة باستخدام طريقة أخرى وهي طريقة نظرية المؤثرات (Operator theory approach). ولماذا هذه الطريقة؟ لأننا نستطيع من خلالها حساب القيم المميزة والمتوسطة للكميات الفيزيائية مثل المسافة وكمية الحركة الخطية بدون معرفة مسبقة للدالة المميزة. وهذا يعتبر إنجازاً كبيراً حيث أننا أخبرنا سابقاً أننا لا نستطيع حساب القيم المميزة والمتوسطة للكميات الفيزيائية إلا بمعلومية الدالة المميزة ولهذا تم استخدام المعادلات التفاضلية لإيجادها.

دعونا نبدأ بالهملتونيان الخاص بالمتذبذب التوافقي الخطية بالشكل:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (1.1)$$

وقد وجدنا سابقاً أن الهملتونيان (1.1) يحقق معادلة شرودنجر:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n &= E_n\psi_n, \\ E_n &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1.2)$$

حيث E_n و ψ_n هما القيم والدوال المميزة للهملتونيان (1.1) بالترتيب. ومن الآن فصاعداً سوف نستخدم تعريف ديراك (راجع تعريف البرا والكت بكتابنا الأول) للدالة وهو $|n\rangle \equiv \psi_n$ حيث خاصيتي المعايرة و التعامد للدوال تحكمها العلاقة:

$$\langle m | n \rangle = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & \text{for } m = n \\ 0 & \text{for } m \neq n \end{cases}$$

حيث $\delta_{m,n}$ هي دالة كرونكر. ولإتمام مهمتنا دعونا نبدأ أولاً بتعريف المؤثرات الجديدة:

$$\begin{aligned}\hat{a} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}) \\ \hat{a}^\dagger &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p})\end{aligned}\quad (1.3)$$

لاحظ هنا أن هذه المؤثرات عُرفت بدلالة مؤثرات لكميات قياسية (وهما المكان x وكمية الحركة الخطية p وتربطهما العلاقة $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$).

واجب منزلي: باستخدام العلاقة $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ ، اثبت علاقة التبادل التالية:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \quad (1.4)$$

واجب منزلي: من المعادلة (1.3) اثبت أن:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})\end{aligned}\quad (1.5)$$

مثال : بدلالة المؤثرات الجديدة اثبت أن:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \quad (1.6)$$

الحل: من المعادلة (1.5) نجد أن:

$$\begin{aligned}\hat{x}^2 &= \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\right]^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\{(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{p}^2 &= \left[i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \right]^2 = -\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)\{(\hat{a}^\dagger - \hat{a})(\hat{a}^\dagger - \hat{a})\} \\ &= -\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\}\end{aligned}$$

و من المعادلتين (1.1) و(1.4) نجد:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{1}{2m}\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\} \\ &\quad + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\{\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

سننوقف هنا قليلاً للتحدث عن المعادلة (1.6) التي ظهر فيها مؤثر جديد وهو $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ ، ويدعى "المؤثر العددي (number operator)" والذي له الخواص التالية:

١- \hat{N} مؤثر هيرميتي نظراً لأن:

$$\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger = \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N}$$

٢- لأن المؤثر \hat{H} مرتبط مع \hat{N} بعلاقة خطية فهما متلازمان، بمعنى أن:

$$[\hat{N}, \hat{H}] = 0$$

٣- ونتيجةً للخاصية رقم ٢ فإن \hat{H} و \hat{N} يكون لهما نفس الدالة المميزة $|n\rangle$ ، وبمقارنة المعادلتين (1.2) و (1.6) نجد أن:

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

(1.7)

نظرية: إذا كانت الدالة المميزة $|n\rangle$ للمؤثر \hat{N} لها القيمة المميزة n فإن $n \geq 0$.

الإثبات: بضرب المعادلة $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ من اليسار بالمتجه $\langle m|$ ينتج:

$$\langle m|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n\langle m|n\rangle = n\delta_{mm}$$

وحيث أن الطرف الأيسر هو المعيار (Norm) فهو قيمة موجبة وبالتالي فإن $n \geq 0$.

واجب منزلي: اثبت أن:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}\right) \quad (1.8)$$

والآن دعونا ندرس تأثير كل من \hat{a} و \hat{a}^\dagger على الدالة المميزة للمتذبذب التوافقي الخطي $|n\rangle$. بتأثير \hat{a} سوف ينتج لنا متجه جديد وهو $\hat{a}|n\rangle$. وبتأثير \hat{H} على المتجه الجديد ينتج التالي (وذلك باستخدام المعادلة (1.8)):

$$\hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = \left\{ \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}\right) \right\} (\hat{a}|n\rangle) \quad (1.9)$$

وبتفكيك الطرف الأيمن للمعادلة (1.9) نجد:

$$\hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle) - \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{a}|n\rangle \quad (1.10)$$

وباستخدام المعادلتان (1.6) و (1.7) نصل إلى:

$$\hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = \hbar\omega\hat{a}\hat{N}|n\rangle - \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{a}|n\rangle = \left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega(\hat{a}|n\rangle) \quad (1.11)$$

وباسترجاع المعادلة $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ ينتج:

$$\hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}|n\rangle) \quad (1.12)$$

واجب منزلي: بطريقة مماثلة للخطوات السابقة أثبت أن:

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|n\rangle) \quad (1.13)$$

ماذا نستنتج من المعادلتين السابقتين؟ بالنظر أولاً إلى المعادلة (1.12) نجد أنها معادلة قيم مميزة! للهملتونيان \hat{H} ولكن لها الدالة المميزة $\hat{a}|n\rangle$ والقيمة المميزة $(E_n - \hbar\omega)$. ومعنى هذه المعادلة هو: أن تأثير \hat{a} على الدالة المميزة الأصلية $|n\rangle$ ، التي لها القيم المميزة E_n أنتج لنا دالة مميزة جديدة هي $\hat{a}|n\rangle$. هذه الدالة الجديدة جعلت للهملتونيان \hat{H} قيماً مميزةً جديدةً وهي $(E_n - \hbar\omega)$. وحيث أن القيمة المميزة الجديدة للطاقة أقل من القيمة الأصلية E_n ، بمقدار وحدة طاقة $(\hbar\omega)$ ، فإن المؤثر الجديد \hat{a} يدعى مؤثر الفناء (annihilation operator) أو المؤثر التنازلي (lowering operator) أو المؤثر (الدرجي) السلمي (ladder operator).

بتطبيق نفس التحليل السابق على المعادلة (1.13) نجد أن تأثير \hat{a}^\dagger على الدالة المميزة الأصلية $|n\rangle$ ، أنتج لنا دالة مميزة جديدة هي $\hat{a}^\dagger|n\rangle$. هذه الدالة الجديدة جعلت للهملتونيان \hat{H} قيماً مميزةً جديدةً وهي $(E_n + \hbar\omega)$. وحيث أن القيمة المميزة الجديدة للطاقة أعلى من القيمة الأصلية E_n ، بمقدار وحدة طاقة $(\hbar\omega)$ ، فإن المؤثر الجديد \hat{a}^\dagger يدعى مؤثر التخليق (creation operator) أو المؤثر التصاعدي (raising operator).

مثال: استخدم مؤثر الفناء \hat{a} لحساب طاقة المستوى الأرضي E_0 للمتذبذب التوافقي الخطي.

الحل: نعلم من دراستنا السابقة أن الطاقة الكلية للمتذبذب التوافقي الخطي كمية موجبة دائماً. وبالتالي إذا استخدمنا مؤثر الفناء \hat{a} على دالة المستوى الأرضي $|0\rangle$ فإننا لن نحصل على كمية سالبة ولكن نحصل على صفر، وتمثل رياضياً بالمعادلة:

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (1.14)$$

وهذا الشرط يُسهل لنا الحصول على طاقة أقل مستوي وذلك بدراسة تأثير \hat{H} على الدالة $|0\rangle$ واستخدام المعادلة (1.6) نجد:

$$\begin{aligned}\hat{H}|0\rangle &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle \\ &= \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle + \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle\end{aligned}$$

لاحظ أنه باستخدام المعادلة (1.14) فإن الحد الأول بالمعادلة السابقة سوف يؤول للصفر ويتبقى الحد الثاني وهو:

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \quad (1.15)$$

بالتالي طاقة المستوى الأرضي للمتذبذب التوافقي الخطي تساوي القيمة:

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega} \quad (1.16)$$

من نتيجة المثال السابق نستطيع أن نحسب القيم المميزة العليا باستخدام المؤثر التصاعدي. على سبيل المثال: بالتأثير على الدالة المميزة $|0\rangle$ بالمؤثر \hat{a}^\dagger ثم بالمؤثر \hat{H} ينتج (بعد استخدامنا للمعادلة (1.13) مع وضع $n=0$) المعادلة التالية:

$$\begin{aligned}\hat{H}|1\rangle &= \hat{H}(\hat{a}^\dagger|0\rangle) = (E_0 + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|0\rangle) \\ &= \frac{3}{2}\hbar\omega(\hat{a}^\dagger|0\rangle) = \frac{3}{2}\hbar\omega|1\rangle\end{aligned} \quad (1.17)$$

ومنها نجد أننا حصلنا على دالة مميزة جديدة ولها القيمة المميزة $\frac{3}{2}\hbar\omega$. بتكرار العملية السابقة عدد n من المرات نصل إلى القيمة المميزة العامة انظر المعادلة (1.2)

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.18)$$

والآن إذا فرضنا أن المؤثر التصاعدي \hat{a}^\dagger يؤثر على الدالة المميزة $|n\rangle$ ويعطينا المعادلة المميزة:

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = c_{n+1} |n+1\rangle \quad (1.19)$$

فما هو الثابت c_{n+1} ؟ وكيف يحسب؟

لحساب الثابت c_{n+1} دعونا نتعامل مع الضرب القياسي التالي:

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger |n\rangle &= (\langle n | \hat{a}) (\hat{a}^\dagger |n\rangle) = (\langle \hat{a}^\dagger n |) (\hat{a}^\dagger |n\rangle) \\ &= (c_{n+1}^*) (c_{n+1}) \underbrace{\langle n+1 | n+1 \rangle}_{=1} \\ &= |c_{n+1}|^2 \end{aligned} \quad (1.20)$$

حيث استخدمنا $\langle \hat{a}^\dagger n | = c_{n+1}^* \langle n+1 |$ وذلك من المعادلة (1.19). وباستخدام العلاقة $\hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1$ نجد أن:

$$\begin{aligned} |c_{n+1}|^2 &= \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 |n\rangle = \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle + \langle n | n \rangle \\ &= \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle + 1 = n + 1 \end{aligned} \quad (1.21)$$

وذلك تم باستخدام المعادلة (1.7). ومن (1.21) نجد أن:

$$c_{n+1} = \sqrt{n+1} \quad (1.22)$$

وبالتالي

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (1.23)$$

مثال: استخدم المعادلة (1.23) لحساب $\hat{a}^{\dagger 3} |n\rangle$.

الحل: باستخدام المعادلة (1.23) ثلاث مرات متتالية ينتج:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger |n\rangle) &= \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger (\sqrt{n+1} |n+1\rangle) \\
 &= \sqrt{n+1} \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger |n+1\rangle) \\
 &= \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} (\hat{a}^\dagger |n+2\rangle) \\
 &= \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \sqrt{n+3} |n+3\rangle
 \end{aligned}$$

مثال: استخدم تعريف القيمة المتوسطة $\hat{A}_{m,n} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$ لكتابة التمثيل المصفوفي للمؤثر \hat{a}^\dagger .

الحل: بضرب المعادلة (1.23) من الجهه اليسرى بالمتجه $\langle m |$ ينتج:

$$\begin{aligned}
 \langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle &\equiv \hat{a}_{m,n}^\dagger = \sqrt{n+1} \langle m | n+1 \rangle \\
 &= \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} = \sqrt{n+1} \times \begin{cases} 1 & \text{for } m = n+1 \\ 0 & \text{for } m \neq n+1 \end{cases}
 \end{aligned}$$

ونجد التمثيل المصفوفي للمؤثر \hat{a}^\dagger ويعطى بالشكل (\hat{a}^\dagger) حيث:

$$(\hat{a}^\dagger) = \begin{matrix} \langle 0 | \\ \langle 1 | \\ \langle 2 | \\ \vdots \end{matrix} \begin{matrix} \hat{a}_{0,0}^\dagger & \hat{a}_{0,1}^\dagger & \hat{a}_{0,2}^\dagger & 0 & \dots \\ \hat{a}_{1,0}^\dagger & \hat{a}_{1,1}^\dagger & \hat{a}_{1,2}^\dagger & 0 & \dots \\ \hat{a}_{2,0}^\dagger & \hat{a}_{2,1}^\dagger & \hat{a}_{2,2}^\dagger & 0 & \dots \\ \hat{a}_{3,0}^\dagger & \hat{a}_{3,1}^\dagger & \hat{a}_{3,2}^\dagger & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{matrix} = \begin{matrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \end{matrix}$$

واجب منزلي: إذا افترضنا أن المؤثر التنازلي \hat{a} يؤثر على الدالة المميزة $|n\rangle$ ويعطينا المعادلة المميزة الأتية:

$$\hat{a}|n\rangle = c_{n-1}|n-1\rangle \quad (1.24)$$

اثبت أن $c_{n-1} = \sqrt{n}$.

مثال: استخدم المعادلة (1.24) لحساب $\hat{a}^3|n\rangle$.

الحل: باستخدام المعادلة (1.24) ثلاث مرات متتالية ينتج:

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}(\hat{a}|n\rangle) &= \hat{a}\hat{a}(\sqrt{n}|n-1\rangle) = \sqrt{n}\hat{a}(\hat{a}|n-1\rangle) \\ &= \sqrt{n}\sqrt{n-1}(\hat{a}|n-2\rangle) \\ &= \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}|n-3\rangle \end{aligned}$$

مع وجوب الشرط $n \geq 3$.

مثال: استخدم المعادلتين (1.23) و (1.24) لحساب $\langle m|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle$.

الحل: نبدأ أولاً بحساب:

$$\hat{a}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \sqrt{n+1}\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle$$

ويضرب المعادلة من اليسار بالمتجه $\langle m|$ نجد:

$$\langle m|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\langle m|n\rangle = (n+1)\delta_{m,n} = (n+1) \times \begin{cases} 1 & \text{for } m = n \\ 0 & \text{for } m \neq n \end{cases}$$

واجب منزلي: استخدم المعادلتين (1.23) و (1.24) لإثبات أن

$$\langle m | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = n \times \begin{cases} 1 & \text{for } m = n \\ 0 & \text{for } m \neq n \end{cases}$$

ملخص الباب الأول: لقد وجدنا في هذا الباب الحقائق التالية:

١- أوجدنا الطاقة الكمية للمتذبذب التوافقي الخطي بالمعادلة (1.18).

٢- أوجدنا كيف يؤثر المؤثر التصاعدي والتنازلي على دالة الطاقة المميزة بالمعادلتين (1.23) و (1.24). هاتان المعادلتان مهمتان لحساب القيم المتوسطة للكميات الفيزيائية (مثل المسافة وكمية الحركة الزاوية إلخ).

٣- تم التعامل مع جميع الحسابات بدون اللجوء إلى (أو معرفة) الصيغة العامة للدالة المميزة وهذا هو المهم بهذا الموضوع.

أمثلة محلولة

١- استخدم المعادلات الآتية:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger |m\rangle = \sqrt{m+1} |m+1\rangle &\Rightarrow \langle n | \hat{a}^\dagger |m\rangle = \sqrt{m+1} \underbrace{\langle n | m+1 \rangle}_{\delta_{n,m+1}}; \\ \hat{a} |m\rangle = \sqrt{m} |m-1\rangle &\Rightarrow \langle n | \hat{a} |m\rangle = \sqrt{m} \underbrace{\langle n | m-1 \rangle}_{\delta_{n,m-1}}; \end{aligned}$$

والعلاقة $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$ ، للتأكد من صحة الحسابات التالية:

$$\begin{aligned} \langle l | \hat{x} | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\langle l | a^\dagger | n \rangle + \langle l | a | n \rangle] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{l,n+1} + \sqrt{n} \delta_{l,n-1}] \end{aligned}$$

ومنه تحقق من أن:

$$\langle l | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \times \begin{cases} \sqrt{n+1} & \text{for } l = n+1 \\ \sqrt{n} & \text{for } l = n-1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

و

$$\begin{aligned} \langle l | \hat{x}^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (a + a^\dagger)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \{ \langle l | \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle \} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [\langle l | a^\dagger a^\dagger | n \rangle + \langle l | a^\dagger a | n \rangle + \langle l | a a^\dagger | n \rangle + \langle l | a a | n \rangle] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [\sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{l,n+2} + (2n+1) \delta_{l,n} + \sqrt{n(n-1)} \delta_{l,n-2}] \end{aligned}$$

ومنه تحقق من أن:

$$\langle l | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \times \begin{cases} \sqrt{(n+1)(n+2)} & \text{for } l = n+2 \\ (2n+1) & \text{for } l = n \\ \sqrt{n(n-1)} & \text{for } l = n-2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

٢- استخدم التعريف $\hat{A}_{n,n} = \langle n | \hat{A} | n \rangle$ لحساب كل من القيم: $\langle \hat{x} \rangle$ ، $\langle \hat{x}^2 \rangle$ ، $\langle \hat{p} \rangle$ و $\langle \hat{p}^2 \rangle$.

الحل: باستخدام المعادلات بالمثل السابق (وأيضاً المعادلة (1.4)) نجد أن:

$$\langle \hat{x} \rangle = 0;$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (a + a^\dagger)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \{ \langle n | \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle \} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \{ \langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle \} = \frac{\hbar}{2m\omega} \{ \langle n | 2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 1 | n \rangle \} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \{ \langle n | 2\hat{N} + 1 | n \rangle \} = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) \\ &= \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

وبالمثل:

$$\langle \hat{p} \rangle = 0;$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}^2 \rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle (a - a^\dagger)^2 \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \{ \langle n | \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle \} \\ &= \frac{m\hbar\omega}{2} \{ \langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle \} = \frac{m\hbar\omega}{2} \times 2 \times \{ \langle n | \hat{N} + \frac{1}{2} | n \rangle \} \\ &= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

٣- استخدم التعريف $(\hat{A}) = \hat{A}_{m,n} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$ لكتابة المصفوفات التي تمثل كل من المؤثرات التالية: \hat{a} ، $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ ، $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ ، $\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger$.

الحل:

$$(\hat{a}) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}; \quad (\hat{a}^\dagger\hat{a}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix};$$

$$(\hat{a}\hat{a}^\dagger) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}; \quad (\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

٤- استخدم مؤثر الفناء \hat{a} لحساب دالة المستوى الأرضي ψ_0 للمتذبذب التوافقي الخطي.

الحل: علمنا سابقاً أن:

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$$

وباستخدام $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p})$ حيث $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ بالمعادلة السابقة نجد:

$$\left(i(-i\hbar\frac{d}{dx}) + m\omega x\right)\psi_0(x) = 0$$

$$\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0(x) = 0$$

ومع بعض الترتيبات نجد:

$$\hbar \frac{d\psi_0(x)}{dx} = -m\omega x \psi_0$$

$$\frac{d\psi_0(x)}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx$$

ويجاء التكامل لكلا الطرفين، نجد:

$$\psi_0(x) = Ne^{-\alpha x^2}, \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

حيث N هو ثابت التكامل. من شرط المعايرة $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x) dx = 1$ نجد أن $N^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$. وقد

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

استخدمنا التكامل القياسي

٥- إثبت أن:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$$

الحل: باستخدام العلاقة $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ نجد أن

$$\hat{a}^\dagger |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle; \quad \hat{a}^\dagger |1\rangle = \sqrt{2} |2\rangle; \quad \hat{a}^\dagger |2\rangle = \sqrt{3} |3\rangle$$

بالتالي فإن:

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{a}^\dagger |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \times 2}} (\hat{a}^\dagger)^2 |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \times 2 \times 1}} (\hat{a}^\dagger)^3 |0\rangle$$

ولهذا فإن الحالة العامة تحكمها العلاقة: $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$.

تمارين عامة

١- استخدم التعريف $\langle \hat{A} \rangle = \langle n | \hat{A} | n \rangle$ لإثبات أن

$\langle \hat{a} \rangle$	0	$\langle \hat{x} \rangle$	0
$\langle \hat{a}^\dagger \rangle$	0	$\langle \hat{p} \rangle$	0
$\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger \rangle$	$n+1$	$\langle \hat{x}^2 \rangle$	$\frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$
$\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$	n	$\langle \hat{p}^2 \rangle$	$m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$

٢- احسب القيم $\Delta\hat{x} = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$ و $\Delta\hat{p} = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2}$ واثبت أن $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar$.

٣- اثبت العلاقات التالية:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger); \quad [\hat{a}, H] = \hbar\omega\hat{a}; \quad [\hat{a}^\dagger, H] = -\hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

٤- استخدم مؤثر الفناء \hat{a} لحساب دالة المستوى $|1\rangle$ للمذبذب التوافقي الخطي.

٥- اعتبر الهلمتونيان للمذبذب التوافقي الخطي باتجاهي المحور السيني والصادي للإحداثيات الكرتيزية يعطي بالشكل:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{k}{2}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \quad k = m\omega^2$$

إثبت أن

$$\begin{aligned} \hat{H} &= (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1) \hbar\omega, \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = i\hbar(\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y) \\ [\hat{L}_z, \hat{H}] &= 0 \end{aligned}$$

حيث

$$\hat{p}_x = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}_x^\dagger - \hat{a}_x), \quad \hat{p}_y = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_y)$$

ملحوظة: استخدم علاقات التبادل التالية:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{y}] &= [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0, \\ [\hat{a}_x, \hat{a}_y] &= [\hat{a}_x, \hat{a}_y^\dagger] = [\hat{a}_x^\dagger, \hat{a}_y] = [\hat{a}_x^\dagger, \hat{a}_y^\dagger] = 0. \end{aligned}$$

٦- باستخدام الهملتونيان:

$$\hat{H} = (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1) \hbar\omega$$

والدالة

$$|n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 0\rangle + |0, 1\rangle]$$

اثبت أن

$$\langle n_x, n_y | \hat{H} | n_x, n_y \rangle = 2\hbar\omega$$

٧- اثبت أن

$$\langle l | \hat{x}^3 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \times \begin{cases} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} & \text{for } l = n+3 \\ 3(n+1)\sqrt{n+1} & \text{for } l = n+1 \\ 3n\sqrt{n} & \text{for } l = n-1 \\ \sqrt{n(n-1)(n-2)} & \text{for } l = n-3 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

و

$$\langle l | \hat{x}^4 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \times \begin{cases} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} & \text{for } l = n+4 \\ (4n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)} & \text{for } l = n+2 \\ 6n^2 + 6n + 3 & \text{for } l = n \\ (4n-2)\sqrt{n(n-1)} & \text{for } l = n-2 \\ \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} & \text{for } l = n-4 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

٨- جسيم بدأ من المستوي $(|0\rangle + |1\rangle)$ عند الزمن $t = 0$.

أ- تحقق من أن المستوي للجسيم عند الزمن t يعطي بالعلاقة:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-iE_0 t / \hbar} |0\rangle + e^{-iE_1 t / \hbar} |1\rangle \right),$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

ب- اثبت أن:

$$\begin{aligned}\langle x(0) \rangle &= \langle \psi(0) | x | \psi(0) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \\ \langle p(0) \rangle &= 0, \\ \langle x(t) \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t), \\ \langle p(t) \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sin(\omega t)\end{aligned}$$

ت- باستخدام نظرية إيرنست اثبت أن:

$$\begin{aligned}\langle \dot{x}(t) \rangle &= \frac{\langle p(t) \rangle}{m}, \\ \langle \dot{p}(t) \rangle &= -m\omega^2 \langle x(t) \rangle\end{aligned}$$

ث- من المعادلات التفاضلية السابقة تأكد من الحل:

$$\begin{aligned}\langle x(t) \rangle &= \langle x(0) \rangle \cos(\omega t) + \frac{\langle p(0) \rangle}{m} \sin(\omega t), \\ \langle p(t) \rangle &= \langle p(0) \rangle \sin(\omega t) - m\omega^2 \langle x(0) \rangle \cos(\omega t)\end{aligned}$$

الباب الثاني

كمية الحركة الزاوية الكلية

Total Angular Momentum

لنتضح الصورة بالنسبة لكمية الحركة الزاوية المغزلية (Spin Angular Momentum) لجسيم غير مرئي (إلكترون مثلاً) دعونا نتكلم أولاً عن حركة الأرض، فبالإضافة إلى حركتها المدارية حول الشمس يوجد أيضاً لها حركة دورانية (مغزلية) حول محور مار بمركز ثقلها. وبالتالي فإن كمية الحركة الزاوية الكلية ما هي إلا محصلة الجمع المتجهي لكمية الحركة الزاوية الدورانية وكمية الحركة الزاوية المغزلية. بالقياس على ذلك فإننا نستطيع أن نخمن (نفترض) أن إلكترون الذرة يمتلك هذه الخاصية المغزلية. ولكن، نتيجة عدم معرفتنا بالتركيبية الداخلية للإلكترون فإننا لا نستطيع وصف كنهة الإلكترون على أنه جسيم كروي، ونتيجة لهذا فإننا لا نستطيع حساب كمية الحركة الزاوية المغزلية للإلكترون بنفس طريقة حساب كمية الحركة الزاوية المغزلية للأرض بدلالة نصف قطرها وسرعتها الزاوية. هذا التخمين (الافتراض) لم يأتي من فراغ بل جاء نتيجة تجارب معملية مكثفة، في بداية القرن الماضي، لأطياف لبعض العناصر الذرية. وأهم هذه التجارب هي:

١- تجربة شتينر-جيرلاخ (Stern-Gerlach Experiment)، وتم فيها دراسة تأثير مجال مغناطيسي غير متجانس (Inhomogeneous magnetic field) على إلكترون المستوي الأرضي للذرات الشبيهة بالهيدروجين. وفيها تم انقسام (Split) حزمة من ذرات الفضة إلى حزمتين.

٢- تأثير زيمان (Zeeman effect)، وتم فيها انقسام مستويات الطاقة بالذرات (وبالتالي الأطياف المصاحبة لها) نتيجة تأثير مجال مغناطيسي.

٣- التركيب الدقيق للمستويات الذرية (Fine structure of atomic levels)، وتم فيها ملاحظة انقسام مستويات الطاقة بالذرات (وبالتالي الأطياف المصاحبة لها) نتيجة تأثير مجالات داخلية.

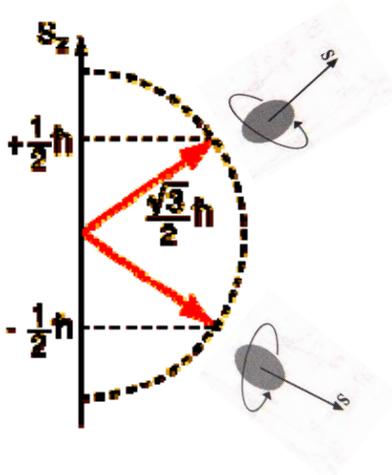
أ- كمية الحركة الزاوية المغزلية لجسيم

Spin Angular Momentum of a Particle

نتيجة لنتائج التجارب العملية السابقة وجد أن أعداد الكم الأساسية (n, l, m_l) غير كافية لشرح الانتقالات الطيفية بالذرات ولهذا تم إضافة العدد الجديد (s, m_s) حيث s ترمز لعدد الكم المغزلي و m_s يرمز للعدد m_s إلى مسقط المؤثر \hat{S}_z على المحور Z . ونعلم أن درجة الانتماء تحكمها المعادلة $d_s = 2s + 1$ ووجد من تجربة شتيرن-جيرلاخ أن $d_s = 2$ وهذا يعطينا $s = \frac{1}{2}$ ومنها $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

وبالتالي نجد أن (وذلك مقارنةً بكمية الحركة الزاوية الدورانية):

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 |s, m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |s, m_s\rangle; \\ \hat{S}_z |s, m_s\rangle &= m_s \hbar |s, m_s\rangle \\ \hat{S}_z^2 |s, m_s\rangle &= m_s^2 \hbar^2 |s, m_s\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2 |s, m_s\rangle\end{aligned}\quad (2.1)$$



شكل 2.1 الحركة الدورانية (المغزلية) لإلكترون يدور حول محوره المار بمركز ثقله والاتجاهان المحتملان لمتجه كمية الحركة الزاوية المغزلية الذاتية S_z .

القيمتان المميزتان $m_s = \pm \frac{1}{2}$ تشيران إلى الاتجاهان المسموحان للدوران المغزلي، أنظر شكل (2.1). وللاختصار فإن $m_s = \frac{1}{2}$ تصف الحركة المغزلية نحو الأعلى (spin up) و $m_s = -\frac{1}{2}$ تصف

الحركة المغزلية نحو الأسفل (spin down (\downarrow)) هذا بالرغم من أن الحركة المغزلية أصلاً لا تأخذ الإتجاه الموجب للمحور Z ولا حتى الإتجاه السالب.

وتمثل الدالة المميزة لكمية الحركة الزاوية المغزلية بعدة أشكال منها مايلي:

$$\chi_{\pm} = |s, m_s\rangle \equiv \begin{cases} \chi_+ \equiv \alpha \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \text{spin up } (\uparrow) \\ \chi_- \equiv \beta \equiv \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \text{spin down } (\downarrow) \end{cases} \quad (2.2)$$

ومن أهم خواص هذه الدوال هما المعيارية والتعامد وتأخذ الشكل (التجميع سوف يستخدم هنا حيث أنهم دوال منفصلة (discrete functions) وليست دوال متصلة (continuous functions)):

$$\sum_{m_s = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |\alpha(m_s)|^2 = \sum_{m_s = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |\beta(m_s)|^2 = 1; \quad (2.3)$$

$$\sum_{m_s = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \beta(m_s)\alpha(m_s) = 0$$

وبالرغم من تعدد أوجه الشبه بين كمية الحركة الزاوية المغزلية للإلكترون وبين كمية الحركة الزاوية المدارية فإنهما يختلفان بشكل جوهري في الآتي:

١- مؤثر كمية الحركة الزاوية المغزلية هو مؤثر كمي ولا يوجد له مثيل في الفيزياء الكلاسيكية، وبالتالي لا يمكن التعبير عنه بدلالة مؤثرات كلاسيكية ميكانيكية مثل مؤثرات المكان و كمية الحركة الخطية (linear momentum). وقد ظهر هذا الافتراض طبيعياً فقط عندما تعامل العالم ديراك نظرياً مع معادلة شرودنجر باستخدام النظرية النسبية (Theory of relativity).

٢- ونتيجةً للحقيقة الأولى فإن القيم المميزة لكمية الحركة الزاوية المغزلية s غير مقيدة بقيم صحيحة فقط (مثل كمية الحركة الزاوية المدارية l) ولكنها تأخذ قيماً موجبة (صحيحة وأيضاً أنصاف قيم صحيحة).

ولنتوقف هنا لحظة لنتعرف على مدى أهمية الحركة المغزلية في دراستنا.

تظهر أهمية الحركة المغزلية بحالتين:

I- عندما نتعامل مع دالة شرودنجر الكلية. ولقد تعاملنا مع دالة شرودنجر لذرة الهيدروجين في الإحداثيات الكروية وكتبناها بالصورة (راجع التعريفات بالباب الخامس في كتابنا الأول):

$$\Psi \equiv \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = |n, l, m_l\rangle$$

ويادماج دالة الحركة المغزلية بدالة شرودنجر نجد أن الدالة الكلية تعرف بالتالي:

$$\Psi_{total} \equiv \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)\chi_{\pm} = R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)\chi_{\pm} = |n, l, m_l, s, m_s\rangle = |n, l, m_l\rangle |s, m_s\rangle \quad (2.4)$$

وتصبح الحالة والتي فيها الأعداد الكمية الثلاثة $|n, l, m_l\rangle$ ماهي إلا حالة خاصة من الحالة العامة بعد أن زادت الأعداد الكمية إلى خمسة $|n, l, m_l, s, m_s\rangle$.

II- عندما نتعامل مع جهد التفاعل (interaction potential) حيث يظهر تفاعل الحركتين المغزلية والدورانية بالإضافة إلى التفاعلات الأخرى الداخلية (مثل التفاعل الكولومي) والخارجية (مثل المجال الكهربائي أو المغناطيسي).

وبكلتا الحالتين سنضطر لاستخدام طرق تقريبية لحل معادلة شرودنجر.

وكما ذكر سابقاً، ونظراً لوجود أوجه الشبه بين كمية الحركة الزاوية الدورانية للإلكترون وكمية الحركة الزاوية المغزلية فإننا نستطيع كتابة علاقات التلازم كالتالي:

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y \right] = i\hbar \hat{S}_z, \quad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z \right] = i\hbar \hat{S}_x, \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x \right] = i\hbar \hat{S}_y \quad (2.5)$$

وباستخدام التعريف العام للمؤثر التصاعدي \hat{S}_+ و التنازلي \hat{S}_- بالصورة:

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad (2.6)$$

نجد أن تأثيرهما على المستويين α و β كالتالي:

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ \alpha = 0; \quad \hat{S}_+ \beta = \hbar \alpha \\ \hat{S}_- \alpha = \hbar \beta; \quad \hat{S}_- \beta = 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

ولتفسير هذه العلاقات فإننا نعلم أنه لا يوجد غير دالتان مميزتان فقط؛ الأولى هي الدالة المميزة α والتي لها أعلى قيمة مميزة $m_s = \frac{1}{2}$ ولا يوجد قيمة أعلى منها و لذلك فإن تأثير \hat{S}_+ على α سوف يفنيها، بمعنى $\hat{S}_+ \alpha = 0$. وبالنسبة للدالة المميزة β والتي لها أقل قيمة مميزة $m_s = -\frac{1}{2}$ ولا يوجد قيمة أقل منها و لذلك فإن تأثير \hat{S}_- على β سوف يفنيها، بمعنى $\hat{S}_- \beta = 0$.

مثال: إثبت أن $\hat{S}_+ \beta = \hbar \alpha$ باستخدام العلاقة العامة:

$$\hat{S}_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle \quad (2.8)$$

الحل:

$$\hat{S}_+ \beta = \hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \left(-\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{1}{2} + 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} + 1 \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \alpha$$

والجدول التالي يعطينا ملخص لبعض نتائج المؤثرات (وقد استخدمنا الوحدات الذرية $\hbar = 1$):

	α	β		α	β
\hat{S}^2	$\frac{3}{4}\alpha$	$\frac{3}{4}\beta$	\hat{S}_y	$\frac{i}{2}\beta$	$-\frac{i}{2}\alpha$
\hat{S}_z	$\frac{1}{2}\alpha$	$-\frac{1}{2}\beta$	\hat{S}_+	0	α
\hat{S}_x	$\frac{1}{2}\beta$	$\frac{1}{2}\alpha$	\hat{S}_-	β	0

مثال: أوجد مستويات الطاقة للجسيم له القيمة $s = \frac{1}{2}$ والهملتونيان:

$$\hat{H} = a(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - 2\hat{S}_z^2) + b\hat{S}_z$$

حيث a و b ثوابت وذلك باستخدام الوحدات الذرية.

الحل: بإعادة كتابة الهملتونيان بالشكل التالي (استخدم $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$):

$$\begin{aligned}\hat{H} &= a(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 - 3\hat{S}_z^2) + b\hat{S}_z \\ &= a\hat{S}^2 - 3a\hat{S}_z^2 + b\hat{S}_z\end{aligned}$$

لنجد أن:

$$\begin{aligned}\hat{H} |s, m_s\rangle &= \{a\hat{S}^2 - 3a\hat{S}_z^2 + b\hat{S}_z\} |s, m_s\rangle \\ &= \{as(s+1) - 3am_s^2 + bm_s\} |s, m_s\rangle \\ &= \left\{\frac{3}{4}a - 3\frac{1}{4}a + bm_s\right\} |s, m_s\rangle = bm_s |s, m_s\rangle\end{aligned}$$

ويضرب المعادلة السابقة من اليسار بالمتجه $\langle s, m_s |$ واستخدام الخاصية المعيارية نجد:

$$\langle s, m_s | \hat{H} |s, m_s\rangle = bm_s \langle s, m_s | s, m_s\rangle = bm_s$$

وحيث أن $m_s = \pm \frac{1}{2}$ فإن مستويات الطاقة للجسيم تكون ثنائية التناظر (Two-fold degenrate).

ب- التمثيل المصفوفي لكمية الحركة الزاوية المغزلية:

Matrix Representation of Spin Angular Momentum

حيث أنه لا يوجد غير دالتين لكمية الحركة الزاوية المغزلية وهما α و β وتمثيلهم المصفوفي كالتالي:

$$\alpha = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

ولذلك فإن أي مصفوفة تمثلهم تتطلب أن تكون ثنائية الأبعاد. وكما أن (x, y, z) هما الأساس لأي متجه r في الإحداثيات الكرتيزية، وبالمثل فإن α و β يكونان الأساس لأي مغزل S (Spinor) في الفراغ المغزلي.

مثال: تحقق من النتائج التالية:

$$\alpha^\dagger \alpha = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 = \beta^\dagger \beta;$$

$$\beta^\dagger \alpha = \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 = \alpha^\dagger \beta$$

مثال: اثبت أن: $\sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, m_s \right| = \mathbf{1}$ حيث $\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ هو مصفوفة الوحدة الثنائية.

الحل:

$$\begin{aligned} \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, m_s \right| &= \beta \beta^\dagger + \alpha \alpha^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1} \end{aligned}$$

مثال: اثبت أن التمثيل المصفوفي للمؤثر \hat{S}_z هو:

$$(\hat{S}_z) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

الحل:

$$\begin{aligned} (\hat{S}_z) &= \begin{matrix} \alpha & \beta \\ \alpha \left(\langle \alpha | \hat{S}_z | \alpha \rangle & \langle \alpha | \hat{S}_z | \beta \rangle \right) \\ \beta \left(\langle \beta | \hat{S}_z | \alpha \rangle & \langle \beta | \hat{S}_z | \beta \rangle \right) \end{matrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \langle \alpha | \alpha \rangle & -\frac{\hbar}{2} \langle \alpha | \beta \rangle \\ \frac{\hbar}{2} \langle \beta | \alpha \rangle & -\frac{\hbar}{2} \langle \beta | \beta \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \times 1 & -\frac{\hbar}{2} \times 0 \\ \frac{\hbar}{2} \times 0 & -\frac{\hbar}{2} \times 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

واجب منزلي: تحقق من التمثيل المصفوفي:

$$(\hat{S}_x) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{S}_y) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

مثال: احسب القيم والدوال المميزة للمؤثر \hat{S}_x

الحل: معادلة القيم المميزة تعرف بالمعادلة:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} -2\lambda/\hbar & 1 \\ 1 & -2\lambda/\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

في الحقيقة هذه صيغة مختصرة لمعادلتين متجانستين في المجهولين a و b و (وبالتأكيد λ أيضاً). ولحساب λ يجب أن نحل معادلة المحدد الصفرية وهي:

$$\begin{vmatrix} -2\lambda/\hbar & 1 \\ 1 & -2\lambda/\hbar \end{vmatrix} = 0$$

ومنها نحصل على المعادلة التي تحدد القيم المميزة:

$$(2\lambda/\hbar)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

ولحساب الدوال المميزة a و b لكل قيمة مميزة: نستخدم القيمة المميزة الأولى $\lambda = \frac{\hbar}{2}$ نجد المعادلة

$$a^2 + b^2 = 1 \text{ وباستخدام شرط المعايير } a = b \text{ تعطي } \begin{pmatrix} -2\lambda/\hbar & 1 \\ 1 & -2\lambda/\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

نجد أن $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ للقيمة المميزة الثانية $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$ نجد المعادلة

$$a^2 + b^2 = 1 \text{ وباستخدام شرط المعايير } a = -b \text{ تعطي } \begin{pmatrix} -2\lambda/\hbar & 1 \\ 1 & -2\lambda/\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

نجد أن $a = -b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ الجدول التالي يحتوى على ملخص للمستويات والقيم المميزة:

القيم المميزة	المستويات المميزة
$\lambda = \frac{\hbar}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$
$\lambda = -\frac{\hbar}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$

واجب منزلي: احسب القيم والدوال المميزة للمؤثرات \hat{S}_y, \hat{S}_z .

ث - مصفوفات باولي (Pauli Matrices)

سيتم هنا تعريف المؤثر في الفراغ المغزلي ذو الثلاثة أبعاد كالتالي:

$$(2.10) \quad S = \frac{\hbar}{2} \sigma = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k})$$

حيث تعرف σ بمصفوفات باولي كالتالي:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

والتي لها الخواص التالية:

$$(2.12) \quad \begin{aligned} \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \\ \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0, \quad i \neq j, \quad (i, j) = (x, y, z) \end{aligned}$$

من المهم هنا أن نوضح الآتي: أنه إذا تواجد الإلكترون في الحالة المغزلية نحو الأعلى (spin up (\uparrow)) دائماً أو الحالة المغزلية نحو الأسفل (spin down (\downarrow)) دائماً فإن القيم المتوقعة

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \langle \hat{S}_y \rangle = 0$$

ولكن

$$\langle \hat{S}_x^2 \rangle = \langle \hat{S}_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

وهذا معناه أنه مهما يكن حالة الإلكترون سواء بالمستوي α أو β فإن مركبتية السينية والصادية لا تولان للصفر أبداً.

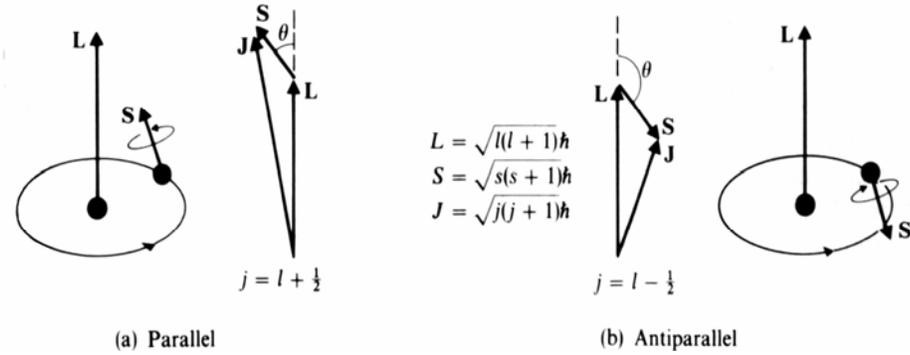
ج- كمية الحركة الزاوية الكلية Total angular momentum

تعرف كمية الحركة الزاوية الكلية، \hat{J} ، لجسيم ما بأنها محصلة الجمع المتجهي لكمية الحركة الزاوية الدورانية \hat{L} وكمية الحركة الزاوية المغزلية \hat{S} (أنظر شكل (2.2)) ويرمز له رياضياً بالمعادلة:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

ونظراً لأن \hat{L} تُمثل في الفراغ (الإحداثي) العادي (ordinary space $\equiv x, y, z$) و \hat{S} تمثل بفراغ آخر وهو الفراغ المغزلي (spin space) فإن المؤثران متلازمان بمعنى أن $[\hat{L}, \hat{S}] = 0$ وبالتالي يصبح لهما نفس الدالة المميزة. ولهذا فإن \hat{J} يحقق علاقات التلازم التالية:

$$(2.13) \quad [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$$



شكل (2.2) الحركة الزاوية الدورانية \hat{L} وكمية الحركة الزاوية المغزلية \hat{S} بالامكان جمعهما إتجاهياً إما (a) متوازيين (Parallel) أو (b) متضادي التوازي (Antiparallel).

وتعرف كمية الحركة الزاوية الكلية لجسيم بعددين كميين، الأول هو العدد الكمي الكلي j والثاني هو العدد الكمي المغناطيسي الكلي m_j بحيث:

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j, m_j\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle, & |\hat{J}| &= \hbar\sqrt{j(j+1)}, \\ \hat{J}_z |j, m_j\rangle &= m_j \hbar |j, m_j\rangle \end{aligned} \quad (2.14)$$

ولإلكترون وحيد بالذرة نجد أن $j = l \pm \frac{1}{2}$. وتأخذ j قيمة موجبة (صحيحة وأيضاً قيم أنصاف صحيحة) وتحدد بالقيم $|l-s|, |l+s-1|, \dots, |l+s|$ ، ولكل قيمة j نجد أن m_j تأخذ القيم $m_j = j, j-1, \dots, -j$. وتكون التعددية (درجة الانتماء) هو $d_j = 2j+1$.

على سبيل المثال: لإلكترون بالمدار الأرضي S، نجد أن $l=0$ و $s=\frac{1}{2}$ و $j=\frac{1}{2}$ وله المسقطان $m_j = \pm \frac{1}{2}$ وبالتالي فإن التعددية تعطي $d_j = 2j+1 = 2$ ولذلك يدعي مدار ثنائي التناظر (two-fold degenerate)، ولإلكترون بالمدار p، نجد أن $l=1$ وبالتالي j تأخذ القيمتين $j = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ و $j = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ وبالتالي فهو مدار سداسي التناظر، ولإلكترون بالمدار d، نجد أن $l=2$ وبالتالي $j = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2}$ و $j = 2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ والتعددية $d_j = 4+6=10$. الجدول التالي يوضح الدوال المرتبطة بالمدارات s, p, d وأعداد الكم الخاصة بها. ونود أن نوضح هنا أنه من السهل أيضاً حساب قيمة التعددية للمدار باستخدام العلاقة $d_j = (2s+1)(2l+1)$ ، حيث أن القيمة المغزلية s تأخذ القيمة $\frac{1}{2}$ دائماً لجسيم وحيد.

المدار	l	j	$ j, m_j\rangle$
s	0	$\frac{1}{2}$	$ \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$
p	1	$\frac{3}{2}$	$ \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle, \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$
		$\frac{1}{2}$	$ \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$
d	2	$\frac{5}{2}$	$ \frac{5}{2}, \pm \frac{5}{2}\rangle, \frac{5}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle, \frac{5}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$
		$\frac{3}{2}$	$ \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle, \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$

والمعادلات التالية ماهي إلا ملخص لخواص المؤثرات الخاصة بكمية الحركة الزاوية الكلية باستخدام الرمز j ، بالتالي، جميع حالات الحركة الدائرية والمغزلية تدمج في شكل واحد.

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_{\pm} &= \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \\
 \hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S} = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_z\hat{S}_z + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+ \\
 [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y \Rightarrow \vec{J} \times \vec{J} = i\hbar\vec{J} \\
 \hat{J}^2 |j, m_j\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle \\
 (2.16) \quad \hat{J}_z |j, m_j\rangle &= m_j\hbar |j, m_j\rangle; \quad \hat{J}_z^2 |j, m_j\rangle = m_j^2\hbar |j, m_j\rangle \\
 \hat{J}_{\pm} |j, m_j\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} |j, m_j \pm 1\rangle \\
 [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hbar\hat{J}_-, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hbar\hat{J}_+ \\
 [\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] &= [\hat{J}^2, \hat{J}_-] = [\hat{J}^2, \hat{J}_x] = [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0,
 \end{aligned}$$

د- التمثيل الاقتراني والتمثيل المنفصل

Coupled and Uncoupled Representation

لقد مثلنا سابقاً دالة شرودنجر العامة بالأعداد الكمية $|l, m_l, s, m_s\rangle$ وقد محينا العدد الكمي n للتبسيط فقط. الأعداد الأربعة $|l, m_l, s, m_s\rangle$ تدعى أعداد جيدة (good quantum numbers)، فلماذا سميت بالأعداد الجيدة؟ لأنها ببساطة تجعل الدالة المميزة تعطينا مصفوفات قطرية للمؤثرات $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ من خلال المعادلات:

$$\begin{aligned}
 \langle l, m_l, s, m_s | \hat{L}^2 | l, m_l, s, m_s \rangle &= l(l+1)\delta_{l,m_l,s,m_s} \\
 \langle l, m_l, s, m_s | \hat{L}_z | l, m_l, s, m_s \rangle &= m_l\delta_{l,m_l,s,m_s} \\
 (2.17) \langle l, m_l, s, m_s | \hat{S}^2 | l, m_l, s, m_s \rangle &= s(s+1)\delta_{l,m_l,s,m_s} \\
 \langle l, m_l, s, m_s | \hat{S}_z | l, m_l, s, m_s \rangle &= m_s\delta_{l,m_l,s,m_s}
 \end{aligned}$$

وكيف نعلم أن هذه المؤثرات يكون لها نفس الدالة المميزة؟ الحل هنا أن نحسب أقواس التلازم الآتية لنجد أن:

$$[\hat{S}^2, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2, \hat{S}_z] = [\hat{L}_z, \hat{S}_z] = [\hat{S}^2, \hat{L}_z] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0 \quad (2.18)$$

وهي مؤثرات متلازمة وبالتالي لها نفس الدالة المميزة وهي $|l, m_l, s, m_s\rangle$.

وهل هذا هو التمثيل الوحيد المسموح به؟ بالطبع لا، فأي أعداد كمية تجعل الدالة تعطينا مصفوفات قطرية فهي أعداد جيدة وتصبح الدالة بالتالي ممثلة تمثيلاً جيداً. لنأخذ على سبيل المثال الدالة $|l, s, j, m_j\rangle$ ، نجد أنها تعطينا مصفوفات قطرية للمؤثرات $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ من خلال المعادلات:

$$\begin{aligned}
 \langle l, s, j, m_j | \hat{L}^2 | l, s, j, m_j \rangle &= l(l+1)\delta_{l,s,j,m_j} \\
 \langle l, s, j, m_j | \hat{S}^2 | l, s, j, m_j \rangle &= s(s+1)\delta_{l,s,j,m_j} \\
 (2.19) \langle l, s, j, m_j | \hat{J}^2 | l, s, j, m_j \rangle &= j(j+1)\delta_{l,s,j,m_j} \\
 \langle l, s, j, m_j | \hat{J}_z | l, s, j, m_j \rangle &= m_j\delta_{l,s,j,m_j}
 \end{aligned}$$

وبالتالي فإن الدالة $|l, s, j, m_j\rangle$ هي دالة جيدة "good or pure state" وتعرف بالتمثيل الاقتراني الدوراني-المغزلي (spin-orbit coupling representation). وتُعرف الدالة $|l, m_l, s, m_s\rangle$ بالتمثيل (المنفصل) الذاتي (uncoupled representation).

مثال: إذا تم تعريف الهملتونيان لإلكترون بذرة الهيدروجين بالصورة:

$$\hat{H}_o = -\left(\frac{1}{2}\nabla_r^2 + \frac{1}{r}\right)$$

فما هي الدالة (أو الدوال) المميزة الجيدة لهذا المؤثر؟

الحل: يجب أن نعلم المؤثرات المتلازمة والغير متلازمة مع المؤثر الهملتوني \hat{H}_o ونجدهم كالتالي:

$$[\hat{H}_o, \hat{L}^2] = [\hat{H}_o, \hat{S}^2] = [\hat{H}_o, \hat{J}^2] = [\hat{H}_o, \hat{J}_z] = 0$$

وحيث أنها مؤثرات متلازمة، بالتالي فإن لهم نفس الدالة المميزة وهي $|l, s, j, m_j\rangle$. و نجد أيضاً أن

$$[\hat{H}_o, \hat{L}^2] = [\hat{H}_o, \hat{S}^2] = [\hat{H}_o, \hat{L}_z] = [\hat{H}_o, \hat{S}_z] = 0$$

بالتالي فإن الدالة $|l, m_l, s, m_s\rangle$ هي أيضاً دالة مميزة للمؤثر الهملتوني \hat{H}_o .

مثال: احسب دوال المستويات الستة في التمثيل المقترن $|j, m_j\rangle$ لإلكترون بالمستوي P بذرة

الهيدروجين بدلالة الدوال المنفصلة $|l, m_l, s, m_s\rangle \equiv |l, s\rangle |m_l, m_s\rangle$.

الحل: بالنسبة لذرة الهيدروجين فإن الدالة الكلية تعرف بالتالي:

$$\Psi_{total} \equiv R_{nl}(r)Y_{l, m_l}(\theta, \varphi)\chi_{\pm} = |n, l, m_l\rangle |s, m_s\rangle = |n, l, m_l, s, m_s\rangle = |n, l, s, j, m_j\rangle$$

حيث $|l = 1, s = \frac{1}{2}, j = 1 \pm \frac{1}{2}, m_j = j, j-1, \dots, -j\rangle$ وتظهر هنا حالتان منفصلتان: الأولى

هي

$$j_{\max} = l + s = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \Rightarrow m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$$

ولها أربعة مستويات متناظرة. والحالة الثانية هي

$$j_{\min} = l - s = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \Rightarrow m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

ولها مستويان متناظران. وللتمييز فقط سنستخدم الدالة $|j, m_j\rangle$ بالصورة $|j, m_j\rangle'$ حتى يتسنى لنا التفرقة بينها وبين الدالة $|m_l, m_s\rangle$.

للحالة الأولى $j_{\max} = \frac{3}{2}$ نبدأ أولاً بأعلى مستوى والذي له القيمة $m_j = \frac{3}{2}$ وهو

$$(2.20) \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle' = Y_{1,1} \alpha = |m_l, m_s\rangle = \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle$$

وباستخدام العلاقة العامة (حيث يمكن تغيير المؤثر \hat{J} بالمؤثر \hat{L} أو \hat{S}).

$$\hat{J}_{\pm} |j, m_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} |j, m_j \pm 1\rangle$$

فإن المعادلة (2.20) تأخذ الشكل:

$$\hat{J}_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle' = (\hat{L}_- + \hat{S}_-) \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.21)$$

الطرف الأيسر للمعادلة (2.21) يعطى:

$$\hat{J}_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle' = \left[\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} - 1 \right) \right]^{1/2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' = \sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' \quad (2.22)$$

والطرف الأيمن للمعادلة (2.21) يعطي (مع ملاحظة أن \hat{L}_- تؤثر على m_l فقط و \hat{S}_- تؤثر على m_s فقط):

$$\begin{aligned} (\hat{L}_- + \hat{S}_-) \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hat{L}_- \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle + \hat{S}_- \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= [1(1+1) - 1(1-1)]^{1/2} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right) \right]^{1/2} \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.23) \\ &= \sqrt{2} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + 1 \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

وبمساواة المعادلتين (2.22) و (2.23) نصل أن المعادلة:

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,0} \alpha + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,1} \beta$$

فماذا تعنى لنا هذه المعادلة؟ تعنى أن الدالة المميزة $|j, m_j\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي (Linear combination) من الدوال المميزة $|l, s\rangle |m_l, m_s\rangle$.

واجب منزلي: استخدم نفس الطريقة السابقة للتحقق من المستويات التالية:

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle' = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 0, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,-1} \alpha + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,0} \beta$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle' = \left| -1, -\frac{1}{2} \right\rangle = Y_{1,-1} \beta$$

وهذه المستويات الأربعة المسموح بها للقيمة $j_{\max} = \frac{3}{2}$ مع ملاحظة أن درجة الإنتماء هي

$$d_{3/2} = 2 \times \frac{3}{2} + 1 = 4.$$

لإيجاد المستويات المسموح بها للقيمة $J_{\min} = \frac{1}{2}$ نبدأ أولاً بأعلى مستوى والذي له القيمة $m_j = \frac{1}{2}$ وهو $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle'$ وسوف نفترض أنه يأخذ الشكل التالي (حيث أننا اخبرنا سابقاً أن الدالة المميزة $|j, m_j\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة $|l, s\rangle |m_l, m_s\rangle$):

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' = c_1 \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + c_2 \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle = c_1 Y_{1,0} \alpha + c_2 Y_{1,1} \beta$$

حيث أن شرط المعايرة يتطلب:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

وشرط التعامد مع الدالة $\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle'$ يتطلب:

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' = \sqrt{\frac{2}{3}} c_1 + \sqrt{\frac{1}{3}} c_2 = 0 \Rightarrow c_2 = -\sqrt{2} c_1$$

ومن شرطي المعايرة و التعامد نجد أن:

$$c_1 = \pm \sqrt{\frac{1}{3}}$$

وأخيراً نصل إلي الشكل النهائي للدالة:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle' = -\sqrt{\frac{1}{3}} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,0} \alpha + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,1} \beta$$

وباستخدام المؤثرات التنازلية نحصل على المستوي الأخير وهو:

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle' = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 0, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,0} \beta - \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,-1} \alpha .$$

من هذا المثال يتضح لنا أن جميع الدوال المميزة $|j, m_j\rangle$ ما هي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة $|l, s\rangle |m_l, m_s\rangle$. وتحسب معاملات التجميع c_i إما باستخدام المؤثرات التصاعدية والتنازلية أو باستخدام المتسلسلة:

$$|j, m_j\rangle' = \sum_{m_l+m_s=m} C_{m_l, m_s, m}^{l, s, j} |l, s\rangle |m_l, m_s\rangle$$

حيث المعامل $C_{m_l, m_s, m}^{l, s, j}$ يسمى معاملات كلبش_جوردن وله خواص مهمة نتناولها بباب آخر. ولنا تعليق مهم هنا وهو أن معاملات كلبش_جوردن سوف تظهر لنا أهميتها عندما نتعامل مع جسيمين أو أكثر. وهذا ناتج من الصعوبة الرياضية لاستخدام المؤثرات التنازلية (أو التصاعدية) مع جسيمين فأكثر.

مثال: إذا تم تعريف مؤثر بالصورة:

$$\hat{H}_{so} = \hat{L} \cdot \hat{S}$$

$$\cdot [\hat{J}_z, \hat{H}_{so}]$$
 احسب

الحل: نستخدم المفكوك التالي:

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z$$

ومنه نجد:

$$\hat{L}_z (\hat{L} \cdot \hat{S}) = \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z^2 \hat{S}_z$$

و

$$\begin{aligned} (\hat{L} \cdot \hat{S}) \hat{L}_z &= \hat{L}_x \hat{S}_x \hat{L}_z + \hat{L}_y \hat{S}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{S}_z \hat{L}_z \\ &= \hat{L}_x \hat{S}_x \hat{L}_z + \hat{L}_y \hat{S}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \hat{S}_z \end{aligned}$$

وقد استخدمنا العلاقة $[\hat{L}_z, \hat{S}_z] = 0$. ويطرح المعادلتين السابقتين نحصل على:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}\hat{S}] &= (\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z)\hat{S}_x + (\hat{L}_z\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_z)\hat{S}_y \\ &= i(\hat{L}_y\hat{S}_x - \hat{L}_x\hat{S}_y) \end{aligned}$$

وينفس الطريقة نجد أن:

$$[\hat{S}_z, \hat{L}\hat{S}] = i(\hat{S}_y\hat{L}_x - \hat{S}_x\hat{L}_y) = -i(\hat{L}_y\hat{S}_x - \hat{L}_x\hat{S}_y)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{H}_{so}] = [\hat{L}_z + \hat{S}_z, \hat{H}_{so}] = 0$$

مثال: إذا تم تعريف مؤثر بالصورة:

$$\hat{H}_{so} = a \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{S}}$$

حيث a ثابت، فما هي الدالة المميزة الجيدة لهذا المؤثر؟

الحل: أولاً يجب أن نعلم المؤثرات المتلازمة والغير متلازمة مع المؤثر $\hat{H}_{so} = a \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{S}}$ ونجدهم كالتالي:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{so}, \hat{L}^2] &= [\hat{H}_{so}, \hat{S}^2] = [\hat{H}_{so}, \hat{J}^2] = [\hat{H}_{so}, \hat{J}_z] = 0, \\ [\hat{H}_{so}, \hat{L}_z] &\neq 0, [\hat{H}_{so}, \hat{S}_z] \neq 0 \end{aligned}$$

وبالتالي فإن الدالة $|l, s, j, m_j\rangle$ هي التي تصلح كدالة مميزة للمؤثر $\hat{H}_{so} = a \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{S}}$.

مثال: احسب القيمة المتوقعة $\langle \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{S}} \rangle$

الحل: وجدنا بالمثال السابق أن الدالة الوحيدة التي نحصل منها على مصفوفة قطرية للمؤثر $\vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{S}}$ هي الدالة $|l, s, j, m_j\rangle$ وهي التي سوف تستخدم لحساب القيمة المتوسطة.

$$\begin{aligned}\vec{L} \cdot \vec{S} |l, s, j, m_j\rangle &= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |l, s, j, m_j\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |l, s, j, m_j\rangle\end{aligned}$$

وباستخدام $s = \frac{1}{2}$ وضرب طرفي المعادلة السابقة من اليسار بالمتجه $\langle l, s, j, m_j |$ نحصل على:

$$\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \langle l, s, j, m_j | \vec{L} \cdot \vec{S} |l, s, j, m_j\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right]$$

وهي قيمة متعددة الطيات (التناظر) تبعاً للعدد j .

تمارين عامة

١- باستخدام العلاقة العامة:

$$\hat{S}_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle$$

تحقق من العلاقات التالية:

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{(3/4) - (1/2)(3/2)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \\ \hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{(3/4) - (-1/2)(1/2)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \alpha \\ \hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{(3/4) - (1/2)(-1/2)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \beta \\ \hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{(3/4) - (-1/2)(-3/2)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \end{aligned}$$

٢- تحقق من أن:

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_x^2 \rangle &= \langle \hat{S}_x^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle \hat{S}^2 \rangle - \langle \hat{S}_z^2 \rangle) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [s(s+1) - m_s^2] = \frac{\hbar^2}{4} \end{aligned}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle s, m_s | \hat{A} | s, m_s \rangle \quad \text{حيث}$$

٣- أوجد مستويات الطاقة لجسيم له القيمة $s = \frac{1}{2}$ و $l = 2$ والهملتونيان:

$$\hat{H} = a + b\hat{L} \cdot \hat{S} + c\hat{L} \cdot \hat{L}$$

حيث a و b و c ثوابت وذلك باستخدام الوحدات الذرية.

الحل: استخدم العلاقة:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= a + \frac{b}{2} \{ \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \} + c\hat{L}^2 = a + \frac{b}{2} \hat{J}^2 + (c - \frac{b}{2})\hat{L}^2 - \frac{b}{2}\hat{S}^2 \\ &= a + \frac{b}{2} J(J+1) + (c - \frac{b}{2})L(L+1) - \frac{b}{2} S(S+1)\end{aligned}$$

بالتالي:

$$J = \frac{5}{2} \Rightarrow E = \langle \hat{H} \rangle = a + b\hbar^2 + 6c\hbar^2,$$

$$J = \frac{3}{2} \Rightarrow E = \langle \hat{H} \rangle = a - \frac{3}{2}b\hbar^2 + 6c\hbar^2$$

٤- تحقق من التمثيل المصفوفي التالي:

$$\begin{aligned}(\hat{S}_x) &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; & (\hat{S}_y) &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; & (\hat{S}_z) &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ (\hat{S}_+) &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; & (\hat{S}_-) &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; & (\hat{S}^2) &= \frac{3}{4}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};\end{aligned}$$

٥- للمتجهين A و B والمتلازمين مع مصفوفات باولي (ليس مهم أن يتلازما مع بعضهما) اثبت أن:

$$a) (\sigma \cdot A)(\sigma \cdot B) = (A \cdot B) + i\sigma \cdot (A \times B)$$

$$b) [\sigma \cdot A, \sigma \cdot B] = 2i\sigma \cdot (A \times B)$$

$$c) (\sigma \cdot \hat{i})^2 = 1$$

٦- إذا عرفنا المؤثر $\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ تأكد من العلاقات التالية

$$\sigma_{\pm}^2, [\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z, [\sigma_{\pm}, \sigma_x] = \pm\sigma_z, [\sigma_{\pm}, \sigma_y] = i\sigma_z, [\sigma_{\pm}, \sigma_z] = \mp\sigma_{\pm}$$

٧- للقيم $j_1 = \frac{1}{2}$ و $j_2 = \frac{1}{2}$ ، اثبت أن دوال التمثيل الترافقي $|j_1 j_2 j m\rangle$ المسموح بها

والتي تعطي بدلالة التمثيل المنفصل $|m_1 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ هي:

$$|j_1 j_2 11\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2,$$

$$|j_1 j_2 10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right],$$

$$|j_1 j_2 1-1\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2,$$

$$|j_1 j_2 00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right],$$

٨- اثبت أن

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \hat{L}_z \hat{S}_z + \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+)$$

٩- لإلكترون بالمدار P تأكد من التمثيل المصفوفي للمؤثر $\hat{L} \cdot \hat{S}$

أ- في حالة التمثيل المنفصل $|m_l, m_s\rangle$

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \hat{L}_z \hat{S}_z + \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+) \text{ [استخدم]}$$

$$(\hat{L} \cdot \hat{S}) = \frac{\hbar^2}{2} \begin{matrix} & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle & \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| 0, -\frac{1}{2} \right\rangle & \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

ب- في حالة التمثيل الترافقي $|j, m_j\rangle$ [استخدم] $\hat{L}\hat{S} = \frac{1}{2}\{\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2\}$

$$(\hat{L}\hat{S}) = \frac{\hbar^2}{2} \begin{matrix} & \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right| & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right| & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right| & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right| & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{matrix}$$

ملحق (2.A)

الرموز الطيفية

Spectroscopic Notation

عرفت المستويات الذرية بأعداد كم مختلفة منها على سبيل المثال:

- ١- العدد الكمي الرئيسي (n): وهو الذي يحدد المستوى الذي يقع فيه الإلكترون في الذرة وأيضاً يحدد طاقة المستوى وبعده عن النواة. ونرمز للمستويات الذرية بحروف لاتينية كبيرة كالتالي:

n	1	2	3	4
المستوى	K	L	M	N

- ٢- العدد الكمي المداري (l): ومنها نحدد قيم المدارات الفرعية في المستوى الأساسي (n) من ٠ إلى $n-1$.

l	0	1	2	3
المستوى الإلكتروني	s	p	d	f
المستوى الذري	S	P	D	F

- ٣- العدد الكمي المداري المغناطيسي (m_l): ويحدد هذا العدد اتجاهات المدارات في

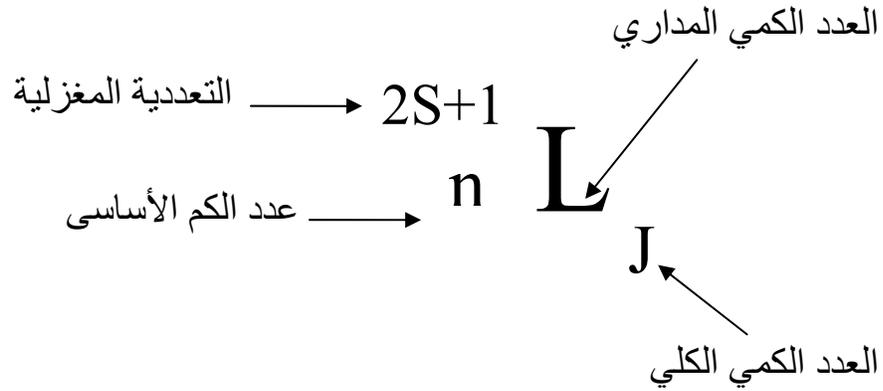
$$m_l = 2l + 1 \text{ ويعطى بالعلاقة}$$

- ٤- العدد الكمي المغزلي المغناطيسي (m_s): ويحدد هذا العدد اتجاهات المدارات في الفراغ

$$m_s = 2s + 1 \text{ ويعطى بالعلاقة}$$

- ٥- العدد الكمي الكلي (J).

بالرغم من أن رموز المستوى الذري ما هي إلا الحروف الكبيرة لرموز المستوى الإلكتروني إلا أنها تستخدم في تعريف الرمز الطيفي بالشكل:



والجدول التالي يوضح الرموز الطيفية لإلكترون بمدارات المستوي $n = 2$.

المدار	l	j	$ j, m_j\rangle$	الرمز الطيفي
s	0	$\frac{1}{2}$	$ \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$	$2^2S_{\frac{1}{2}}$
p	1	$\frac{3}{2}$	$ \frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle, \frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$	$2^2P_{\frac{3}{2}}$
		$\frac{1}{2}$	$ \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$	$2^2P_{\frac{1}{2}}$

ملحق (2.B)

معاملات كلبش_جوردن

Clebsch-Gordan coefficients

لقد وجد بالأمثلة أن جميع الدوال المميزة المقترنة $|j_1 j_2; JM_j\rangle$ ماهي إلا تجميع خطي من الدوال المميزة المنفصلة $|j_1, m_{j_1}\rangle |j_2, m_{j_2}\rangle$ ، مع وجود الشرط $M_j = m_{j_1} + m_{j_2}$. وقد تم حساب معاملات التجميع c_i باستخدام المؤثرات التصاعدية والتنازلية. وفي هذا الملحق سوف نتناول طريقة أخرى لحساب المعاملات c_i باستخدام المتسلسلة:

$$|j_1 j_2; JM_j\rangle = \sum_{m_{j_1}} \sum_{m_{j_2}} C_{m_{j_1}, m_{j_2}} |j_1, m_{j_1}\rangle |j_2, m_{j_2}\rangle \quad (2.B.1)$$

حيث المعاملات $C_{m_{j_1}, m_{j_2}}$ تسمى معاملات كلبش_جوردن. طريقة حساب المعاملات $C_{m_{j_1}, m_{j_2}}$ وخواصها تحتاج لتفاصيل عديدة بعيدة عن مستوي هذا الكتاب، لذا سوف نعرض جداول لبعض القيم الخاصة التي تفيدنا في دراستنا.

		$ J, M_j\rangle$			
m_{j_1}	m_{j_2}	$ 1, 1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 0, 0\rangle$	$ 1, -1\rangle$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	0	1

جدول (2.B.1) معاملات كلبش_جوردن $C_{m_{j_1}, m_{j_2}}$ للقيم $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$.

مثال: افترض فقط الحركة المغزلية لإلكترونان، استخدم الجدول ١- لحساب الدالة المقترنة $|s_1, s_2; S, M_S\rangle \equiv |S, M_S\rangle \equiv |1, 0\rangle$ وللاختصار سوف نستخدم $|s_1, s_2; S, M_S\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 0\right\rangle$.
 الحل: الدالة المترافقة $|1, 0\rangle$ نجد أنها تتكون من التجميع الخطي (انظر الجدول ١-) للدوال $\alpha_2\beta_1$ و $\alpha_1\beta_2$ حيث أن $M_S = m_{s_1} + m_{s_2} = 0$ لكل منهما. بالتالي نحن نتوقع الصورة العام للدالة $|1, 0\rangle$ بالشكل:

$$|1, 0\rangle = C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \alpha_1\beta_2 + C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \alpha_2\beta_1 \quad (2.B.2)$$

ومن الجدول السابق (بالنظر رأسياً بالعمود الرابع) نجد أن:

$$C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad (2.B.3)$$

ومنهم نجد:

$$|1, 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2) \quad (2.B.4)$$

واجب منزلي: افترض فقط الحركة المغزلية لإلكترونان، استخدم الجدول ١- للتأكد من أن:

$$|1, 1\rangle = \alpha_1\alpha_2 \quad (2.B.5a)$$

$$|1, -1\rangle = \beta_1\beta_2 \quad (2.B.5b)$$

$$|0, 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) \quad (2.B.5c)$$

مثال: تحقق من أن الدالة $|0, 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$ لها القيمة $M_S = 0$.

الحل: للتحقق من أن الدالة $\sqrt{\frac{1}{2}} (\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$ لها القيمة $m_s = 0$ يجب أن نسترجع معادلة

القيم المميزة $\hat{S}_z \psi = m_s \psi$ ، لذلك يجب أن نؤثر على الدالة $|0, 0\rangle$ بالموثر \hat{S}_z كالتالي:

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \sqrt{\frac{1}{2}}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) &= \sqrt{\frac{1}{2}}(\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2}}(\beta_2\hat{S}_{1z}\alpha_1 - \alpha_2\hat{S}_{1z}\beta_1 + \alpha_1\hat{S}_{2z}\beta_2 - \beta_1\hat{S}_{2z}\alpha_2) \\ &= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\beta_2\alpha_1 + \frac{1}{2}\alpha_2\beta_1 - \frac{1}{2}\alpha_1\beta_2 - \frac{1}{2}\beta_1\alpha_2\right) = 0\end{aligned}$$

وهو المطلوب إثباته. لاحظ هنا أن المؤثر \hat{S}_{iz} قد أثر على الإلكترون i فقط.

واجب منزلي: تحقق من أن الدالة $\sqrt{\frac{1}{2}}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$ لها القيمة $S = 0$. مع ملاحظة أن:

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \\ &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\left[\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} + \frac{1}{2}(\hat{S}_{+1}\hat{S}_{-2} + \hat{S}_{-1}\hat{S}_{+2})\right]\end{aligned}$$

واجب منزلي: تحقق من أن الدالة $\sqrt{\frac{1}{2}}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2)$ لها القيم $M_s = 0$ و $S = 1$.

ملحوظة: استخدمنا الجدول (2.B.1) لحساب الدوال المقترنة $|j_1 j_2; jm_j\rangle$ بدلالة الدوال المنفصلة

$|j_1, m_{j_1}\rangle |j_2, m_{j_2}\rangle$. الجدول (2.B.1) يُمكننا من حساب الدوال المنفصلة $|j_1, m_{j_1}\rangle |j_2, m_{j_2}\rangle$

بدلالة الدوال المقترنة $|j_1 j_2; jm_j\rangle$. على سبيل المثال من الجدول (2.B.1) نجد أن:

$$\begin{aligned}\alpha_1\beta_2 &= \sqrt{\frac{1}{2}}(|1, 0\rangle + |0, 0\rangle) \\ \beta_1\alpha_2 &= \sqrt{\frac{1}{2}}(|1, 0\rangle - |0, 0\rangle)\end{aligned}\tag{2.B.6}$$

المعادلتان (2.B.6) يمكن التأكد منهما بطرح وجمع كل من المعادلتان (2.B.4) و (2.B.5c).

واجب منزلي: تحقق من قيم الجدول التالي باستخدام المؤثرات التصاعدية والتنازلية.

		$ J, M_J\rangle$					
m_{j_1}	m_{j_2}	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$
1	$\frac{1}{2}$	1	•	•	•	•	•
1	$-\frac{1}{2}$	•	$\frac{\sqrt{1}}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	•	•	•
•	$\frac{1}{2}$	•	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	$-\frac{\sqrt{1}}{\sqrt{3}}$	•	•	•
•	$-\frac{1}{2}$	•	•	•	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{1}}{\sqrt{3}}$	•
-1	$\frac{1}{2}$	•	•	•	$\frac{\sqrt{1}}{\sqrt{3}}$	$-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	•
-1	$-\frac{1}{2}$	•	•	•	•	•	1

جدول (2.B.2) معاملات كلبيش-جوردن $C_{m_{j_1}, m_{j_2}}$ للقيم $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$.

طرق تقريبية لحل مسائل ميكانيكا الكم

Approximative methods in solving quantum mechanics problems

لقد تم سابقاً معالجة و حل معظم المسائل الفيزيائية (مثل المتذبذب التوافقي, ذرة الهيدروجين وجسيم بداخل مربع أو مستطيل جهد) حلاً كاملاً. هذه المسائل لها الهملتونيان البسيط والخاص بها وبالتالي استطعنا حل معادلات شرودنجر وحصلنا على طاقة المستويات ودوالها المميزة. وفي الحقيقة أنه توجد أنظمة فيزيائية أخرى مهمة ولا يكون لها حلاً متكاملاً. وذلك ناشئ من تعقد معادلة شرودنجر نظراً لوجود حد الجهد فيها. مثال لهذه النظم: ذرة الهليوم أو ذرة الهيدروجين في مجال كهربي أو مغناطيسي أو كلاهما معاً. ولحل هذه المسائل يجب أن نلجأ إلي طرق تقريبية مختلفة، وأهم وأبسط نظريتين هما:

١- نظرية التغيرات (Variational theory) ونظرية التغيرات الخطية

(Linear variational theory) .

٢- نظرية الاضطراب) Perturbation theory (للمستويات المنفردة (nondegenerate states)

والمتناظرة (degenerate states) والتي أيضاً لا تعتمد على الزمن (Time independent) .

٣- نظرية الاضطراب المعتمدة على الزمن) Time dependent perturbation theory (.

الباب الثالث

نظرية التغيرات

Variational theory

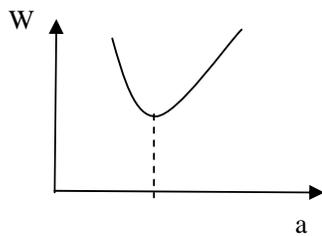
نظرية التغيرات هي طريقة بسيطة لحساب قيم الطاقة للمستويات المختلفة (أهمهم طاقة المستوى الأرضي لما لها من أهمية قصوى لأي نظام فيزيائي أو كيميائي) ومقارنتها بالقيم العملية. ويتم ذلك عن طريق تخمين دالة تجريبية (لها بعض الشروط) واختبارها لنظام فيزيائي معقد. لنفترض مثلاً أننا نود أن نحسب طاقة المستوى الأرضي المميزة E_1 لنظام فيزيائي يوصف بالهاملتونيان \hat{H} ، ولكننا لا نستطيع حل معادلة شرودنجر (الغير معتمدة على الزمن) لصعوبتها، فما هي الطريقة المثلى؟ وقبل أن نتعرف على الوصفة لهذه الطريقة نود أن نوجه النظر إلى حقيقة مهمة وهي أن نظرية التغيرات تبني على مبدأ مهم (سوف نثبته مؤخراً) وهو أنه لأي دالة اختيارية معايرة ϕ (مهما تكن هذه الدالة) فإن الطاقة المتوسطة المحسوبة لهذه الدالة تعطي قيمة أعلى من (أو تتساوي مع) طاقة المستوى الأرضي المميزة وتمثل بالمعادلة:

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \geq E_1 \quad (3.1)$$

ولتطبيق نظرية التغيرات نتبع الخطوات التالية:

١- اختيار (تخمين) دالة تجريبية معيرة $[\phi(a, b, \dots)]$ تحتوى على عدد من المتغيرات المجهولة (a, b, \dots) . هذه الدالة يفترض أن تعبر عن الدالة الحقيقية (من حيث التماثل وتحقيق الشروط الحدودية.... الخ).

٢- تحسب القيمة المتوسطة للطاقة المطلوبة و المرتبطة بالهاملتونيان \hat{H} عن طريق استخدام العلاقة



$$W(a, b, \dots) = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \quad (3.2)$$

٣- لحساب وإيجاد القيمة المثالية (optimum value) للمتغيرات (a, b, \dots) نتبع طريقتين: الطريقة الأولى تأتي برسم المعادلة (3.2) لكل متغير على حدة (مثل a كما بالرسم) واختيار أقل قيمة للطاقة W_{\min} من الرسم. ولكن هذه الطريقة ليست عملية

تماماً لذلك نلجأ للطريقة الثانية وهي أن نفاضل المعادلة (3.2) جزئياً بالنسبة لكل متغير على حدة ثم نجد قيمهم المثالية التي تحقق الشرط:

$$\frac{\partial W}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial b} = 0, \quad \dots \quad (3.3)$$

وذلك عند النهايات الصغرى (Lower limits).

٤- باستخدام القيم المثالية للمتغيرات بالخطوة السابقة والتعويض بها بالمعادلة (3.2) نحصل على القيمة المثلى للطاقة W_{\min} والمفترض أن تكون قريبة من القيمة العملية (المطلوبة).

ملاحظه: في حالة كون الدالة غير معايرة فإن مبدأ التغيرات يطبق على التكامل:

$$W = \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} \quad (3.4)$$

نظرية: لأي دالة اختيارية معايرة φ (مهما تكن هذه الدالة) فإن الطاقة المتوسطة المحسوبة لهذه الدالة تعطي قيمة أعلى من (أو تتساوي مع) طاقة المستوى الأرضي المميزة.

الإثبات: لإثبات هذه النظرية سنفترض أنه يوجد لدينا نظاماً فيزيائياً (بسيطاً أو معقداً) والمؤثر الهاملتوني \hat{H} الخاص به معروف وله فئة لانتهائية من مستويات الطاقة المميزة $\{E_i\}$ بحيث أن $E_1 < E_2 < \dots < E_n < \dots$ والدوال المميزة $\{\psi_i\}$ (المعايرة و المتعامدة) التابعة لهذه المستويات بحيث أن

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (3.5)$$

وعليه فإن معادلة شرودنجر (التي لا تعتمد على الزمن) تحكمها المعادلة التالية:

$$\hat{H} | \psi_i \rangle = E_i | \psi_i \rangle \quad (3.6)$$

والطاقة المميزة:

$$E_i = \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_i \rangle \quad (3.7)$$

ويجب أن نتذكر هنا أننا لا نستطيع غالباً حساب القيم E_i لأننا لا نعرف الدوال المميزة $\{\psi_i\}$ والمرتبطة بالموثر الهملتوني \hat{H} ولهذا سوف نفترض دالة φ مرتبطة بالموثر الهملتوني \hat{H} ولا يشترط لها أن تمثل دالة موجية معينة عدا أنها تحقق شروط الدالة المميزة كونها أحادية القيمة ومستمرة ومعايرة وفق الشرط:

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = 1 \quad (3.8)$$

ومن مبدأ التغاير الذي يشكل أساس طريقة التغاير نعرف القيمة المتوقعة للطاقة بالتكامل

$$W = \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle \quad (3.9)$$

وسوف نختار الدالة φ كمفكوك بالدوال المميزة $\{\psi_i\}$ بالصورة:

$$|\varphi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle \quad (3.10)$$

حيث a_i ثوابت. وباستعمال المعادلة (3.1) نجد أن

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \sum_{i,j} \langle \psi_j | a_j^* a_i | \psi_i \rangle = \sum_{i,j} a_j^* a_i \delta_{ij} = \sum_i |a_i|^2 = 1, \\ W &= \langle \varphi | E_i | \varphi \rangle = \sum_i |a_i|^2 E_i \end{aligned} \quad (3.11)$$

ونعلم أن طاقة المستوى الأرضي يعطي بالعلاقة:

$$E_1 = \sum_i |a_i|^2 E_i \quad (3.12)$$

ومنه نجد أن القيمة

$$W - E_1 = \sum_i \underbrace{|a_i|^2}_{\text{positive}} \underbrace{(E_i - E_1)}_{E_i > E_1} \quad (3.13)$$

ماهي إلكمية موجبة، وبالتالي $W \geq E_1$. وهذا يعنى أن الدالة المقترحة تعطينا قيمة عليا للطاقة (بمعنى أنها أكبر من الطاقة المميزة). وتكون القيمة المتوقعة للطاقة W مساوية للطاقة المميزة

E_1 في حالة كون جميع الثوابت a_i مساوية للصفر ماعدا a_1 وبمعنى آخر حينما يتحقق الشرط $\cdot \varphi = \psi_1$

مثال ٣,١ : احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين باستخدام طريقة التغير للدالة الاختيارية $\varphi_{1s}(r) = Ne^{-ar}$ حيث a متغير اختياري و N ثابت المعيارية. مع ملاحظة أنه باستخدام الوحدات الذرية (انظر الملحق A) يكتب الهملتونيان بالصيغة التالية:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 - \frac{1}{r}$$

$$\cdot \nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \quad \text{حيث}$$

الحل: دعونا أولاً نحسب ثابت المعيارية N في الإحداثيات الكروية (r, θ, φ) باستخدام شرط المعيارية (مع ملاحظة أن $dr = r^2 \sin \theta d\theta d\varphi$):

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{1s} | \varphi_{1s} \rangle &= \int |\varphi_{1s}(r)|^2 dr \\ &= N^2 \underbrace{\int_0^\infty r^2 e^{-2ar} dr}_{\frac{1}{4a^2}} \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta}_{2} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \end{aligned}$$

وباستخدام التكامل القياسي $(\int_0^\infty r^2 e^{-br} dr = \frac{2}{b^3})$. وبمساواة المعادلة السابقة بالواحد نجد أن:

$$4\pi |N|^2 \frac{1}{4a^3} = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$$

ولحساب قيمة التكامل $W = \langle \varphi_{1s} | \hat{H} | \varphi_{1s} \rangle$ نعلم أن:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\varphi_{1s} &= -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\varphi_{1s}}{\partial r}\right]-\frac{\varphi_{1s}}{r} \\
 &= -\frac{a^{3/2}}{2\sqrt{\pi}}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2(-ae^{-ar})\right]-\frac{\varphi_{1s}}{r} \\
 &= \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{a}{r^2}(2r-r^2a)-\frac{1}{r}\right]e^{-ar} \\
 &= \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{a-1}{r}-\frac{a^2}{2}\right]e^{-ar}
 \end{aligned}$$

ومنه نجد (حيث أن التكامل على الزوايا يعطي 4π):

$$\begin{aligned}
 W &= 4\pi\int_0^\infty\varphi_{1s}^*\hat{H}\varphi_{1s}r^2dr = 4a^3\int_0^\infty\left[\frac{a-1}{r}-\frac{a^2}{2}\right]e^{-2ar}r^2dr \\
 &= 4a^3\left[(a-1)\frac{1!}{(2a)^2}-\frac{a^2}{2}\frac{2!}{(2a)^3}\right] = \frac{a^2}{2}-a
 \end{aligned}$$

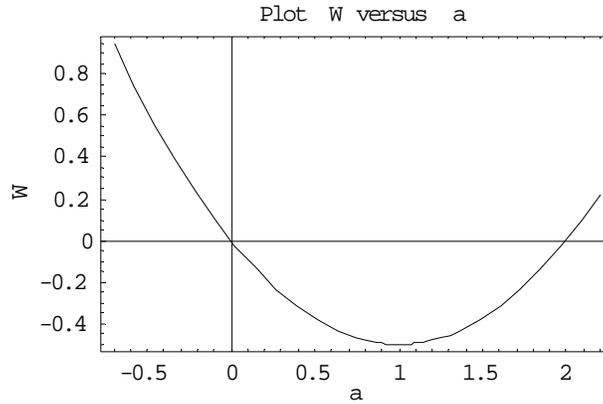
وبالتالي لحساب القيمة المثلى للمتغير a نستخدم التفاضل:

$$\frac{\partial W}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\left[\frac{a^2}{2}-a\right] = a-1=0 \quad \Rightarrow \quad a=1$$

ولإيجاد طاقة أدنى مستوى نعوض بقيمة $a=1$ بالمعادلة

$$E_1 = W_{\min} = \frac{a^2}{2}-a = \frac{1}{2}-1 = -\frac{1}{2} \text{ Hartree}$$

نلاحظ هنا أن القيمة المحسوبة E_1 مساوية تماماً مع القيمة الحقيقية لهذا المستوى. السبب في ذلك يعود إلى أننا استخدمنا الدالة المميزة الحقيقية للمستوى الأرضي لذرة الهيدروجين في حساباتنا. والآن لتتأكد من صحة الحسابات دعنا نرسم هذه الطاقة كدالة في المتغير a لنرى أين تقع القيمة الصغرى والتي هي القيمة المثلى (optimum value). من الواضح بالرسم الأسفل أن القيمة $a=1$ (بالوحدات الذرية) هي القيمة المثلى والتي تعطي أصغر قيمة للطاقة (كما أثبتنا رياضياً).



البرنامج التالي كتب باستخدام البرنامج ماثيماتكا لحساب قيم الطاقة بواسطة طريقة التغيرات. يمكن تنفيذ البرنامج للتأكد من الحسابات. وأيضاً بالإمكان تغيير شكل الدالة $\{\psi_i\}$ لحساب قيم الطاقة المصاحبة لها.

$$Y1 = N \tilde{a}^{-ra}$$

$$aa = \text{Integrate}[Y1^2, \{r, 0, \infty\}, \text{Assumptions} \rightarrow a > 0]$$

$$\text{solve} = \text{Solve}[aa == 1, N]$$

calculate the normalization constant *

$$HY1 = \frac{1}{2r^2} \int_r Y1^2 \int_r Y1^2 \text{Simplify}$$

$$W = \text{Integrate}[Y1^2 HY1, \{r, 0, \infty\}, \text{Assumptions} \rightarrow a > 0]$$

$$\text{select} = \text{Solve}[W == 0, a]$$

$$b = a \text{ . select}$$

$$W \text{ . b}$$

مثال ٢, ٣ : باستخدام طريقة التغيرات للدالة الاختيارية $\varphi(x) = xe^{-ax}$ حيث a متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لجسيم يتحرك في مجال جهد معرف كالتالي:

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

الحل: حيث أن الجهد يؤول إلى ما لانهاية عندما $x < 0$ فإن الدالة المختارة تأخذ الشكل:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ xe^{-ax} & x > 0 \end{cases}$$

وهذه الدالة غير معاييرة ولهذا نحسب:

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \int_0^{\infty} x^2 e^{-2ax} dx = \frac{1}{4a^3};$$

ونعلم أن الهملتونيان لجسيم يتحرك في مجال الجهد $V(x)$ هو $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + x$ ولذلك:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle &= \langle \varphi | -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + x | \varphi \rangle \\ &= \int_0^{\infty} xe^{-ax} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + x \right\} xe^{-ax} dx \\ &= \int_0^{\infty} xe^{-ax} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} ae^{-ax}(ax-2) + x^2 e^{-ax} \right\} dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{\infty} a^2 xe^{-2ax}(ax-2) dx + \int_0^{\infty} x^3 e^{-2ax} dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4a} + \frac{3}{8a^4} \end{aligned}$$

وبالتالي:

$$W(a) = \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{3}{2a}$$

وباستخدام العلاقة $\frac{\partial W(a)}{\partial a} = 0$ نجد أن قيمة a المثلى هي $\left(\frac{3m}{2\hbar^2}\right)^{1/3}$ والطاقة المثالية هي:

$$\cdot W_{\min} = \frac{\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{3}{2a} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3m}{2\hbar^2} \right)^{2/3} + \frac{3}{2} \left(\frac{2\hbar^2}{3m} \right)^{1/3} = \frac{9}{4} \left(\frac{2\hbar^2}{3m} \right)^{1/3} = \frac{3}{2} \left(\frac{9\hbar^2}{4m} \right)^{1/3}$$

مثال ٣,٣ : احسب طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي الخطي باستخدام طريقة التغير للدالة الاختيارية:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \cos(ax) & -\frac{\pi}{2a} \leq x \leq \frac{\pi}{2a} \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

حيث a متغير اختياري والهملتونيان يعرف بالمعادلة $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$ ، حيث

$$\cdot k = m\omega^2$$

الحل: لحساب القيمة $W(a) = \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$ نبدأ أولاً بحساب المقام وهو:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos^2(ax) dx = \left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4a} \sin(2ax) \right]_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \\ &= \frac{\pi}{4a} - \frac{1}{4a} \sin(\pi) - \left(-\frac{\pi}{4a} \right) - \frac{1}{4a} \sin(-\pi) \\ &= \frac{\pi}{4a} + \frac{\pi}{4a} = \frac{\pi}{2a} \end{aligned}$$

والبسطة بحسب كالتالي:

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle &= \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos(ax) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right\} \cos(ax) dx \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos(ax) \underbrace{\frac{d^2}{dx^2} \cos(ax)}_{-\cos(ax)} dx + \frac{1}{2} k \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} x^2 \cos^2(ax) dx \\
 &= \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \cos^2(ax) dx + \frac{1}{2} k \underbrace{\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} x^2 \cos^2(ax) dx}_{I_2} \\
 &= \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right) + I_2
 \end{aligned}$$

واجب منزلي: احسب القيمة I_2 وأثبت أن:

$$I_2 = \frac{1}{2} k \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} x^2 \cos^2(ax) dx = \frac{k}{a^3} \left[\frac{\pi^3}{48} - \frac{\pi}{8} \right]$$

ومنه نجد:

$$\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right) + \frac{k}{a^3} \left[\frac{\pi^3}{48} - \frac{\pi}{8} \right] = \frac{\pi \hbar^2 a}{4m} + \frac{\pi k}{8a^3} \left[\frac{\pi^2}{6} - 1 \right]$$

وبالتالي:

$$W(a) = \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{\frac{\pi \hbar^2 a}{4m} + \frac{\pi k}{8a^3} \left[\frac{\pi^2}{6} - 1 \right]}{\frac{\pi}{2a}} = \frac{\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{k}{4a^2} \left[\frac{\pi^2}{6} - 1 \right]$$

وباستخدام العلاقة التفاضلية $\frac{\partial W(a)}{\partial a}$ نجد:

$$\frac{\partial W(a)}{\partial a} = \frac{\hbar^2 a}{m} - \frac{k}{2a^3} \left[\frac{\pi^2}{6} - 1 \right]$$

ومساواة القيمة السابقة بالصفر نجد أن قيمة a المثلى هي:

$$a = \left\{ \left(\frac{mk}{\hbar^2} \right) \left[\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{1/4}$$

والطاقة المقابلة لها هي:

$$\begin{aligned} W_{\min} &= \frac{\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{k}{a^2} \left[\frac{\pi^2}{24} - \frac{1}{4} \right] \\ &= \frac{\hbar^2 \left\{ \left(\frac{mk}{\hbar^2} \right) \left[\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{1/2}}{2m} + \frac{k \left[\frac{\pi^2}{24} - \frac{1}{4} \right]}{\left\{ \left(\frac{mk}{\hbar^2} \right) \left[\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{1/2}} \\ &= \frac{A}{2} \hbar \omega + \frac{B}{A} \hbar \omega \end{aligned}$$

و

$$A = \left[\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right]^{1/2} = 0.56786, \quad B = \left[\frac{\pi^2}{24} - \frac{1}{4} \right] = 0.16123,$$

ومنها نحصل على الطاقة المثلي:

$$E_o = W_{\min} = \frac{0.56786}{2} \hbar \omega + \frac{0.16123}{0.56786} \hbar \omega = 0.56786 \hbar \omega = 1.1357 \left(\frac{1}{2} \hbar \omega \right)$$

وهي ١٤ % أكبر من القيمة الحقيقية.

ولرسم الدالة المفترضة $\varphi(x)$ في المدى المعرف $\{-\pi/2, \pi/2\}$ ومقارنتها بالدالة الحقيقية:

$$\psi_o(x) = \left(\frac{b}{\pi} \right)^{1/4} e^{-bx^2/2}, \quad b = \frac{m\omega}{\hbar}$$

يجب أن نعرف الدالة المفترضة والمعييرة بالشكل:

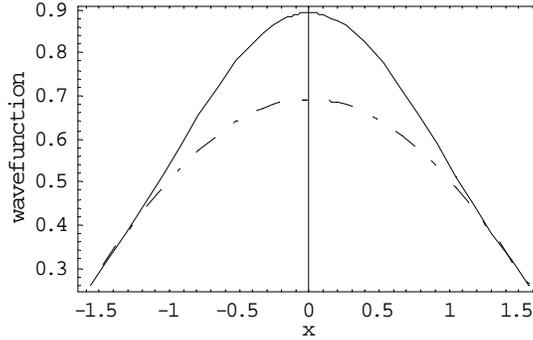
$$\varphi(x) = \begin{cases} N \cos(ax) & -\frac{\pi}{2a} \leq x \leq \frac{\pi}{2a} \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

حيث N هو ثابت المعيارية ومن السهل حسابه (يترك كواجب منزلي) وهو $N = \sqrt{\frac{2a}{\pi}}$ و a قد
حسبت سابقاً وتعطي بالعلاقة:

$$a = \left\{ \left(\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right) \left[\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{1/4} = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \left[\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right]^{1/4} = 0.7536\sqrt{b}$$

وللتبسيط بالرسم سوف نستخدم $b=1$.

والرسم التالي يوضح مدى الفرق بين الدالتين وخصوصاً في المنتصف حول $x=0$. المنحني ذو
الخط المتصل يعبر عن الدالة الحقيقية $\psi_0(x)$ والمنحني المتقطع يعبر عن الدالة المفترضة
 $\varphi(x)$.



نظرية التغيرات الخطية (Linear variational method)

سوف نفترض هنا أن الدالة التجريبية المقترحة φ هي عبارة عن جمع خطي (Linear combination) لبعض الدوال الاختيارية ψ_i المحددة والمعروفة والتي لا يشترط لها أن تكون معيرة أو متعامدة. ولسهولة الإيضاح سوف نستخدم دالة تجريبية بسيطة مثل:

$$\varphi(a_1, a_2) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \quad (3.14)$$

حيث a_n متغيرات اختيارية. ولحساب التكامل $W = \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$ ، نجد أن

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \langle a_1\psi_1 + a_2\psi_2 | a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \rangle \\ &= a_1a_1^*S_{11} + a_2a_2^*S_{22} + a_1^*a_2S_{12} + a_2^*a_1S_{21} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle &= \langle a_1\psi_1 + a_2\psi_2 | \hat{H} | a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \rangle \\ &= a_1a_1^*H_{11} + a_2a_2^*H_{22} + a_1^*a_2H_{12} + a_2^*a_1H_{21} \end{aligned}$$

حيث استخدمنا الرموز:

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle = H_{ji}; \\ S_{ij} &= \langle \psi_i | \psi_j \rangle = S_{ji} \end{aligned}$$

والآن نستخدم المعادلة التي تحتوي W على الصورة:

$$\begin{aligned} a_1a_1^*H_{11} + a_2a_2^*H_{22} + a_1^*a_2H_{12} + a_2^*a_1H_{21} \\ = W(a_1a_1^*S_{11} + a_2a_2^*S_{22} + a_1^*a_2S_{12} + a_2^*a_1S_{21}) \end{aligned} \quad (3.15)$$

وللحصول على القيمة الدنيا للطاقة W نستخدم التفاضل $\frac{\partial W}{\partial a_1^*} = 0$, $\frac{\partial W}{\partial a_2^*} = 0$ ، فنحصل على

المعادلتين الأتيتين:

$$\begin{aligned} (H_{11} - WS_{11})a_1 + (H_{12} - WS_{12})a_2 &= 0 \\ (H_{21} - WS_{21})a_1 + (H_{22} - WS_{22})a_2 &= 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

وهما زوج من المعادلات الجبرية الخطية في المتغيرات a_1 و a_2 . وتبعاً لنظرية المعادلات الجبرية الخطية فإنه يوجد حل غير صفري، (بمعنى أنه غير الحل $a_1 = a_2 = 0$) إذا ساوينا محدد المعاملات بالصفر، بمعنى أن:

$$\begin{vmatrix} (H_{11} - WS_{11}) & (H_{12} - WS_{12}) \\ (H_{21} - WS_{21}) & (H_{22} - WS_{22}) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.17)$$

ومنها نحصل على معادلة من الدرجة الثانية في W . وهذا يعني أن الحل النهائي سوف يعطينا جذرين أو قيمتين للطاقة وبناء على مبدأ التغيرات فإننا سنختار الجذر الأدنى قيمة لتمثيل طاقة المستوى الأرضي للنظام، أو على الأقل الحد الأعلى لطاقة المستوى الأرضي. الجذر الثاني للمعادلة يعطي الحد الأعلى لطاقة المستوى المثار الأول (وهو عموماً ليس بالدقة المطلوبة).

للحالة العامة والتي تتكون فيها الدالة تجريبية بالشكل العام:

$$\varphi(a_1, a_2, \dots) = \sum_{n=1}^N a_n \psi_n \quad (3.18)$$

ونتيجة للشروط:

$$\frac{\partial W}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

سنحصل على N من المعادلات الجبرية الخطية ومنها نحصل على المحدد العام

$$\begin{vmatrix} H_{11} - WS_{11} & H_{12} - WS_{12} & \dots & H_{1N} - WS_{1N} \\ H_{21} - WS_{21} & H_{22} - WS_{22} & \dots & H_{2N} - WS_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} - WS_{N1} & H_{N2} - WS_{N2} & \dots & H_{NN} - WS_{NN} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.19)$$

وهذه المعادلة عبارة عن متعددة الحدود من الدرجة N في المتغير W . يمثل أدنى جذر للمعادلة قيمة تقريبية لطاقة النظام الكمي في المستوى الأرضي. الجذور المتبقية وعددها $N-1$ ماهي إلا قيم تقريبية للمستويات $N-1$ المتبقية.

مثال ٤, ٣: لجسيم يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 1 \\ \infty & 0 > x > 1 \end{cases}$$

احسب طاقة أدنى مستوى باستخدام طريقة التغيرات الخطية للدالة الاختيارية

$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2;$$

$$\psi_1 = x(1-x), \quad \psi_2 = x^2(1-x)^2$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, 1) = 0$ محققة.

الحل: لهذا المثال نعلم أن المؤثر الهاملتوني هو $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ ومستويات الطاقة المميزة هي

وللتبسيط سوف نستخدم $E_n = n^2\pi^2 \frac{\hbar^2}{2m}$ وعليه فإن التكاملات تحسب كالتالي:

$$S_{11} = \int_0^1 \psi_1^2 dx = \int_0^1 x^2(1-2x+x^2) dx = 1/30;$$

$$S_{22} = \int_0^1 \psi_2^2 dx = \int_0^1 x^4(1-2x+x^2) dx = 1/630;$$

$$S_{12} = \int_0^1 \psi_1\psi_2 dx = \int_0^1 x^3(1-2x+x^2) dx = 1/140;$$

$$H_{11} = \int_0^1 \psi_1 \hat{H} \psi_1 dx = -\int_0^1 \psi_1 \frac{d^2\psi_1}{dx^2} dx = 2 \int_0^1 x(1-x) dx = 1/3;$$

$$H_{22} = \int_0^1 \psi_2 \hat{H} \psi_2 dx = - \int_0^1 \psi_2 \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} dx$$

$$= -2 \int_0^1 x^2 (1 - 8x^2 + 19x^4 - 18x^4 + 6x^5) dx = 2/105;$$

$$H_{12} = \int_0^1 \psi_1 \hat{H} \psi_2 dx = - \int_0^1 \psi_1 \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} dx$$

$$= -2 \int_0^1 x (1 - 7x + 12x^2 - 6x^3) dx = 1/15$$

وطاقة أدنى مستوى هي أصغر جذر للمحدد:

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{1}{3} - \frac{W}{30} \right) & \left(\frac{1}{15} - \frac{W}{140} \right) \\ \left(\frac{1}{15} - \frac{W}{140} \right) & \left(\frac{2}{105} - \frac{W}{630} \right) \end{vmatrix} = 0$$

حيث W يأتي من مفكوك المحدد بالمعادلة

$$W^2 - 112W + 1008 = 0$$

التي لها الجذور:

$$W_{\min} = 9.8698 \text{ and } 102.13$$

وهما متفقتان للمستوى الأرضي $n = 1$ بالرغم من سهولة الدالة المفترضة. ونجد هنا أن الاختلاف بين الطاقة المحسوبة بواسطة طريقة التغيرات الخطية والقيمة الحقيقية للمستوى الأول المثار $n = 2$ كبيرة (انظر الجدول التالي للمقارنة).

n	W_{\min}	$W_{\text{exact}} = \pi^2 n^2$
1	9.8698	9.8696
2	102.13	39.4784

البرنامج التالي كتب باستخدام البرنامج ماثماتيكا لحساب قيم الطاقة بواسطة طريقة التغير الخطية. يمكن تنفيذ البرنامج للتأكد من الحسابات. وأيضاً بالإمكان تغيير شكل الدوال Ψ_1 و Ψ_2 لحساب قيم الطاقة.

$$\Psi_1 = x^2 - x^3$$

$$s_{11} = \int_0^L \Psi_1^2 dx$$

$$s_{22} = \int_0^L \Psi_2^2 dx$$

$$s_{12} = \int_0^L \Psi_1 \Psi_2 dx$$

$$s_{21} = s_{12}$$

$$h_{11} = \int_0^L \Psi_1 \nabla^2 \Psi_1 dx$$

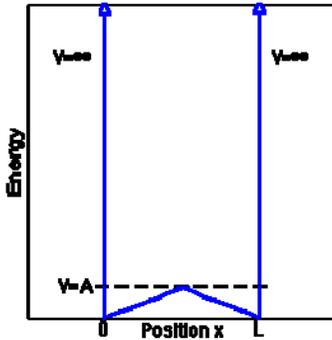
$$h_{12} = \int_0^L \Psi_1 \nabla^2 \Psi_2 dx$$

$$h_{21} = h_{12}$$

$$h_{22} = \int_0^L \Psi_2 \nabla^2 \Psi_2 dx$$

$$AA = \begin{pmatrix} h_{11} - W s_{11} & h_{12} - W s_{12} \\ h_{21} - W s_{21} & h_{22} - W s_{22} \end{pmatrix}$$

$$\text{Solve Det } AA = 0 \text{ for } W$$



مثال ٣,٥ : جسم محصور في صندوق لانتهائي الجهد ذو بعد واحد طوله L يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} Ax & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ A(L-x) & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}$$

احسب طاقة ودوال أدنى مستويين باستخدام طريقة التغير

الخطية للدالة الاختيارية:

$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2; \quad \psi_i = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(i \frac{\pi x}{L}\right),$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, L) = 0$ محققة.

الحل: استخدم الهاملتونيان الذي يكتب على الصورة:

$$\hat{H}(x) = \begin{cases} \hat{H}_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + Ax & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \hat{H}_2(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + A(L-x) & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}$$

لحساب التكاملات الآتية:

$$S_{11} = \int_0^L \psi_1^2 dx = 1;$$

$$S_{22} = \int_0^L \psi_2^2 dx = 1;$$

$$S_{12} = S_{21} = \int_0^L \psi_1 \psi_2 dx = 0;$$

$$H_{11} = \int_0^L \psi_1 \hat{H} \psi_1 dx = \int_0^{L/2} \psi_1 \hat{H}_1 \psi_1 dx + \int_{L/2}^L \psi_1 \hat{H}_2 \psi_1 dx = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + AL \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2} \right);$$

$$H_{22} = \int_0^L \psi_2 \hat{H} \psi_2 dx = \int_0^{L/2} \psi_2 \hat{H}_1 \psi_2 dx + \int_{L/2}^L \psi_2 \hat{H}_2 \psi_2 dx = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{AL}{4};$$

$$H_{12} = H_{21} = \int_0^L \psi_1 \hat{H} \psi_2 dx = \int_0^{L/2} \psi_1 \hat{H}_1 \psi_2 dx + \int_{L/2}^L \psi_1 \hat{H}_2 \psi_2 dx = 0$$

ومنها اوجد معادلة المحدد العام:

$$\begin{vmatrix} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + AL \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2} \right) - W & 0 \\ 0 & \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{AL}{4} - W \end{vmatrix} = 0$$

و منها تجد أن:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + AL \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2} \right)$$

$$E_2 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{AL}{4}$$

وهما أقل طاقتين ويعتمدان على قيم الجهد الموتر A . ومن قيم الطاقة المحسوبة يمكن حساب الدوال المميزة بالحصول على المعادلات العامة وهما:

$$a_1 \left\{ \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + AL \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2} \right) - W \right\} + a_2 \times (0) = 0$$

$$a_1 \times (0) + a_2 \left\{ \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{AL}{4} - W \right\} = 0$$

ولحساب الدالة المميزة المناظرة للقيمة E_1 ، نعوض بالقيمة E_1 بالمعادلتان السابقتان فنجد أن جميع الحدود تؤول للصفر ماعدا الحد الأخير. ولتصبح المعدلة الأخيرة مساوية للصفر كالأولي فإنه يتوجب علينا وضع $a_2 = 0$. ولكن إذا وضعنا $a_2 = 0$ فما هو الحال بالنسبة إلى a_1 ؟ الحل هو أي قيمة ماعدا الصفر، وإذا أردنا دالة معايرة فيجب أن نختار $a_1 = 1$. وبالنسبة إلى القيمة الثانية E_2 نجد أن $a_1 = 0$ و $a_2 = 1$. وبالتالي نحصل على الجدول:

القيمة المميزة	الدالة المميزة
$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + AL \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2} \right)$	$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$
$E_2 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{AL}{4}$	$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$

لنا ملاحظة مهمة هنا وهي أن التغيير في الجهد (وهو متمائل بالنسبة إلى النقطة $x = \frac{L}{2}$) بهذا المثال لم يخلط بين المستويين لأنهما غير متمائلين (الدالة ψ_1 دالة زوجية و الدالة ψ_2 دالة فردية) بالنسبة لمحور التماثل والذي يمر بالنقطة $x = \frac{L}{2}$.

تمارين عامة

١- لجسيم في بئر جهد لانهازي مربع، ذي بعد واحد وسعة L ، وضح لماذا لا تصلح الدالة

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{3}{L^3}}x$$

لحساب طاقة المستوى الأرضي بطريقة التباير.

٢- باستخدام طريقة التباير للدالة الاختيارية $\psi_a = x^a(1-x)^a$ حيث a متغير اختياري احسب

طاقة أدنى مستوى لجسيم في بئر جهد لانهازي مربع، ذي بعد واحد وسعة 1.

$$W = \frac{\langle \psi_a | \hat{H} | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \frac{2a(4a+1)}{2a-1}$$

أ- اثبت أن

$$a = 1.11237$$

ب- اثبت أن

$$W_{\min} = 9.90$$

ومنها اثبت أن

٣- باستخدام طريقة التباير للدالة الاختيارية $\psi_{1s}(r) = Ce^{-a(1+r)}$ حيث a متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين.

$$C = \frac{a^{3/2}e^a}{\sqrt{\pi}}$$

أ- اثبت أن

$$\langle \psi_{1s} | \hat{H} | \psi_{1s} \rangle = a + \frac{a^2}{2}$$

ب- اثبت أن

$$W_{\min} = -0.5H$$

ت- احسب القيمة المثالية للمتغير a ومنه اثبت أن

٤- باستخدام طريقة التباير للدالة الاختيارية $\psi_{1s}(r) = Ce^{-ar^2}$ حيث a متغير اختياري احسب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيدروجين.

$$C = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{3/4}$$

أ- اثبت أن

$$\langle \psi_{1s} | \hat{H} | \psi_{1s} \rangle = \frac{3a}{2} - 2\left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2}$$

ب- اثبت أن

$$W \geq E_1$$

ت- احسب القيمة المثالية للمتغير a ومنه اثبت أن

٥- لحساب طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي الخطي استخدم طريقة التغيرات للدالة الاختيارية

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \quad \text{حيث } \psi(x) = Ce^{-ax^2}$$

$$\text{أ- اثبت أن } C = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$\text{ب- اثبت أن } W = \frac{a\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8a} \quad \text{ومنه اثبت أن القيمة المثالية } a = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

$$\text{ت- اثبت أن طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي هي } E_0 = W_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

٦- لحساب طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي الخطي استخدم طريقة التغيرات للدالة الاختيارية

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \quad \text{حيث } \psi(x, a) = c \frac{1}{x^2 + a^2}$$

$$\text{أ- اثبت أن } C = \left(\frac{2a^3}{\pi}\right)^{1/2}$$

$$\text{ب- اثبت أن } W = \frac{\hbar^2}{4ma^2} + \frac{m\omega^2 a^2}{2} \quad \text{ومنه اثبت أن القيمة المثالية } a = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}}$$

$$\text{ت- اثبت أن طاقة أدنى مستوى للمتذبذب التوافقي هي } E_0 = W_{\min} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{وبالتالي}$$

$$\text{نسبة الخطأ } \frac{\hbar\omega/\sqrt{2} - \hbar\omega/2}{\hbar\omega/2} = \sqrt{2} - 1 \approx 0.41 = 41\% \quad \text{وهي نسبة كبيرة.}$$

٧- لجسيم يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 1 \\ \infty & 0 > x > 1 \end{cases}$$

احسب طاقة أدنى مستوى باستخدام طريقة التغيرات الخطية للدالة الاختيارية

$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_2;$$

$$\psi_1 = x(1-x), \quad \psi_2 = x^2(1-x)$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, 1) = 0$ محققة.

للمساعدة: احسب التكاملات الآتية:

$$S_{11} = \int_0^1 \psi_1^2 dx = \int_0^1 x^2(1-2x+x^2)dx = 1/30;$$

$$S_{22} = \int_0^1 \psi_2^2 dx = \int_0^1 x^4(1-2x+x^2)dx = 1/105;$$

$$S_{12} = \int_0^1 \psi_1\psi_2 dx = \int_0^1 x^3(1-2x+x^2)dx = 1/60;$$

$$H_{11} = \int_0^1 \psi_1 \hat{H} \psi_1 dx = -\int_0^1 \psi_1 \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} dx = 2 \int_0^1 (x-x^2) dx = 1/3;$$

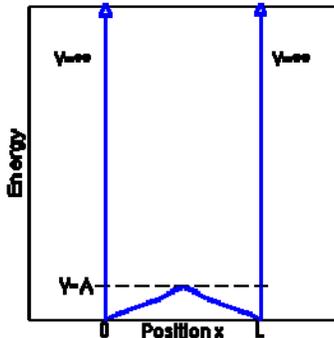
$$H_{22} = \int_0^1 \psi_2 \hat{H} \psi_2 dx = -\int_0^1 \psi_2 \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} dx = -\int_0^1 x^2(2-8x+6x^2) dx = 2/15;$$

$$H_{12} = \int_0^1 \psi_1 \hat{H} \psi_2 dx = -\int_0^1 \psi_1 \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} dx = -\int_0^1 x(2-8x+6x^2) dx = 1/6$$

ومنها اوجد:

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{1}{3} - \frac{W}{30}\right) & \left(\frac{1}{6} - \frac{W}{60}\right) \\ \left(\frac{1}{6} - \frac{W}{60}\right) & \left(\frac{1}{15} - \frac{W}{105}\right) \end{vmatrix} = 0$$

واحسب منها جذور المعادلة: $W^2 - 52W + 420 = 0$



٨- جسيم محصور في صندوق لانتهائي الجهد ذو بعد واحد طوله L يتحرك بداخل جهد أحادي الإحداثيات يعطي بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} Ax & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ A(L-x) & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}$$

احسب طاقة ودوال أدنى مستويين باستخدام طريقة التباير الخطية للدالة الاختيارية

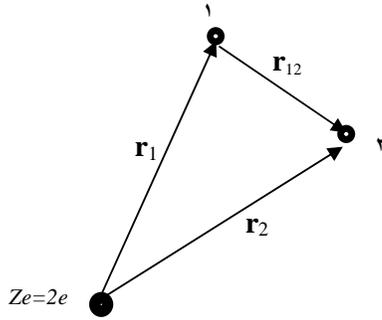
$$\varphi(a_1, a_2, x) = a_1\psi_1 + a_2\psi_3; \quad \psi_i = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(i \frac{\pi x}{L}),$$

حيث a_i متغيرات اختيارية والشروط الحدودية $\varphi(a_1, a_2, 0) = \varphi(a_1, a_2, L) = 0$ محققة.

ملحق (3.A)

ذرة الهيليوم باستخدام طريقة التغيرات

Helium Atom Using Variational Method



المثال التالي ماهو إلا تطبيق مباشر لنظرية التغيرات العامة لحساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيليوم (He). وتتكون ذرة الهيليوم من إلكترونين (٢ و١) مرتبطان بنواة شحنتها $Ze = 2e$ ، انظر الرسم المرافق.

سوف نستخدم هنا الدالة الاختيارية:

$$\psi_{1s}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)$$

حيث:

$$\psi_{1s}(r_i) = \sqrt{\frac{a^3}{\pi}} e^{-ar_i}$$

هي الدالة المميزة لإلكترون ذرة الهيدروجين بالمستوى الأرضي و a متغير اختياري سوف تحسب قيمته باستخدام نظرية التغيرات. الهملتونيان لهذه الذرة، باستخدام الوحدات الذرية (انظر الملحق A) واعتبار أن النواة ساكنة، يأخذ الصورة:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (3.A.1)$$

ولحل هذه المسألة فمن المناسب أن نضع الهملتونيان بالصورة:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{a}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{a}{r_2} + \frac{(a-2)}{r_1} + \frac{(a-2)}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (3.A.2)$$

وباستخدام معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين (بالوحدات الذرية) بالصورة:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{a}{r_i}\right)\psi(r_i) = -\frac{a^2}{2}\psi(r_i) \quad (3.A.3)$$

نجد أن:

$$\begin{aligned} W(Z) &= \frac{a^6}{\pi^2} \int \int e^{-a(r_1+r_2)} \left[-\frac{a^2}{2} - \frac{a^2}{2} + \frac{(a-2)}{r_1} + \frac{(a-2)}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] e^{-a(r_1+r_2)} dr_1 dr_2 \\ &= -a^2 + \frac{2a^6(a-2)}{\pi} \int \frac{e^{-2ar}}{r} dr + \frac{a^6}{\pi^2} \int \int \frac{e^{-2a(r_1+r_2)}}{r_{12}} dr_1 dr_2 \\ &= -a^2 + 2a(a-2) + \frac{5a}{8} \\ &= a^2 - \frac{27}{8}a \end{aligned}$$

وقد استخدمنا التكاملات القياسية بالملحق B. وإيجاد القيم المثلى للمتغير Z نستخدم العلاقة $\frac{\partial W(a)}{\partial a} = 0$ فنجد أن $a = \frac{27}{16} \equiv Z - \frac{5}{16}$ و طاقة أدنى مستوى:

$$\begin{aligned} E_1 = W_{\min} &= a^2 - \frac{27}{8}a = \left(\frac{27}{16}\right)^2 - \left(\frac{27}{8}\right)\left(\frac{27}{16}\right) = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 \\ &= -2.8477 \text{ H} = -77.45 \text{ eV} \end{aligned}$$

وهي قيمة مقبولة (٢% فرق) مقارنةً بالقيمة العملية $-2.905 \text{ H} = -78.98 \text{ eV}$.

وعملياً نستطيع أن نقارن النتائج المقربة مع جهد التأين الأول (IP)، وهي الطاقة اللازمة لنزع إلكترون من المدار $1s$ إلى خارج الذرة، لإتمام التفاعل:



حيث عرفنا:

$$(\text{IP})_{\text{He}} \rightarrow E_{\text{He}^+} - E_{\text{He}}$$

وتحسب من العلاقة:

$$(\text{IP})_{\text{He}} = \left(Z - \frac{5}{16}\right) - \frac{1}{2}Z^2 \text{ eV}$$

ونحن نعلم تماماً أن

$$E_{\text{He}^+} = -2.0 \text{ H} = -54.4 \text{ eV}$$

لذا فإن القيمة النظرية تعطينا

$$(\text{IP})_{\text{He}} = -2.0 \text{ H} + 2.905 \text{ H} = 0.905 \text{ H} = 23.05 \text{ eV}$$

وهي أصغر من القيمة العملية ($0.904 \text{ H} = 24.6 \text{ eV}$) بحوالي ٦%.

ونلاحظ هنا ما يلي:

١- أن طريقة التغيرات أعطت قيمة قريبة من القيمة العملية بالرغم من الصيغة المبسطة للدالة المقترحة. باستعمالنا دالة أكثر تعقيداً نستطيع الحصول على قيمة قريبة جداً من القيمة العملية (انظر الجدول التالي وذلك باستخدام الرموز $u = r_1 + r_2, t = r_1 - r_2$).

الدالة المقترحة	طاقة المستوى الأرضي	الخطأ
e^{-2u}	-2.7500 H	0.1537 H
$e^{-au}, a = 27/16$	-2.8477 H	0.0560 H
$e^{-au} \cosh(ct), a = 1.67, c = 0.48$	-2.8754 H	0.0283 H
$e^{-au} (1 + ct^2), a = 1.69, c = 0.142$	-2.8768 H	0.0269 H

٢- القيمة $a < 2$ تفسر بأنها الشحنة المؤثرة (Effective charge) للنواة. وذلك ناتج من أن كل إلكترون يحجب النواة بحيث أن الإلكترون الثاني يتأثر بشحنة من النواة مقدارها أقل من القيمة ٢.

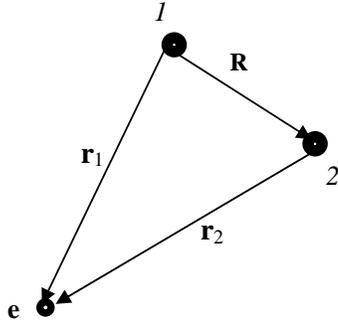
٣- يوجد قيم عملية لجهد التأين الأول (IP) لبعض الذرات التي نزلت منها جميع الإلكترونات ماعدا إلكترونين يتواجدان بالمستوي $1s$ ، وهي كالتالي:

العدد الذري Z	الذرة	القيمة النظرية (eV)	القيمة العملية (eV)
2	He	23.2	24.5
3	Li ⁺	74.1	75.6
4	Be ⁺⁺	152.2	153.6
6	C ⁴⁺	390	393
8	O ⁶⁺	737	738

من الجدول نلاحظ أن اتفاق القيم العملية والنظرية تتحسن بزيادة العدد الذري Z.

ملحق (3.B)

أيون جزئ الهيدروجين (H_2^+)



المثال التالي ماهو إلا تطبيق مباشر لنظرية التغيرات الخطية لأيون جزئ الهيدروجين (H_2^+) الذي يتكون من بروتونين (٢و١) متماسكين بإلكترون وحيد e , انظر الرسم المرافق.

مثال : ناقش (بدون حساب التكاملات) طاقة أدنى مستويان ودالتهما لأيون جزئ الهيدروجين باستخدام طريقة التغيرات الخطية باستخدام الدالة الاختيارية

$$\begin{aligned} \varphi &= a_1\psi_1 + c_2\psi_2 ; \\ \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_1}, \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_2} \end{aligned} \quad (3.B.1)$$

حيث a_i متغيرات اختيارية. ترمز ψ_i للدالة المميزة لحالة أدنى طاقة لإلكترون مترابط مع بروتون i .

الحل: لأيون جزئ الهيدروجين نعرف الهاملتونيان التقريبي (حيث تم إهمال الجزء الخاص بحركة النواة)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{R} \quad (3.B.2)$$

و التكاملات

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle = H_{ji}; \\ S_{ij} &= \langle \psi_i | \psi_j \rangle = S_{ji} \end{aligned}$$

ومنه نحصل على المحدد

$$\begin{vmatrix} (H_{11} - W) & (H_{12} - WS) \\ (H_{21} - WS) & (H_{22} - W) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.B.3)$$

ومنه نجد أن

$$H_{11} - W = \pm (H_{12} - WS) \quad (3.B.4)$$

ومنة نحصل على جذرين يعبران عن طاقة أدنى مستويين ودالاتهما وهما

$$W_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S} \quad (3.B.5)$$

$$W_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S}$$

ولحساب الدالتين المرتبطتين بهما نستخدم المعادلة

$$a_1(H_{11} - W) + a_2(H_{11} - SW) = 0 \quad (3.B.6)$$

وباستخدام الجذر $W_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S}$ نجد أن $a_1 = a_2$ و $\varphi_+ = a_1(\psi_1 + \psi_2)$

وباستخدام الجذر $W_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S}$ نجد أن $a_1 = -a_2$ و $\varphi_- = a_1(\psi_1 - \psi_2)$

واجب منزلي: باستخدام خاصية التعامد $\langle \varphi_+ | \varphi_+ \rangle = 1$ اثبت أن $a_1 = \frac{1}{\sqrt{2+2S}}$. وباستخدام

$\langle \varphi_- | \varphi_- \rangle = 1$ اثبت أن $a_2 = \frac{1}{\sqrt{2-2S}}$ ولهذا تأخذ مستويات الطاقة والدوال المرتبطة بها

الشكل:

$$W_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S}, \quad \varphi_+ = \frac{\psi_1 + \psi_2}{\sqrt{2+2S}} \quad (3.B.7)$$

$$W_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - S}, \quad \varphi_- = \frac{\psi_1 - \psi_2}{\sqrt{2-2S}}$$

الباب الرابع

نظرية الاضطراب للحالات المستقرة

Time-Independent Perturbation Theory

إلى الآن تعاملنا مع نظم فيزيائية لها حلول تحليلية كاملة. هذا بالطبع ناتج من الشكل المبسط للجزء الخاص بجهد التفاعل بالهملتونيان (الابتدائي) والذي أدى لحل معادلة شرودنجر بدون طرق تقريبية. والأن ما هو العمل إذا لم يكن جهد التفاعل وبالتالي الهملتونيان الجديد (المعدل) ليس بالشكل البسيط؟ من السهل عادةً الاعتماد على الحلول العددية لحل المعادلات التفاضلية باستخدام الكمبيوتر. ولكن، إذا لم يكن هناك فرقاً كبيراً بين الهملتونيان المعدل والابتدائي فإننا نستطيع أن نستخدم نتائج نظرية الاضطراب لإيجاد قيم تقريبية للطاقة والدوال المميزة.

فما هي نظرية الاضطراب؟ هي نظرية تعمل بدرجة دقة عالية في حالة إضافة اضطراب (حد) صغير جداً للطاقة الكلية للنظام الفيزيائي. ويصبح الهملتونيان الكلي \hat{H} ما هو إلا مجموع جزئين: الأول هو الهملتونيان الغير مضطرب \hat{H}_0 (وهو الجزء الممكن إيجاد حلاً كاملاً له تحليلياً) والثاني هو الجزء الصغير جداً والمسؤول عن الاضطراب \hat{H}' :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}' \ll \hat{H}_0 \quad (4.1)$$

وتصبح المعادلة المميزة الحقيقية هي:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4.2)$$

وخطتنا هنا هي أن نضع الهمالتونيان الجديد (وبالتالي طاقة ودالة النظام المضطرب) على هيئة مجموعة من الحدود (أو متسلسلة شبيهة بمتسلسلة تيلور). وحيث أن الاضطراب ما هو إلا جزء بسيط، لذا فإننا سوف نحفظ بحددين أو ثلاثة حدود من المتسلسلة لإيجاد أقرب قيمة تقريبية للطاقة الحقيقية.

نظراً للشبه بين هذه الطريقة ومتسلسلة تيلور فسوف نأخذ مثلاً بسيطاً لمتسلسلة تيلور للدالة:

$$f(x) = (1+x)^{1/2}$$

حيث أن أول ثلاثة حدود من المتسلسلة حول $x=0$ هو:

$$f(x) = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots$$

إذا اعتبرنا أن x هي الاضطراب بالنسبة إلى القيمة 1 (الغير مضطربة). وإذا كانت $x \ll 1$ فإن الحدين المضافين للواحد سيكونان ملائمان لإيجاد قيمة تقريبية الدالة $f(x)$. أول حد (يحتوي على x) يقال عنه التصحيح من الدرجة الأولى و الحد الثاني (الذي يحتوي على x^2) يقال عنه التصحيح من الدرجة الثانية). كمثال، القيمة الحقيقية للدالة عند $(x=0.2)$ هي $f(x=0.2)=1.0954451$. وباستخدام ثلاثة حدود للدالة فقط نجد أن $f(0.2) = 1.000 + 0.100 - 0.005 = 1.095$ وهي أقل من القيمة الحقيقية بنسبة 0.04%.

وسنحاول في دراستنا التالية أن نستخدم الطريقة نفسها لإيجاد التصحيحات التقريبية لطاقة النظام المضطرب.

أ- اضطراب المستويات وحيدة الانتماء (المنفردة)

Nondegenerate States Perturbation

دعنا نعرف الدالة المميزة الغير مضطربة بالرمز $|\psi_n^{(0)}\rangle$ حيث أن الرمز (0) يدل على الدالة المميزة للهملتونيان \hat{H}_0 والتي تحقق المعادلة المميزة:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (4.3)$$

حيث $E_n^{(0)}$ هي الطاقة المميزة للمستوى n (أحد المستويات الخاصة بالهملتونيان \hat{H}_0). وللتبسيط فقط سوف نضع المعادلة (4.3) بالصورة:

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (4.4)$$

وسنفترض هنا أن قيمة الدالة المميزة الحقيقية $|\psi\rangle$ للهملتونيان الكلي \hat{H} قريبة جداً من الدالة المميزة الغير مضطربة $|n^{(0)}\rangle$ بحيث بإمكاننا وضعها بالشكل المتسلسل:

$$|\psi\rangle = |n^{(0)}\rangle + |a\rangle + |b\rangle + \dots \quad (4.5)$$

حيث $|a\rangle$ هو التصحيح من الدرجة الأولى و $|b\rangle$ هو التصحيح من الدرجة الثانية للدالة $|n^{(0)}\rangle$. وبالمثل، سنفترض هنا أن قيمة الطاقة المميزة الحقيقية E قريبة جداً من الطاقة المميزة الغير مضطربة $E_n^{(0)}$ بحيث نتمكن من وضعها بالشكل المتسلسل:

$$E = E_n^{(0)} + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots \quad (4.6)$$

حيث ϵ_1 هو التصحيح من الدرجة الأولى و ϵ_2 هو التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة $E_n^{(0)}$. والسؤال الآن هو كيف نوجد هذه التصحيحات (التعديلات)، وخصوصاً للطاقة؟ حيث أن الطاقة هي من الأوليات المطلوبة للفيزيائيين والكيميائيين. ولإعطاء أنفسنا دفعة قوية نحو إيجاد حل لهذه المعضلة، سنفترض وسيطاً صحيحاً (Integer parameter) λ . هذا الوسيط له قيمتين فقط وهما الصفر أو الواحد، وعند إعطاء هذا الوسيط قيمة صفرية ($\lambda = 0$) فأنه يلغي أي اضطراب وبالتالي يلغي أي تعديل وعند إعطائه قيمة الواحد الصحيح ($\lambda = 1$) فأنه يظهر الاضطراب وبالتالي التعديل للرتب المختلفة، ويصبح الهملتونيان الكلي بالصورة:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \quad (4.7)$$

المعادلتان (4.5) و (4.6) تكتبان بالشكل:

$$|\psi\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |a\rangle + \lambda^2 |b\rangle + \dots \quad (4.8)$$

$$E = E_n^{(0)} + \lambda \epsilon_1 + \lambda^2 \epsilon_2 + \dots \quad (4.9)$$

ولنا هنا ملاحظتان:

١- عندما $\lambda = 0$ فإننا نحصل على القيم المميزة للدالة والطاقة الغير مضطربة فقط، وعندما $\lambda = 1$ فإننا نحصل على التصحيح المضاف للقيم المميزة للدالة والطاقة.

٢- من المنطقي أن يظهر التصحيح من الدرجة الثانية باحتوائه مربع الوسيط λ^2 حيث نتوقع أن التصحيح من الدرجة الثانية (للدالة و الطاقة) سوف يحتوي على مربع \hat{H}' .

بالتعويض من المعادلات (4.7-9) بالمعادلة (4.2) نجد:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_o + \lambda \hat{H}')(|n^{(0)}\rangle + \lambda|a\rangle + \lambda^2|b\rangle + \dots) = \\ (E_n^{(0)} + \lambda \epsilon_1 + \lambda^2 \epsilon_2 + \dots)(|n^{(0)}\rangle + \lambda|a\rangle + \lambda^2|b\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (4.10)$$

وهدفنا الآن هو أن يكون التصحيح من الدرجة الأولى يعتمد على \hat{H}' والتصحيح من الدرجة الثانية يعتمد على \hat{H}^2 . وهذا يتأتى بمساواة معاملات الوسيط λ (لنفس الدرجة) ("equating the powers of λ ") بطرفي المعادلة (4.10). دعونا نساوي المعاملات لأول ثلاث قوي للوسيط λ :

مساواة معاملات λ^0 تعطي:

$$\hat{H}_o |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (4.11)$$

وهي ببساطة معادلة شرودنجر للهملتونيان الغير مضطرب كما كتبت بمعادلة (4.4).

ومساواة معاملات λ^1 تعطي:

$$\hat{H}_o |a\rangle + \hat{H}' |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |a\rangle + \epsilon_1 |n^{(0)}\rangle \quad (4.12)$$

ومساواة معاملات λ^2 تعطي:

$$\hat{H}_o |b\rangle + \hat{H}' |a\rangle = E_n^{(0)} |b\rangle + \epsilon_1 |a\rangle + \epsilon_2 |n^{(0)}\rangle \quad (4.13)$$

وستتوقف هنا حيث أن التصحيح من الدرجة الثانية يعتبر كافياً لمعظم النظم الفيزيائية المهمة لنا في هذا المنهج المبسط.

كيفية حساب التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة:

باستخدام الضرب القياسي للمعادلة (4.12) من اليسار بالدالة $\langle n^{(0)} |$ تصيح:

$$\langle n^{(0)} | \hat{H}_o | a \rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | E_n^{(0)} | a \rangle + \langle n^{(0)} | \epsilon_1 | n^{(0)} \rangle \quad (4.14)$$

وباستخدام خاصية الترافق للهملتونيان $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ نجد أن:

$$\langle n^{(0)} | \hat{H}_o | a \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{H}_o^\dagger | a \rangle \quad (4.15)$$

أو

$$\begin{aligned} \langle n^{(0)} | \hat{H}_o^\dagger | a \rangle &= (\langle a | \hat{H}_o | n^{(0)} \rangle)^* \\ &= E_n^{(0)*} (\langle a | n^{(0)} \rangle)^* \\ &= E_n^{(0)*} \langle n^{(0)} | a \rangle \end{aligned} \quad (4.16)$$

وحيث أن القيمة المميزة $E_n^{(0)}$ هي قيمة حقيقية فإن $E_n^{(0)*} = E_n^{(0)}$ لذا نستطيع أن نصل الى المعادلة التالية:

$$\langle n^{(0)} | \hat{H}_o | a \rangle = E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | a \rangle \quad (4.17)$$

بالإمكان أيضاً إخراج الطاقة من الأقواس بالطرف الأيمن للمعادلة (4.14) حيث أنها ثوابت لنصل إلى:

$$E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | a \rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | a \rangle + \underbrace{\epsilon_1 \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{=1} \quad (4.18)$$

وقد أخذنا في الاعتبار أن الدالة $|n^{(0)}\rangle$ معيرة لذا فإن التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة ϵ_1 يعطي بالمعادلة:

$$\epsilon_1 = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle \quad (4.19)$$

كيفية حساب التصحيح من الرتبة الثانية للطاقة ϵ_2

حيث أننا وجدنا طريقة ناجحة لإيجاد ϵ_1 فلنحاول بنفس الطريقة إيجاد ϵ_2 . باستخدام الضرب القياسي للمعادلة (4.13) من اليسار بالدالة $\langle n^{(0)} |$ تصبح:

$$\langle n^{(0)} | \hat{H}_o | b \rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}' | a \rangle = \langle n^{(0)} | E_n^{(0)} | b \rangle + \langle n^{(0)} | \epsilon_1 | a \rangle + \langle n^{(0)} | \epsilon_2 | n^{(0)} \rangle \quad (4.20)$$

وبحساب الحدود الخمسة نجد:

$$E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | b \rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}' | a \rangle = E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | b \rangle + \epsilon_1 \langle n^{(0)} | a \rangle + \epsilon_2 \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle \quad (4.21)$$

وبالتالي فإن التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة ϵ_2 يعطى بالمعادلة:

$$\epsilon_2 = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | a \rangle - \underbrace{\epsilon_1 \langle n^{(0)} | a \rangle}_{=0} \quad (4.22)$$

وذلك بفرض أن الدالتين $\langle a |$ و $\langle n^{(0)} |$ متعامدتان، ولهذا تؤول المعادلة (4.22) إلى:

$$\epsilon_2 = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | a \rangle \quad (4.23)$$

لاحظ هنا أنه لحساب التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة نحتاج لمعرفة التصحيح من الدرجة الأولى للدالة، أي الدالة $\langle a |$ ، فكيف نحسبها؟ بالنظر مرة أخرى للمعادلة (4.12) وإعادة ترتيبها لنحصل على الأتي:

$$\hat{H}_o | a \rangle = E_n^{(0)} | a \rangle - (\hat{H}' - \epsilon_1) | n^{(0)} \rangle \quad (4.24)$$

هذه معادلة تفاضلية للدالة $\langle a |$ وبالإمكان محاولة حلها لكل نظام بعينة. ولكننا سوف نستخدم طريقة المتسلسلات ونضعها بدلالة الدوال المميزة للهملتونيان \hat{H}_o حيث أنهم يكونون فئة كاملة (Complete set)، ولذا:

$$|a\rangle = \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} c_m |m^{(0)}\rangle \quad (4.25)$$

وهناك بعض الملاحظات على الصيغة (4.25):

١- الدوال $|m^{(0)}\rangle$ ماهي إلا الدوال المميزة للهاملتونيان \hat{H}_o . ويجب أن نتذكر أن الدالة المميزة الكلية $|\psi\rangle$ قريبة جداً في الشكل من الدوال المميزة الغير مضطربة $|n^{(0)}\rangle$.

٢- لم تضاف الدالة $|n^{(0)}\rangle$ بالمفكوك ($m \neq n$) حيث أننا افترضنا شرط التعامد $\langle n^{(0)} | m^{(0)} \rangle = 0$ وبالتالي فإنها لا تشارك في تكوين $|a\rangle$.

٣- المعاملات c_m ما هي إلا

$$c_m = \langle m^{(0)} | a \rangle \quad (4.26)$$

بالتالي:

$$|a\rangle = \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)} | a \rangle \quad (4.27)$$

باستخدام الضرب القياسي للمعادلة (4.24) من اليسار بالدالة $\langle m^{(0)} |$ تصبح:

$$\langle m^{(0)} | \hat{H}_o | a \rangle = \langle m^{(0)} | E_n^{(0)} | a \rangle - \langle m^{(0)} | (\hat{H}' - \epsilon_1) | n^{(0)} \rangle \quad (4.28)$$

$$E_m^{(0)} \langle m^{(0)} | a \rangle = E_n^{(0)} \langle m^{(0)} | a \rangle - \underbrace{\langle m^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}_{=0} + \epsilon_1 \langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle \quad (4.29)$$

ومن المعادلة الأخيرة نجد:

$$\langle m^{(0)} | a \rangle = - \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (4.30)$$

أخيراً نستطيع أن نجمع نتائجنا بالتعويض من (4.30) في (4.27) لنجد:

$$|a\rangle = - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (4.31)$$

بالتعويض من (4.31) في (4.23) نحصل على:

$$\begin{aligned} \epsilon_2 &= \left\langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \left[- \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \right] \right. \right\rangle \\ &= - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle n^{(0)} | \hat{H}' | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \end{aligned}$$

وأخيراً

$$\epsilon_2 = - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{|\langle n^{(0)} | \hat{H}' | m^{(0)} \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (4.32)$$

وهذا هو التصحيح من الدرجة الثانية للطاقة.

لاحظ هنا مايلي:

١ - المعادلة (4.32) تحتوي على مربع الاضطراب \hat{H}' كما افترضنا مسبقاً.

٢- التجميع في المعادلات (4.31) و (4.32) يحتوي على عدد لانتهائي من الحدود، ولكن عملياً، ونظراً لبعض الشروط، فإننا نأخذ في الاعتبار عدد قليل من الحدود (وخصوصاً القريبة من بعضها البعض) للحصول على قيمة تقريبية للتصحيح.

٣- $E_m^{(0)}$ لا يمكن أن تتساوي مع $E_n^{(0)}$ إلا فإن $\epsilon_2 \rightarrow \infty$ ، وقد وضع الشرط $m \neq n$ حتى نتجنب هذه الحالة.

في المستويات المتناظرة (متعددة الانتماء) (Degenerate states) لا نستطيع تجنب الشرط الثالث حيث أن لبعض المستويات نجد أن $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$. ولهذا فإن هذه الطريقة لا تصلح للمستويات المتناظرة وسنضطر للتعامل مع هذه الحالة بطريقة أخرى.

ب- اضطراب المستويات المتناظرة

Degenerate State Perturbation

هي الحالة التي تكون فيها الطاقة المميزة للنظام لها أكثر من دالة مميزة، بمعنى أن المعادلة (4.11) تؤول إلي:

$$\begin{aligned} \hat{H}_o |n_1^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |n_1^{(0)}\rangle \\ \hat{H}_o |n_2^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |n_2^{(0)}\rangle \\ &\vdots \\ \hat{H}_o |n_p^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |n_p^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (4.33)$$

ولإيجاد التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة* نجد أننا يجب أن نبحث عن حل معادلة المحدد العام:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \epsilon_1 & H_{12} & \cdots & H_{1p} \\ H_{21} & H_{22} - \epsilon_1 & \cdots & H_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{p1} & H_{p2} & \cdots & H_{pp} - \epsilon_1 \end{vmatrix} = 0 \quad (4.34)$$

أو بالصورة المدمجة:

$$|H_{ij} - \delta_{ij} \epsilon_1| = 0,$$

حيث عناصر المصفوفة H_{ij} تعرف كالتالي:

$$H_{ij} = \langle n_i^{(0)} | \hat{H} | n_j^{(0)} \rangle \quad (4.35)$$

ونظراً لأهمية وصعوبة هذا الموضوع فإننا نوجه نظر القارئ إلى أننا أفردنا الملحق (4.A) لدراسة ظاهرة من أهم تطبيقات المستويات المتناظرة وهي ظاهرة العالم شتارك.

*إثبات (4.34): نفترض لكل منسوب n عدد من المستويات $|n_i^{(0)}\rangle$ حيث $i = 1, 2, \dots, p$ ، بالتالي فإن المعادلة (4.33) يمكن وضعها بالصورة المبسطة:

$$\hat{H}_o |n_i^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_i^{(0)}\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, p$$

وباستخدام مفكوك الدوال:

$$\begin{aligned} |n^{(0)}\rangle &= c_1 |n_1^{(0)}\rangle + c_2 |n_2^{(0)}\rangle + \dots, \\ |a\rangle &= a_1 |n_1^{(0)}\rangle + a_2 |n_2^{(0)}\rangle + \dots, \end{aligned}$$

بالمعادلة (4.12)، نحصل على:

$$\begin{aligned} \hat{H}_o [a_1 |n_1^{(0)}\rangle + a_2 |n_2^{(0)}\rangle + \dots] + \hat{H} [c_1 |n_1^{(0)}\rangle + c_2 |n_2^{(0)}\rangle + \dots] \\ = E_n^{(0)} [a_1 |n_1^{(0)}\rangle + a_2 |n_2^{(0)}\rangle + \dots] + \epsilon_1 [c_1 |n_1^{(0)}\rangle + c_2 |n_2^{(0)}\rangle + \dots] \end{aligned}$$

ويضرب المعادلة الأخيرة بالدوال $\langle n_j^{(0)} |$ ، $j = 1, 2, \dots, p$ ، بالترتيب، واستخدام خاصتي التعامد

والعيارية للدوال المتناظرة بالصورة:

$$\langle n_j^{(0)} | n_i^{(0)} \rangle = \delta_{ji}$$

نحصل على المعادلات الآتية التالية:

$$c_1 (H_{11} - \epsilon_1) + c_2 H_{12} + \dots + c_p H_{1p} = 0$$

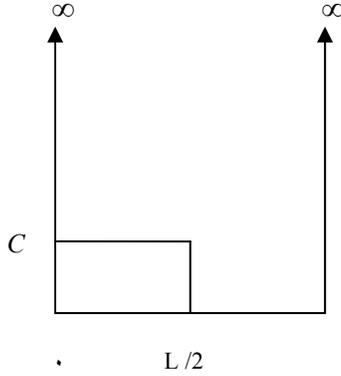
$$c_1 H_{21} + c_2 (H_{22} - \epsilon_1) + \dots + c_p H_{2p} = 0$$

⋮

$$c_1 H_{p1} + c_2 H_{p2} + \dots + c_p (H_{pp} - \epsilon_1) = 0$$

ولإيجاد قيم c_p يجب أن يتحقق شرط المحدد المعرف بالمعادلة (4.34).

أمثلة محلولة



مثال ١، ٤: جسيم محصور في صندوق لانتهائي الجهد ذو بعد واحد طوله L اثر عليه باضطراب معطي كالآتي:

$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} C & \text{for } 0 \leq x < L/2 \\ 0 & \text{for } L/2 \leq x < L \end{cases}$$

حيث C ثابت وله وحدات الجهد كما هو موضح بالرسم. احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع للطاقة والدالة للمستوى الأرضي وذلك بمعلومية أن الدوال والطاقة الغير مضطربة تعطي بالمعادلات:

$$\begin{aligned} |n^{(0)}\rangle &= \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(k_n x), & k_n &= \frac{n\pi}{L} \\ E_n^{(0)} &= n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\right) = n^2 E_1^{(0)}, & n &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

الحل: التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع للطاقة للمستوى الأرضي ($n = 1$) يحسب من المعادلة:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \langle 1^{(0)} | \hat{H}' | 1^{(0)} \rangle = \left(\frac{2}{L}\right) C \int_0^{L/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{L} x\right) dx \\ &= \left(\frac{2}{L}\right) C \left(\frac{L}{4}\right) = \frac{C}{2} \end{aligned}$$

التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي تحسب من المعادلة:

$$\begin{aligned}
 |a\rangle &= -\sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H} | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} = -\sum_{m=2}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle}{m^2 E_1^{(0)} - E_1^{(0)}} \\
 &= -|2^{(0)}\rangle \frac{\langle 2^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle}{2^2 E_1^{(0)} - E_1^{(0)}} - |3^{(0)}\rangle \frac{\langle 3^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle}{3^2 E_1^{(0)} - E_1^{(0)}} - |4^{(0)}\rangle \frac{\langle 4^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle}{4^2 E_1^{(0)} - E_1^{(0)}} - \dots
 \end{aligned}$$

نلاحظ هنا: أن التجميع لكل قيم m من $m=2$ إلى $m=\infty$, ومع زيادة قيمة m نجد أن المقام يزداد وبالتالي قيم الحدود تقل تدريجياً. ولهذا السبب، كقيمة تقريبية، سوف نكتفي بالقيمة $m=2$ فقط ويصبح التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي هو:

$$|a\rangle \approx -|2^{(0)}\rangle \frac{\langle 2^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle}{2^2 E_1^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

وأخيراً لن يتبقى لنا غير إجراء التكامل وهو:

$$\langle 2^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle = \frac{2C}{L} \int_0^{L/2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx$$

وباستخدام التعويض $y = \frac{\pi}{L}x$ و $dy = \frac{\pi}{L}dx$ فإن حدود التكامل تصبح $\{0, \pi/2\}$ ولذا:

$$\langle 2^{(0)} | \hat{H} | 1^{(0)} \rangle = \frac{2C}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin(2y) \sin(y) dy = \frac{2C}{\pi} \frac{2}{3} \sin^3 y \Big|_0^{\pi/2} = \frac{4C}{3\pi},$$

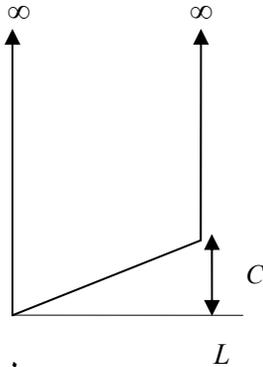
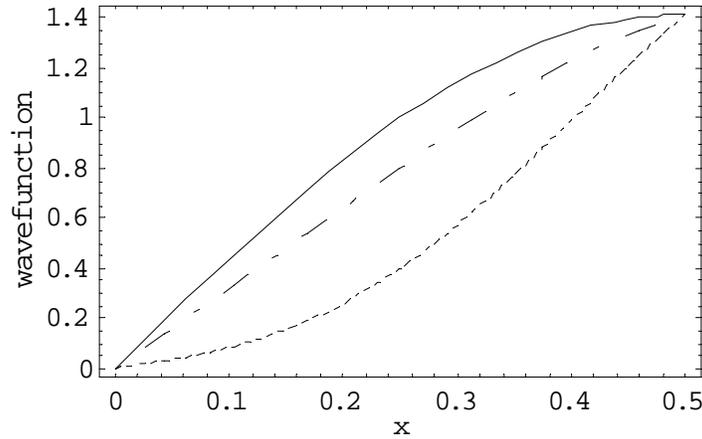
وبالتالي نجد:

$$\begin{aligned}
 |a\rangle &= -\frac{\frac{4C}{3\pi}}{4E_1^{(0)} - E_1^{(0)}} |2^{(0)}\rangle = -\frac{4}{9} \frac{C}{\pi E_1^{(0)}} |2^{(0)}\rangle \\
 &= -\frac{4}{9} \frac{C}{\pi E_1^{(0)}} \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)
 \end{aligned}$$

ولرسم الدالة الكلية المضطربة $|\psi\rangle = |1^{(0)}\rangle + |a\rangle$ في المدى المعرف للاضطراب فقط وهو $\{0, L/2\}$ ومقارنتها بالدالة الحقيقية:

$$|1^{(0)}\rangle = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

تم وضع $\frac{C}{E_1^{(0)}} = 1$ ويعنى أن الاضطراب C يتساوى مع الطاقة المميزة للمستوى الأرضي وللتبسيط بالرسم استخدمنا $L = 1$. بالرسم التالي، المنحني ذو الخط المستمر يعبر عن الدالة الحقيقية والمنحني ذو الخط المتقطع يعبر عن الدالة المضطربة. والشكل يوضح جلياً مدى تأثير الاضطراب على الدالة. والرسم أيضاً يحتوى على الحالة $\frac{C}{E_1^{(0)}} = 3$ (للخط المنقط) ومنها نجد أن الفرق بين الدالتين يزداد بزيادة النسبة $\frac{C}{E_1^{(0)}}$ وينعدم عندما تؤول هذه النسبة للصفر، كما هو متوقع.



مثال ٢, ٤: احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لطاقة المستوى الأرضي ($n = 1$) لجسيم بداخل جهد يعطي كما بالشكل:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ C(x/L) & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

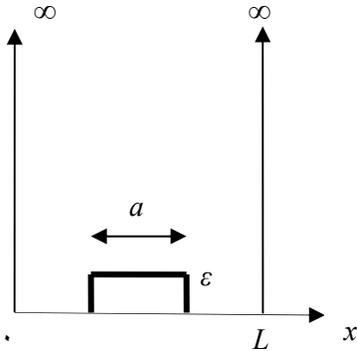
الحل: نعلم أن الحل الصفري العام للدالة المميزة و الطاقة المصاحبة لها لجسيم بداخل صندوق جهد بدون اضطراب هو:

$$\begin{aligned} |n^{(0)}\rangle &= \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(k_n x), & k_n &= \frac{n\pi}{L} \\ E_n^{(0)} &= n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\right) = n^2 E_1^{(0)}, & n &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

وباعتبار أن الاضطراب هو $\hat{H}' = C(x/L)$ ويؤثر في المدى $0 \leq x < L$ فقط، لذلك فإن التعديل الأول للطاقة هو:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \langle 1^{(0)} | \hat{H}' | 1^{(0)} \rangle = \left(\frac{2}{L}\right) \frac{C}{L} \int_0^L x \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx \\ &= \left(\frac{2}{L}\right) \frac{C}{L} \left(\frac{L}{2}\right)^2 = \frac{C}{2} \end{aligned}$$

واجب منزلي: احسب وارسم التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي.



مثال ٣، ٤: احسب التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع للطاقة لجسيم بداخل جهد يعطي بالشكل المرافق:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < \frac{1}{2}(L-a) \\ \varepsilon & \frac{1}{2}(L-a) < x < \frac{1}{2}(L+a) \\ 0 & \frac{1}{2}(L+a) < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

الحل: نعلم أن الحل الصفري العام للدالة المميزة والطاقة المصاحبة لها لجسيم بداخل صندوق جهد بدون اضطراب هو:

$$\begin{aligned} |n^{(0)}\rangle &= \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(k_n x), & k_n &= \frac{n\pi}{L} \\ E_n^{(0)} &= n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\right) = n^2 E_1^{(0)}, & n &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

باعتبار أن الاضطراب هو $\hat{H}' = \varepsilon$ ويؤثر في المدى $\frac{1}{2}(L-a) < x < \frac{1}{2}(L+a)$ فقط، لذلك فإن التعديل الأول للطاقة هو:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle = \left(\frac{2}{L}\right) \varepsilon \int_{\frac{1}{2}(L-a)}^{\frac{1}{2}(L+a)} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \\ &= \varepsilon \left\{ \frac{a}{L} - (-1)^n \frac{1}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi a}{L}\right) \right\} \end{aligned}$$

باستخدام القيم العددية $L=1$ m ، $a=0.1$ m و $\hbar=1$ نجد أن التعديل الأول مقارنة بطاقة المستويات الأولى كما هو موضح بالجدول:

n	$E_n^{(0)}$	ϵ_1
1	9.8696	0.1984 ϵ
2	39.4784	0.0065 ϵ

نلاحظ هنا أن التعديل كبير نسبياً للمستوى الأول حيث أن الاضطراب في منتصف الصندوق والدالة المميزة للمستوى الأول تبلغ قيمتها بالمنتصف ولهذا أصبح الاضطراب مؤثراً. والعكس هنا صحيح بالنسبة للمستوى الثاني حيث أن دالتها المميزة تنعدم بمنتصف الصندوق.

واجب منزلي: احسب وارسم التصحيح من الدرجة الأولى المتوقع لدالة المستوى الأرضي.

مثال ٤, ٤: احسب التصحيح الأولى لطاقة المستوى الأرضي ($n=0$) للمتذبذب التوافقي الخطي إذا وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير يعرف بالعلاقة $\hat{H}' = ax^3 + bx^4$, حيث a و b ثوابت.

الحل: التصحيح الأولى لطاقة المستوى الأرضي للمتذبذب التوافقي الخطي تحسب بالمعادلة:

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | ax^3 + bx^4 | n^{(0)} \rangle \\ &= a \underbrace{\langle n^{(0)} | x^3 | n^{(0)} \rangle}_{\epsilon_{11}} + b \underbrace{\langle n^{(0)} | x^4 | n^{(0)} \rangle}_{\epsilon_{12}}\end{aligned}$$

وهنا سوف نستفيد من نتائج الباب الأول حيث أن التكامل:

$$\epsilon_{11} = a \langle n | x^3 | n \rangle = 0,$$

وبالتالي فإن:

$$\epsilon_1 = \epsilon_{12} = b \langle n | x^4 | n \rangle = b \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (6n^2 + 6n + 3) = 3b \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2$$

مثال ٤, ٥: اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربائي E باتجاه المحور x بحيث أن $\hat{H}' = -qEx$. احسب التصحيح المتوقع.

الحل: باستخدام نتائج الباب الأول نجد أن المصفوفة:

$$\hat{H}_{mn}^{(1)} = -qE \langle m | x | n \rangle = -qE \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right]$$

لها قيمة غير صفرية بتحقق الشرط $m = n \pm 1$ فقط، وبالتالي فإن التصحيح الأول والذي يعطي بالمعدلة:

$$\epsilon_1 = \hat{H}_{nn}^{(1)} = -qE \langle n | x | n \rangle$$

سوف يندم. وحيث أن التعديل الأول قد انعدم فإننا نلجأ لحساب التصحيح الثاني والذي يعطي (مع ملاحظة أن $E_{n\pm 1} - E_n = \pm \hbar\omega$)

$$\begin{aligned} \epsilon_2 &= - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{|\langle n^{(0)} | \hat{H}' | m^{(0)} \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} = -q^2 E^2 \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{|\langle m^{(0)} | x | n^{(0)} \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= -q^2 E^2 \left\{ \frac{|\langle n-1 | x | n \rangle|^2}{E_{n-1} - E_n} + \frac{|\langle n+1 | x | n \rangle|^2}{E_{n+1} - E_n} \right\} \\ &= -q^2 E^2 \left\{ \frac{\frac{\hbar}{2m\omega} (\sqrt{n})^2}{-\hbar\omega} + \frac{\frac{\hbar}{2m\omega} (\sqrt{n+1})^2}{\hbar\omega} \right\} \\ &= -q^2 E^2 \left\{ \frac{1}{2m\omega^2} [(n+1) - n] \right\} = -\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

والتصحيح من الدرجة الأولى والمتوقع لدالة المستوى الأرضي تحسب من المعادلة (مع تحقق الشرط
: $(m = n \pm 1)$

$$\begin{aligned}
 |a\rangle &= -\sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H} | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} = qE \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | x | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\
 &= qE \left\{ |(n-1)^{(0)}\rangle \frac{\langle (n-1)^{(0)} | x | n^{(0)} \rangle}{E_{n-1} - E_n} + |(n+1)^{(0)}\rangle \frac{\langle (n+1)^{(0)} | x | n^{(0)} \rangle}{E_{n+1} - E_n} \right\} \\
 &= qE \left\{ |(n-1)^{(0)}\rangle \frac{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n}}{-\hbar\omega} + |(n+1)^{(0)}\rangle \frac{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1}}{\hbar\omega} \right\} \\
 &= \frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left\{ \sqrt{n+1} |(n+1)^{(0)}\rangle - \sqrt{n} |(n-1)^{(0)}\rangle \right\}
 \end{aligned}$$

وتصبح الدالة الكلية بالشكل:

$$|\psi\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{qE}{\omega} \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \left\{ \sqrt{n+1} |(n+1)^{(0)}\rangle - \sqrt{n} |(n-1)^{(0)}\rangle \right\}$$

ملحوظة: للتأكد من صحة الحل \in_2 دعونا نقارنه بالحل الصحيح والذي يحسب كالتالي: باستخدام التعويض

$$\hat{y} = \hat{x} - \frac{qE}{m\omega^2}$$

يتحول الهاملتونيان للمتذبذب التوافقي الخطي إلى الصورة المعدلة:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{y}^2 - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}$$

وله القيمة المميزة:

$$E_n = \langle n | \hat{H} | n \rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \in_2$$

والدالة المميزة:

$$\psi_n(y) = \psi_n\left(x - \frac{qE}{mw^2}\right)$$

مثال ٤, ٦ : باستخدام النظرية النسبية الخاصة وجد أن المؤثر الهملتوني لذرة الهيدروجين (مع إهمال كمية الحركة للنواة) يعطي بالعلاقة:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}' = -\frac{\hat{P}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{2m_e c^2} \left(\frac{\hat{P}^2}{2m_e} \right)^2$$

استخدم طريقة الاضطراب لحساب التصحيح الأول للذرات الشبيهة بالهيدروجين.

الحل: لذرة الهيدروجين نستطيع أن نستخدم العلاقة:

$$\hat{H}_o = -\frac{\hat{P}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} = E_n^{(0)} \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hat{P}^2}{2m_e} = E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r}$$

حيث $E_n^{(0)} = -\frac{Z^2}{n^2} \text{ Ry}$ هو القيمة المميزة للمؤثر \hat{H}_o . لذلك فإن التصحيح الأول يحسب بالمعادلة:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \langle nlm | \hat{H}' | nlm \rangle = -\frac{1}{2m_e c^2} \langle nlm | \left(\frac{\hat{P}^2}{2m_e} \right)^2 | nlm \rangle \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \langle nlm | \left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r} \right) \left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r} \right) | nlm \rangle; \end{aligned}$$

وباستخدام التعويض عن المؤثرات:

$$\left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r} \right) \left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r} \right) = E_n^{(0)2} + E_n^{(0)} \frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{r} E_n^{(0)} + \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^2$$

نجد أن التصحيح الأول يتكون من أربع حدود وهي:

$$\epsilon_1 = -\frac{1}{2m_e c^2} [\langle nlm | E_n^{(0)2} | nlm \rangle + (Ze^2 \langle nlm | E_n^{(0)} \frac{1}{r} | nlm \rangle + \langle nlm | \frac{1}{r} E_n^{(0)} | nlm \rangle) + (Ze^2)^2 \langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle]$$

والآن بالنظر لكل حد على حدة نجد أن الحد الأول يعطي:

$$\langle nlm | E_n^{(0)2} | nlm \rangle = (E_n^{(0)})^2 \delta_{m'm}$$

الحدان الثاني والثالث يعطيان:

$$\langle nlm | E_n^{(0)} \frac{1}{r} | nlm \rangle = \langle nlm | \frac{1}{r} E_n^{(0)} | nlm \rangle = E_n^{(0)} \langle nl | \frac{1}{r} | nl \rangle \delta_{m'm}$$

والحد الرابع يعطي:

$$\langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle = \langle nl | \frac{1}{r^2} | nl \rangle \delta_{m'm}$$

لنصل إلى النتيجة النهائية وهي:

$$\epsilon_1 = -\frac{(E_n^{(0)})^2}{2m_e c^2} - \frac{Ze^2}{m_e c^2} E_n^{(0)} \langle nl | \frac{1}{r} | nl \rangle - \frac{(Ze^2)^2}{2m_e c^2} \langle nl | \frac{1}{r^2} | nl \rangle$$

وبالنسبة للذرات الشبيهة بالهيدروجين نعلم أن (راجع الباب الخامس بالكتاب الأول):

$$\langle nl | \frac{1}{r} | nl \rangle = \frac{Z}{a_o} \frac{1}{n^2} \text{ Ry},$$

$$\langle nl | \frac{1}{r^2} | nl \rangle = \left(\frac{Z}{a_o} \right)^2 \frac{1}{n^3 (l + \frac{1}{2})} \text{ Ry}$$

ولهذا فإن:

$$\epsilon_1 = E_n^{(0)} Z^2 \alpha^2 \left[\frac{3}{4n^2} + \frac{1}{n(l + \frac{1}{2})} \right] \text{Ry}$$

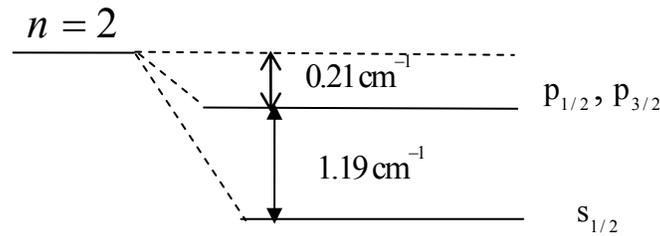
حيث استخدمنا ثابت التركيب الدقيق $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ (fine structure constant) , انظر الملحق (A).
و بوحدات هارترى نجد أن:

$$\epsilon_1 = \frac{Z^4}{2n^3} \alpha^2 \left[\frac{3}{4n} + \frac{1}{(l + \frac{1}{2})} \right] \text{Hartree}$$

نلاحظ هنا أن التصحيح ϵ_1 يزداد بزيادة العدد الذري Z ولذلك فهو ذو أهمية خاصة للذرات ذات الشحنات العالية. ويطبق التصحيح لجميع قيم $l = 0, 1, \dots$.

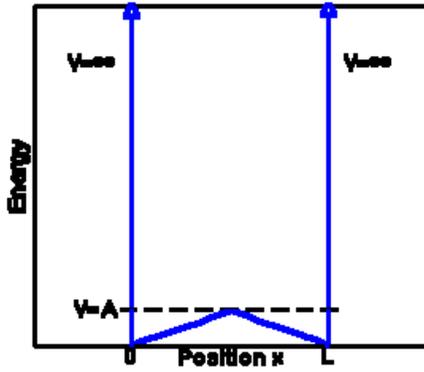
مثال ٤,٧: إدرس تأثير التصحيح الأول للنظرية النسبية الخاصة على المستوي $n = 2$ لذرة الهيدروجين.

الحل: نعلم أن المستوي $n = 2$ يتكون من مستويين فرعيين وهما $s \equiv (l = 0)$ و $p \equiv (l = 1)$ ولهذا نجد أن الإنقسام يحدث بالشكل التالي:



ملاحظة: الملحق (A) يعطي العلاقة $1 \text{ Hartree} = 2.195 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$.

تمارين عامة



١- جسيم محصور في صندوق لانتهائي الجهد ذو بعد واحد طولهُ L اثر عليه باضطراب بشكل مثلث (كما هو موضح بالشكل المرافق) معطي كالآتي:

$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} Ax & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ A(L-x) & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}$$

حيث A ثابت و $A \ll 1$. للمستوى الأرضي ($n=1$) تأكد من النتائج التالية:

$$. \epsilon_1 = \frac{AL(4 + \pi^2)}{4\pi^2} . \text{ أ.}$$

. ب.

$$\begin{aligned} \langle m^{(0)} | \hat{H}' | 1^{(0)} \rangle &= -\frac{AL}{\pi^2} \quad \text{if } m = \text{odd} \\ &= 0 \quad \text{if } m = \text{even} \end{aligned}$$

بالتالي للقيمة $m=3$

$$|a\rangle = -\frac{\frac{AL}{\pi^2}}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} |3^{(0)}\rangle = \frac{AL}{8\pi^2 E_1^{(0)}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)$$

$$\epsilon_2 = -\frac{\left(-\frac{AL}{\pi^2}\right)^2}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} = -\frac{A^2 L^2}{8\pi^4 E_1^{(0)}} . \text{ ت.}$$

في التمارين الآتية اعتبر أنه في حالة أن الجسم المحصور في صندوق لانتهائي الجهد ذو بعد واحد طوله $2L$ يعطي بالشكل:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } -L \leq x \leq +L \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

وإن الدوال الغير مضطربة تعطي بالشكل:

$$\psi(x) = |n^{(0)}\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) & \text{for } n = \text{even integer} \\ \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{2L}x\right) & \text{for } n = \text{odd integer} \end{cases}$$

$$E_n^{(0)} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2L)^2} = n^2 E_1^{(0)} \text{ : والطاقة المميزة لهم هي:}$$

٢- جسم محصور في صندوق لانتهائي الجهد ذو بعد واحد طوله $2L$ اثر عليته بالاضطراب:

$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{\pi x}{2L}\right) & \text{for } -L \leq x \leq L \\ 0 & \text{for } L < x < -L \end{cases}$$

حيث A ثابت و $A \ll 1$. للمستوى الأرضي ($n=1$) تأكد من النتائج التالية:

$$\text{أ- } \epsilon_1 = 0$$

$$\text{ب- } |a\rangle = \frac{A/2}{1^2 E_1^{(0)} - 2^2 E_1^{(0)}} |2^{(0)}\rangle$$

$$\text{ت- } \epsilon_2 = \frac{(A/2)^2}{1^2 E_1^{(0)} - 2^2 E_1^{(0)}} = -\frac{A^2}{12 E_1^{(0)}}$$

٣- جسيم محصور في صندوق لانهاى الجهد ذو بعد واحد طوله L اثر عليه باضطراب بالمركز معطى كالآتى:

$$\hat{H}'(x) = \begin{cases} A \delta(x - \frac{L}{2}) & \text{for } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{for } L < x < 0 \end{cases}$$

حيث A ثابت و $A \ll 1$. للمستوى الأرضي ($n = 1$) تأكد من النتائج التالية:

أ-

$$\epsilon_1 = \langle 1^{(0)} | \hat{H}' | 1^{(0)} \rangle = \frac{2A}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \delta(x - \frac{L}{2}) dx = \frac{2A}{L} \sin^2\left(\frac{\pi L}{2L}\right) = \frac{2A}{L}$$

ب-

$$\langle m^{(0)} | \hat{H}' | 1^{(0)} \rangle = \begin{cases} \frac{2A}{L} & \text{if } m = \text{odd} \\ 0 & \text{if } m = \text{even} \end{cases}$$

بالتالى للقيمة $m = 3$

$$|a\rangle = -\frac{\frac{2A}{L}}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} |3^{(0)}\rangle$$

$$\epsilon_2 = -\frac{(2A/L)^2}{3^2 E_1^{(0)} - 1^2 E_1^{(0)}} = -\frac{A^2}{2L^2 E_1^{(0)}} \quad \text{ت-}$$

ملحق (4 .A)

ذرة الهيليوم باستخدام طريقة الاضطراب

Helium Atom Using Perturbation Theory

لقد تم سابقاً حساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيليوم باستخدام طريقة التغيرات بالملحق (3 .A). وفي هذا الملحق سوف نقوم بحساب طاقة أدنى مستوى لذرة الهيليوم باستخدام نظرية الاضطراب. كما لاحظنا سابقاً فإن الهملتونيان لذرة الهيليوم (باستخدام الوحدات الذرية واعتبار أن النواة ساكنة) يكتب بالصورة:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = \hat{H}_o + \hat{H}'$$

حيث $Z = 2$ لذرة الهيليوم والهملتونيان الغير مضطرب هو:

$$\hat{H}_o = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2}$$

والهملتونيان $\hat{H}' = \frac{1}{r_{12}}$ المسئول عن الاضطراب هو الجهد الكولمي لتفاعل الإلكترون الأول مع

الإلكترون الثاني. والدالة المميزة الغير مضطربة $|\psi_n^{(0)}\rangle$, مع إهمال الدوران المغزلي, هي حل معادلة

شرودنجر $\hat{H}_o |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$ وتأخذ الشكل:

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \psi_{1s}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)$$

حيث $\psi_{1s}(r_i) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr_i}$ هي الدالة المميزة لإلكترون ذرة الهيدروجين بالمستوى الأرضي. ونحن

نعلم أيضاً من دراستنا السابقة (راجع الباب الخامس بكتابتنا الأول) أن معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين (بالوحدات الذرية) تأخذ الشكل:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} \right) \psi_{1s}(r) = -\frac{Z^2}{2} \psi_{1s}(r)$$

وبالتالي فإن

$$E_1^{(0)} = -\frac{Z^2}{2} - \frac{Z^2}{2} = -Z^2 \text{ Hartree}$$

والتصحيح من الدرجة الأولى للطاقة ϵ_1 يحسب بالمعادلة (أنظر الملحق B):

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle = \frac{Z^6}{\pi^2} \iint e^{-Z(r_1+r_2)} \frac{1}{r_{12}} e^{-Z(r_1+r_2)} dr_1 dr_2 \\ &= \frac{Z^6}{\pi^2} \iint \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}} dr_1 dr_2 \\ &= \frac{5}{8} Z \text{ Hartree} \end{aligned}$$

وبالتالي فإن طاقة أدنى مستوى ذرة الهليوم للمرتبة الأولى تكون:

$$\begin{aligned} E &= E_1^{(0)} + \epsilon_1 = -Z^2 + \frac{5}{8} Z \\ &= -\frac{11}{4} = -2.750 \text{ Hartree.} \end{aligned}$$

وهي قيمة تقل 5% عن القيمة العملية -2.9033 Hartree .

ونلاحظ هنا التالي:

أ- أن طريقة الاضطراب أعطت قيمة قريبة من القيمة العملية بالرغم من الصيغة المبسطة للدالة المقترحة. وباستخدام التصحيحات من الدرجات الأعلى نستطيع الحصول على قيمة قريبة جداً من القيمة العملية ولكن مع الكثير من التعقيدات الرياضية (انظر الجدول التالي).

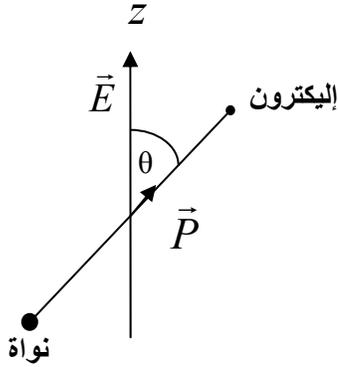
طريقة	طاقة المستوى الأرضي
إهمال الحد \hat{H}'	-4.00 H
التصحيح من الدرجة الأولى	-2.750 H
التصحيح من الدرجة الثانية	-2.910 H
التصحيح من الدرجة الثالثة عشر	-2.90372433 H

ب- بالرغم من أن الاختلافات في حساب الطاقة للمستوى الأرضي تعتبر مقبولة ولكن هذا الاختلاف البسيط يعتبر كبيراً بالنسبة إلى قيمة شدة الروابط الكيميائية. ولذلك يلجأ إلى طرق أخرى تعتمد على الحسابات العددية باستخدام الكمبيوتر.

ملحق (4.B)

ظاهرة شتارك الخطية

Linear Stark effect



دُرست هذه الظاهرة بواسطة العالم شتارك في عام ١٩١٣، حيث تمت ملاحظة انقسام المستويات الأولية للذرات الشبيهة بالهيدروجين نتيجة تأثير مجال كهربي \vec{E} خارجي ثابت وصغير (باتجاه المحور z فرضاً) مع إهمال الدوران المغزلي للإلكترون. وتعرف طاقة التفاعل (بين المجال الكهربي والذرة) المسئولة عن الاضطراب بالمؤثر

$$\hat{H}' = \vec{P} \cdot \vec{E} = e\vec{r} \cdot \vec{E} = e|E|r \cos \theta$$

حيث $\vec{P} = e\vec{r}$ هو عزم ثنائي القطب الكهربي (electric dipole moment)، \vec{r} هي المسافة بين نواة الذرة (والتي لها العدد الذري Z) والإلكترون، e هي شحنة الإلكترون و θ هي الزاوية المحصورة بين المتجهين \vec{P} و \vec{E} . من المهم الأخذ في الاعتبار أن \hat{H}' لا يعتمد على الدوران المغزلي للإلكترون وخصوصاً للسرعات الغير نسبية.

ويأخذ الهملتونيان الكلي للإلكترون الصورة:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + e|E|r \cos \theta$$

حيث m_e هي كتلة الإلكترون. وسوف نتعامل هنا مع دالة شرودنجر المميزة للذرات الشبيهة لذرة الهيدروجين في الإحداثيات الكروية بالصورة:

$$\Psi \equiv \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{l, m_l}(\theta, \varphi) = |n, l, m_l\rangle$$

I- بالنسبة للمستوى الأرضي ($n=1$) نجد أن $l=0$ و $m_l=0$ ويعبر عنه بالدالة:

$$\psi_{1s}(r, \theta, \varphi) \equiv |n, l, m_l\rangle \equiv |1, 0, 0\rangle = R_{10} Y_{00}(\theta, \varphi) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

وحيث أن التعددية (multiplicity) تساوي الوحدة ($d_l = 2l + 1 = 1$) لذلك فإن هذا المستوى منفرد (لا ينقسم) (وذلك بإهمال الحركة المغزلية). ولأن الدالة المميزة هي دالة زوجية وبالتالي فإن التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة \in_1 يؤول للصفر تبعاً للمعادلة:

$$\begin{aligned} \in_1 &= \langle i | \hat{H} | i \rangle = e |E| \langle 1, 0, 0 | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle \\ &= e |E| \int \psi_{1s}^* r \cos \theta \psi_{1s} d\tau \\ &= e |E| \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{1s}^* r \cos \theta \psi_{1s} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 0 \end{aligned}$$

وقد استخدمنا بالتكامل عنصر الحجم ($d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$) بالإحداثيات الكروية. القيمة $\in_1 = 0$ معناها أن طاقة المستوى الأرضي لن تتأثر بالاضطراب (المجال الكهربائي الخارجي) وبالتالي لن يظهر أي تصحيح (انقسام للمستوى) من الدرجة الأولى، انظر الشكل 4.1.

$$n = 1 \quad \begin{array}{c} l = 0, m_l = 0 \\ \hline m_l = 0 \end{array}$$

بدون مجال كهربائي

تأثير المجال الكهربائي

شكل 4.1 : عدم تأثر (انقسام) المستوى الأول ($n=1$) لذرة الهيدروجين نتيجة لظاهرة شتارك الخطية.

وحيث أن التصحيح من الدرجة الأولى \in_1 قد انعدم فيجب أن نلجأ للتصحيح من الدرجة الثانية \in_2 . وسوف يترك هذا التصحيح كواجب منزلي بنهاية الملحق.

II- للمستوي المثار الأول ($n = 2$) نجد أن $l = 0, 1$ وبالتالي فإن التعددية تعطي العدد $1 + 3 = 4$ ولذلك فهو مستوى رباعي الطي (fourthfold degenerate)، و دواله الأربعة المميزة هي (وللتبسيط فقط سوف نستعمل الدالة بالشكل $|l, m_l\rangle$ بدون العدد الكمي $n = 2$):

$$\begin{aligned} |2_1^{(0)}\rangle &= |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\ |2_2^{(0)}\rangle &= |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \cos \theta \\ |2_3^{(0)}\rangle &= |1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ |2_4^{(0)}\rangle &= |1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{i\varphi} \end{aligned}$$

بالتالي فإن المحدد العام سيحتوي على ١٦ تكاملاً! كما هو واضح بالمصفوفة التالية:

$$\begin{vmatrix} \langle 0, 0 | & \langle 1, 0 | & \langle 1, -1 | & \langle 1, 1 | \\ H_{11} - \epsilon_1 & H_{12} & H_{13} & H_{14} \\ H_{21} & H_{22} - \epsilon_1 & H_{23} & H_{24} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - \epsilon_1 & H_{34} \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} - \epsilon_1 \end{vmatrix} = 0$$

حيث عناصر المصفوفة H_{ij} تعرف كالتالي:

$$H_{ij} = \langle 2_i^{(0)} | \hat{H} | 2_j^{(0)} \rangle$$

ولكن لاداعي للجزع، لأنه بنظرة متأنية لخواص الدوال المميزة للمستوى المثار الأول ($n = 2$) نجد أن ١٤ من هذه التكاملات تؤول للصفر! كيف؟

دعونا نستعرض أولاً التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة ϵ_1 بالصورة:

$$H_{ik} = \langle i | \hat{H} | k \rangle = e |E| \langle r, \theta, \varphi | r \cos \theta | r, \theta, \varphi \rangle = e |E| I_r I_\theta I_\varphi$$

والذي له الخواص التاليه:

أ- التكامل للزاوية φ يعطي:

$$I_{\varphi} = \int_0^{\varphi} e^{-im\varphi} e^{ik\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{mk} = 2\pi \times \begin{cases} 0 & \text{if } m \neq k \\ 1 & \text{if } m = k \end{cases}$$

ومنه نجد أن التكاملات الآتية تتساو بالصفر:

$$H_{13} = H_{31} = H_{14} = H_{41} = H_{23} = H_{32} = H_{24} = H_{42} = H_{34} = H_{43} = 0$$

ب- وعندما $m = m'$ و $l = l'$ نجد أن التكامل للزاوية θ يعطي:

$$I_{\theta} = \int_0^{\pi} P_{lm}(\cos\theta) \cos\theta P_{lm}(\cos\theta) \sin\theta d\theta$$

وباستخدام التعويض $x = \cos\theta$ نجد أن:

$$I_{\theta} = \int_{-1}^1 |P_{lm}(x)|^2 x dx = 0$$

حيث أن $|P_{lm}(x)|^2$ هي دالة زوجية للمتغير x . ومنه نجد أن التكاملات الآتية تتساو بالصفر:

$$H_{11} = H_{22} = H_{33} = H_{44} = 0$$

ويصبح المحدد العام بالصورة:

$$\begin{array}{cccc} |0,0\rangle & |1,0\rangle & |1,-1\rangle & |1,1\rangle \\ \langle 0,0| & -\epsilon_1 & H_{12} & 0 & 0 \\ \langle 1,0| & H_{21} & -\epsilon_1 & 0 & 0 \\ \langle 1,-1| & 0 & 0 & -\epsilon_1 & 0 \\ \langle 1,1| & 0 & 0 & 0 & -\epsilon_1 \end{array} = 0$$

والحل العام للمعادلة السابقة هو $|H_{12}|$ ، $\epsilon_1 = 0, 0, \pm$ حيث:

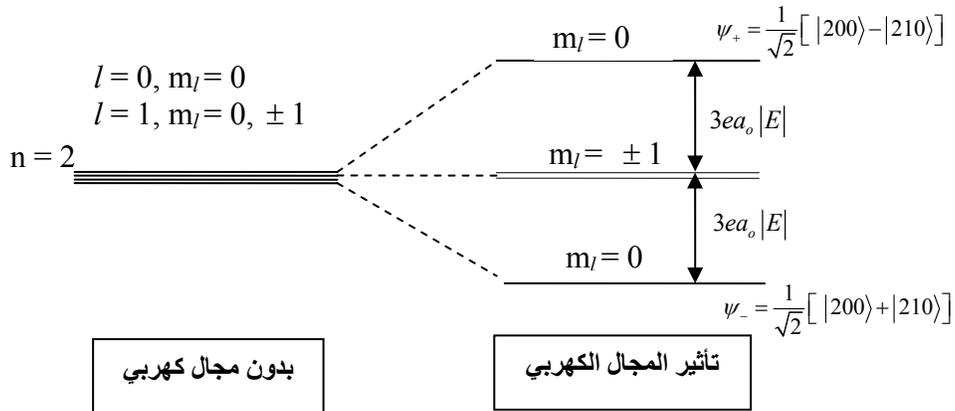
$$H_{12} = H_{21} = \langle 1, 0 | \hat{H}' | 0, 0 \rangle = e |E| \langle 1, 0 | r \cos \theta | 0, 0 \rangle$$

$$= \frac{e |E| Z^3}{16\pi a_o^3} \underbrace{\int_0^\infty dr r^3 \left(\frac{Zr}{a_o}\right) \left(1 - \frac{Zr}{2a_o}\right) e^{-Zr/a_o}}_{\frac{36a_o^4}{Z^4}} \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta}_{2/3} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} = -3a_o e |E| / Z$$

وبالتالي فإن التصحيح من الدرجة الأولى للطاقة ϵ_1 (وهو حل معادلة المحدد العام) يأخذ القيم:

$$\epsilon_1 = 0, 0, \pm 3a_o e |E| / Z$$

وهذا معناه ببساطة أن المجال الكهربائي الخارجي قد أزال جزئياً بعض من صفة الانتماء للمستوى المثار الأول (أنظر الشكل 4.2). من الشكل 4.2 نجد أن الانقسام قد تم للدوال التي لها قيم l مختلفة ($l=0$ و $l=1$) ومتساويان في القيمة ($m_l=0$). المستويات للقيم $l=1$ و ($m_l = \pm 1$) تظل ثنائية الطي (أي لا تنقسم).



شكل 4.2 : انقسام المستوى المثار الأول ($n = 2$) لذرة الهيدروجين نتيجة لظاهرة شتارك الخطية.

ولإيجاد الدوال المميزة، يتوجب علينا الرجوع إلى المعادلة:

$$\begin{pmatrix} -\epsilon_1 & H_{12} \\ H_{12} & -\epsilon_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

وباستخدام القيمة $\epsilon_1 = -3a_0e|E|$ نجد أن $c_1 = c_2$ والدالة المميزة المعيرة والمقابلة لها هي:

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} [|200\rangle + |210\rangle]$$

والجزر الثاني $\epsilon_1 = 3a_0e|E|$ يعطي $c_1 = -c_2$ والدالة المميزة المعيرة والمقابلة لها هي:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} [|200\rangle - |210\rangle]$$

ملاحظات:

٢- ظاهرة شتارك الخطية تعتمد أساساً على انقسام المستويات المختلفة نتيجة تأثير المجال الكهربائي الخارجي. هذا الانقسام ناتج من الصفة الخاصة للجهد الكولومي، وبالتالي، فهو يطبق فقط على ذرة الهيدروجين.

٣- الانقسام ليس انقساماً كاملاً لجميع قيم الأعداد الكمية l و m_l ولكنه انقسام جزئي متماثل. ويظل المستوى ($m_l = \pm 1$) ثنائي الطي، انظر الشكل 2.4.

٤- المستويات المنقسمة لن تصبح دوال ذاتية للمؤثر \hat{L}^2 ولكنها مازالت دوال ذاتية للمؤثر \hat{L}_z . وهذا معناه أن الاضطراب البسيط قد غير من شكل الهملتونيان بحيث أصبح غير متلازم مع \hat{L}^2 وهذا ناتج من أن المجال الكهربائي يأخذ اتجاه معين (اتجاه المحور z فرضاً) وبالتالي فإن النظام لن يصبح متماثلاً مع أي دوران اختياري ولكن سيظل متماثلاً مع الدوران حول المحور z فقط وبالتالي ستظل \hat{L}_z متلازمة مع الهملتونيان الكلي.

واجب منزلي: اثبت أن:

$$\hat{L}^2 \psi_{\pm} \neq \lambda \psi_{\pm}, \quad \hat{L}_z \psi_{\pm} = m_l \psi_{\pm}, \quad [\hat{L}^2, \hat{H}] \neq 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$$

٥- تطابقت النتائج النظرية التي تم الحصول عليها بناء على أساس التقريب الخطي بشكل جيد مع نتائج التجارب العملية في المجالات الكهربائية الضعيفة فقط ($|E| \ll 10^4$ V/cm) وعندما يبلغ المجال الكهربائي القيمة ($|E| \approx 10^5$ V/cm) يظهر انقسام إضافي. ولا يلاحظ مفعول شتارك في المجالات التي تزيد عن (10^5 V/cm) وهذا ناتج من تأين الذرات (بمعنى انفصال الإلكترون عن الذرة).

واجب منزلي: ناقش وارسم المستويات (وبدون حل التكاملات) لتطبيق ظاهرة شتارك من الدرجة الأولى للمستوى ($n=3$).

واجب منزلي: احسب التصحيح من الدرجة الثانية ϵ_2 لظاهرة شتارك للمستوى ($n=1$) لذرة الهيدروجين.

الحل: نبدأ بتعريف التصحيح من الدرجة الثانية كالتالي:

$$\epsilon_2 = e^2 |\mathbf{E}|^2 \sum_{nlm \neq 1,0,0} \frac{|\langle n, l, m | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

حيث ($d\tau = r^2 dr d\Omega$) والبسط يحسب كالتالي:

$$\langle n, l, m | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle = \int R_{nl}^* Y_{lm}^* (r \cos \theta) R_{10} Y_{00} d\tau$$

وباستخدام العلاقة:

$$Y_{00} \cos \theta = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10}$$

نجد أن

$$\langle n, l, m | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty r^3 dr \underbrace{R_{nl}^* R_{10}}_{a_0 \sqrt{\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}}} \underbrace{\int Y_{lm}^* Y_{10} d\Omega}_{\delta_{l,1} \delta_{m,0}}$$

ويأخذ البسط الشكل:

$$|\langle n, l, m | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle|^2 = \frac{1}{3} \frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} a_0^2 \equiv f(n) a_0^2$$

ويصبح التصحيح من الدرجة الثانية بالشكل:

$$\begin{aligned} \epsilon_2 &= e^2 |\mathbf{E}|^2 \sum_{n=2} \frac{f(n) a_0^2}{-\frac{e^2}{2a_0} + \frac{e^2}{2a_0 n^2}} = -2a_0^3 |\mathbf{E}|^2 \sum_{n=2} \frac{f(n) n^2}{n^2 - 1} \\ &= -2a_0^3 |\mathbf{E}|^2 (0.74 + 0.10 + \dots) \approx -2(0.91) a_0^3 |\mathbf{E}|^2 \end{aligned}$$

وبالتالي فإن عزم ثنائي القطب الكهربائي المستحث (Induced electric dipole moment) نتيجة المجال الكهربائي الخارجي يحسب من العلاقة:

$$d = -\frac{\partial \epsilon_2}{\partial |\mathbf{E}|} = 4(0.91) a_0^3 |\mathbf{E}| = \alpha |\mathbf{E}|$$

حيث α هنا تعرف بالاستقطابية (Polarizability).

الباب الخامس

نظرية الاضطراب الزمنية

Time-Dependent Perturbation Theory

حتى الآن تجنبنا التعامل مع المؤثرات التي تحتوي على الزمن صراحةً. ذلك لسبب بسيط وهو أن محاولة إيجاد حل متكامل لمعادلة شرودنجر الزمنية يعتبر بعيد المنال. [إعتماد الهاملتونيان على الزمن لا نستطيع استخدام فصل المتغيرات للوصول إلى معادلة مميزة لها القيم والدوال الخاصة بها. وقد تعاملنا بكتابنا الأول (الباب الثاني) مع معادلة شرودنجر بالصورة:

$$\hat{H}(r)|x, t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|x, t\rangle$$

ومنه وجدنا بعد فصل المتغيرات أن:

$$|x, t\rangle = |x\rangle|t\rangle = |x\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

وبعد دراستنا للنظريات التقريبية نجد أنه بإضافة حدود صغيرة تعتمد على الزمن بالهاملتونيان فإننا نستطيع التعامل معه من خلال نظرية الاضطراب.

نظرية الاضطراب الزمنية من الطرق الملائمة والقوية لدراسة تفاعل المواد مع الطاقة (Interaction of radiation with matter) (مثل الإشعاعات الكهرومغناطيسية) والتي يظهر تأثيرها من خلال الفوتونات والالكترونات. هذه الإشعاعات لها ترددات مختلفة وبالتالي تتغير مع الزمن ولهذا نتعامل معها كاضطرابات زمنية. ونتيجة لهذه الاضطرابات الزمنية تصبح المستويات (الدوال) غير مستقرة. ولهذا تنتقل الإلكترونات من مستوي أعلى إلى مستوي أسفل عن طريق الانبعاث التلقائي (Spontaneous emission) أو عن طريق الانبعاث المحثوث (ألقسري) (Stimulated emission) وهو أساس لنظرية عمل الليزر. وتنتقل الإلكترونات من مستوي أسفل إلى مستوي أعلى عن طريق الامتصاص المحثوث (ألقسري) (Stimulated absorption).

ودرستنا في هذا الباب ترتكز على تأثير الاضطرابات الصغيرة فقط والتي تضاف إلى الهاملتونيان الابتدائي الغير معتمد على الزمن. وكما ذكرنا أننا عندما نتعامل مع مؤثر (هاملتونيان) يعتمد على الزمن صراحةً،

فإننا لن نحصل على حلول مستقرة (من ناحية الدوال والقيم المميزة)، بالتالي اختيارنا المعتادة والتي تعتمد على الدوال المميزة (حلول المعادلات المميزة) كأساس لمفكوك أي دالة مجهولة يصبح غير عملي. وللتغلب على هذه العقبة فقد اقترح العالم ديراك أن نستخدم الدوال المميزة كمفكوك للدوال الزمنية المجهولة ولكن مع استخدام معاملات (Coefficients) تعتمد على الزمن.

ولتوضيح نظرية الاضطراب الزمنية بمثال من الحياة اليومية نفترض أن الشمس تشرق عند الزمن t_0 . عند الزمن $t \leq t_0$ أي قبل شروق الشمس، تكون حالة السكون للأشخاص ولنفتراض أنها تعرف بالدالة الابتدائية $|\varphi_i\rangle$. عند الزمن $t > t_0$ ، أي بعد شروق الشمس، تكون حالة الحركة للأشخاص ولنفتراض أنها تعرف بالدالة النهائية $|\varphi_f\rangle$. بالتالي سوف نتعامل مع دالتين أساسيتين، الدالة الأولى الابتدائية وهي $|\varphi_i\rangle$ وتنتقل إلي (تترافق مع) الدالة الثانية النهائية $|\varphi_f\rangle$ نتيجة للمؤثر \hat{H} وهو هنا شروق الشمس. وهنا يظهر السؤال كالتالي: ماهو احتمالية الانتقال من المستوي الابتدائي $|\varphi_i\rangle$ إلى المستوى النهائي $|\varphi_f\rangle$ في وجود المؤثر \hat{H} ؟ و للإجابة على هذا السؤال، سوف نتبع الشرح التالي.

وللإجابة على السؤال السابق دعونا نبدأ هنا بالهملتونيان الكلي \hat{H} الذي يتكون من مجموع جزئين: الأول هو الهملتونيان الغير مضطرب \hat{H}_0 (وهو الجزء الممكن إيجاد حلاً كاملاً له تحليلياً) والثاني هو الجزء الصغير جداً والمسؤول عن الاضطراب \hat{H}' والذي يعتمد على الزمن بشكل واضح، بالتالي:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(t), \quad \hat{H}'(t) \ll \hat{H}_0 \quad (5.1)$$

وسنفترض وجود حل لمعادلة شرودنجر المميزة:

$$\hat{H}_0 |\varphi_k\rangle = E_k |\varphi_k\rangle \quad (5.2)$$

والتي تظهر كمعادلة زمنية بالشكل:

$$\hat{H}_0 |\psi_o\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_o\rangle \quad (5.3)$$

$$|\psi_o\rangle = \sum_k C_k^{(0)} e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle \quad (5.4)$$

حيث $C_k^{(0)}$ ثوابت لا تعتمد على الزمن، وأن الكمية $|C_k^{(0)}|^2$ تعبر عن احتمالية وجود النظام في المستوى المستقر k قبل بدأ الاضطراب. التجميع في المعادلة (5.4) يتم على جميع المستويات المنفصلة (discrete states) منها والمتصلة (contiuous states). وحيث أن الدوال $|\varphi_k\rangle$ يكونون مجموعة متكاملة، بالتالي فإن الحل العام لمعادلة شرودنجر العامة الزمنية:

$$\hat{H} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad (5.5)$$

بالإمكان وضعة بالصورة

$$|\psi\rangle = \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle, \quad \sum_k |C_k(t)|^2 = 1 \quad (5.6)$$

حيث افترضنا أن المعاملات $C_k(t)$ تعتمد على الزمن صراحةً. وإذا علمنا أن الدوال المميزة $|\varphi_k\rangle$ لهم خواص التعامد والمعايرة وأن الدالة $|\psi\rangle$ لها خواص المعايرة، فإننا نجد أن الكمية $|C_k(t)|^2$ تعبر عن احتمالية وجود النظام في الحالة (المستوى) k عند الزمن المحدد t و تدل $C_k(t)$ على السعة الاحتمالية. وبمقارنة المعادلتين (5.4) و(5.6) نلاحظ أنه مع استخدام الشرط $\hat{H}'(t) = 0$ فإن المعامل الزمني $C_k(t)$ يؤول إلى الثابت $C_k^{(0)}$. ولهذا نعتبره قيمة ابتدائية (شرط ابتدائي) للمعامل $C_k(t)$.

نلاحظ هنا تحولاً جذرياً بالمسألة فبدلاً من إيجاد قيم ودوال مميزة لمعادلة شرودنجر المميزة (5.5) فإننا نبحث عن إيجاد قيم المعاملات $C_k(t)$. ولحل هذه المعضلة نقوم بالتعويض بالمعادلة (5.6) في المعادلة (5.5) مع استخدام (5.1) و(5.2) نجد:

واجب منزلي: باستخدام المعادلة:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle = (\hat{H}_o + \lambda \hat{H}') \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle \quad (5.7)$$

اثبت أن:

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} = \sum_k C_k(t) \lambda \hat{H}'(t) |\varphi_k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} \quad (5.8)$$

$$\dot{C}_k(t) = \frac{dC_k(t)}{dt} \text{ حيث استخدمنا}$$

الحل:

الطرف الأيسر من المعادلة (5.7) يعطي:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle = i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle + i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_k C_k(t) E_k e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle$$

الطرف الأيمن من المعادلة (5.7) يعطي:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_o + \lambda \hat{H}') \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle &= \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \hat{H}_o |\varphi_k\rangle + \lambda \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \hat{H}' |\varphi_k\rangle \\ &= \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} E_k |\varphi_k\rangle + \lambda \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \hat{H}' |\varphi_k\rangle \end{aligned}$$

وبمساواة الطرفين نحصل على المعادلة (5.8).

باستخدام الضرب القياسي بواسطة $\langle \varphi_m | e^{iE_m t/\hbar}$ من اليسار بكلا الطرفين للمعادلة (5.8) وإجراء التكامل للفراغ بأكمله ومراعاة أن $\langle \varphi_m | \varphi_k \rangle = \delta_{mk}$ نجد أن المعادلة تؤول إلى فئة من المعادلات التفاضلية المترافقة وهي:

$$\dot{C}_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_m C_m(t) \lambda \hat{H}'_{mk}(t) e^{i\omega_{mk} t} \quad (5.9)$$

حيث عرفنا عناصر المصفوفة $\hat{H}'_{mk}(t)$ بالشكل:

$$(5.10) \hat{H}'_{mk}(t) = \langle \varphi_m | \hat{H}'(t) | \varphi_k \rangle$$

وعرفنا تردد بور الزاوي ω_{mk} كالتالي:

$$\omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar} \quad (5.11)$$

المعادلات التفاضلية المترافقة (5.9) مكافئة تماماً لمعادلة شرودنجر الزمنية (5.5) وبدون أي تقريب حتى الآن.

للبداً في استخدام التقريب، سنفترض أن الاضطراب $\lambda \hat{H}'_{mk}$ يمثل كمية صغيرة وأيضاً مفكوك المعاملات C_k يتم بدلالة الوسيط λ بالمتسلسلة:

$$C_k = C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)} + \lambda^2 C_k^{(2)} + \dots \quad (5.12)$$

باستخدام المفكوك (5.12) في المعادلة (5.9) ومساواة معاملات الوسيط λ (لنفس الدرجة) بكلا الطرفين، نجد أن:

مساواة معاملات λ^0 تعطي:

$$\dot{C}_k^{(0)} = 0, \quad (5.13a)$$

ومساواة معاملات λ^1 تعطي:

$$\dot{C}_k^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_m \hat{H}'_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} C_m^{(0)}, \quad (5.13b)$$

وعامةً مساواة معاملات λ^s تعطي:

$$\dot{C}_k^{(s+1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_m \hat{H}'_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} C_m^{(s)}, \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (5.13c)$$

نتوقف هنا لنسأل أنفسنا، ماذا تعني لنا المعادلات (5.13a-c)؟ تعني أن المعادلة الأصلية (5.8) قد انفصلت بطريقة ما إلي مجموعة من المعادلات (5.13a-c) التي يمكن تكاملها لأي درجة. لكن المعادلات (5.13a-c) لا يمكن حلهم حلاً تاماً وذلك لارتباط تفاضل (معدل تغير) كل معامل، مثلاً $\dot{C}_k^{(s+1)}$ ، مع المعاملات الأخرى، C_m^s . ولكن، لاضطرابات صغيرة نستطيع لدرجة جيدة من التقريب أن نفترض أن معدل تغير المعاملات صغير جداً بحيث أن المعاملات تعامل على أنها ثوابت.

بالنظر للمعادلة (5.13a)، $\dot{C}_k^{(0)} = 0$ ، نجد أنها تؤكد ببساطة أن المعامل $C_k^{(0)}$ ماهو إلا ثابت ولا يعتمد على الزمن. وكما رأينا سابقاً أن $C_m^{(0)}$ ما هو إلا شرط ابتدائي للمسألة. وفي شرحنا التالي سوف

نفترض، فقط للتبسيط، أن النظام في حالته الابتدائية ($t \leq t_o$) يعرف تماماً بالدالة المستقرة $|\varphi_m\rangle$ وطاقته المناظرة E_m . ولهذا:

$$C_k^{(0)} = \begin{cases} \delta_{km} & \text{for discrete states} \\ \delta(k-m) & \text{for continuous states} \end{cases} \quad (5.14)$$

بالتعويض من (5.14) في المعادلة (5.13b) نجد أن التصحيح الأول يعطي:

$$\dot{C}_k^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \hat{H}'_{km}(t) e^{i\omega_{km}t} \quad (5.15)$$

وبتكاملها نجد:

$$C_k^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \int_{t_o}^t \hat{H}'_{km}(t') e^{i\omega_{km}t'} dt' \quad (5.16)$$

حيث ثابت التكامل اختير بحيث أن المعامل $C_m^{(1)}$ يؤول للصفر عند $t = t_o$ ، أي قبل أن يبدأ الاضطراب. سنكتفي هنا بالمعاملات من الدرجة الأولى حتى يتسنى لنا فهم تطبيقاتها.

للدرجة الأولى سنعرف احتمالية الانتقال (Transition probability) من المستوي الابتدائي $|\varphi_m\rangle$ إلى المستوى النهائي $\langle\varphi_k|$ بالعلاقة:

$$P_{km} = |C_k^{(1)}|^2 \quad (5.17)$$

و معدل الانتقال Γ_{km} (Transition rate) (ويعرف بأنه احتمالية الانتقال لوحدة الزمن) بالعلاقة:

$$\Gamma_{km} = \frac{P_{km}}{t} \quad (5.18)$$

ومن Γ نستطيع تعريف متوسط العمر الزمني للمستوى (Mean life time of the state) بالعلاقة:

$$\tau(\text{Mean life time}) = 1/\Gamma \quad (5.19)$$

وهو متوسط الزمن اللازم لتحلل المستوي.

مثال: اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربائي E باتجاه المحور X بحيث أن الاضطراب هو:

$$\hat{H}' = -qxE,$$

ويؤثر في الفترة الزمنية $0 < t < T$ فقط. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t \leq 0$ ، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوي آخر في اللحظة $t \rightarrow T$.

الحل: نلاحظ هنا أن الاضطراب نفسه لا يعتمد على الزمن صراحةً، ولذلك نحصل على العنصر:

$$\hat{H}'_{mk} = \langle \varphi_m | \hat{H}' | \varphi_k \rangle = -qE \langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$$

ونجد أن تكامل من النوعية $\langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$ ، والذي لا يعتمد على الزمن، سوف نتعامل معه بكثرة بحساباتنا المستقبلية. من هذا التكامل البسيط نستطيع أن نستنتج شروط (مدى سماحية) الانتقال من مستوي لأخر وهذه الشروط تسمى قواعد الاختيار (selection rules). دعونا نري هذه القواعد من هذا التكامل.

من تعاملنا بالباب الأول (نظرية المؤثرات) نجد أن التكامل يعطى بالشكل:

$$\langle m | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right]$$

وله قيمة غير صفرية بتحقق الشرط $m = n \pm 1$ فقط. وحيث أن $n = 0$ فإن m تأخذ القيمة 1 فقط، وبالتالي نجد أن:

$$\langle 1 | x | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{0+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

وسعة الانتقال من المستوي الابتدائي $|0\rangle$ إلى المستوي النهائي $|1\rangle$ هو:

$$\begin{aligned}
 C_m^{(1)} &= (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t \hat{H}'_{mk}(t') e^{i\omega_{km}t'} dt' \\
 &= (i\hbar)^{-1} qE \langle 1|x|0 \rangle \int_0^T e^{i\omega_{10}t'} dt' = \frac{qE}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\frac{e^{i\omega_{10}t'}}{i\omega_{10}} \right]_0^T \\
 &= -\frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [e^{i\omega_{10}T} - 1] = -\frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{i\omega_{10}T/2} [e^{i\omega_{10}T/2} - e^{-i\omega_{10}T/2}] \\
 &= -\frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{i\omega_{10}T/2} 2i \sin\left(\frac{\omega_{10}T}{2}\right)
 \end{aligned}$$

واحتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $|0\rangle$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$P_{10} = |C_1^{(1)}|^2 = \frac{2q^2 E^2}{m\hbar\omega^3} \sin^2\left(\frac{\omega_{10}T}{2}\right)$$

يتضح من المعادلة السابقة أن المستوى الابتدائي $|0\rangle$ سيظل كما هو بدون إنتقال إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ طالما المجال الكهربائي E صغير وسيظل احتمالية الانتقال P_{10} تنذبذ خلال زمن تأثير الاضطراب. نستطيع أن نؤكد هنا أيضاً أن باستخدامنا مجال كهربي متذبذب (متردد) فإن احتمالية الانتقال P_{10} سوف تزداد إلي أن نصل إلي التردد الرنيني (Resonance frequency) المطلوب لبدء عملية الانتقال.

مثال: كما بالمثل السابق، اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور X بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -qx E(t), \quad E(t) = \varepsilon e^{-\gamma t/\tau}, \quad \gamma = \frac{1}{\tau}$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t \leq 0$ ،
فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوى آخر في اللحظة $t \rightarrow \infty$.

الحل: من المثال السابق وجدنا أن الانتقال المسموح هو:

$$\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\hat{H}'_{10}(t) = \langle 1|\hat{H}'(t)|0\rangle = -qE(t)\langle 1|x|0\rangle$$

وبالتالي احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $|0\rangle$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$\begin{aligned} P_{10}(t) &= |C_0^{(1)}|^2 = \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\hbar\omega} \left| \int_0^\infty e^{i(\omega-\gamma)t'} dt' \right|^2 \\ &= \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\hbar\omega} \left(\left[\frac{e^{i(\omega-\gamma)t'}}{i(\omega-\gamma)} \right]_0^\infty \right)^2 \\ &= \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\hbar\omega} \frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2 + 1} \left(e^{i(\omega-\gamma)t} - 1 \right)^2 \end{aligned}$$

ومنها نجد أن:

$$P_{10}(t \rightarrow \infty) = \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\hbar\omega} \frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2 + 1}$$

حيث استخدمنا التكامل القياسي $\left| \int e^{-br+i\omega r} dr \right|^2 = \frac{1}{b^2 + \omega^2}$. يتضح من المعادلة السابقة أن P_{10}

تؤول للصفر عندما $\tau = 0$ أي قبل بدأ الاضطراب، و $P_{10} \propto \frac{1}{\omega^3}$ عندما $\tau \rightarrow \infty$.

مثال: لاضطراب صغير يعطى بالعلاقة:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} H' & 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}$$

حيث H' مؤثر ثابت لا يعتمد علي الزمن. اثبت أن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n يعطى بالعلاقة:

$$P_{nm} = \frac{2\pi\tau}{\hbar} |H'_{nm}|^2 \delta(E_m - E_n) \quad (5.20)$$

الحل: بالإمكان إيجاد P_{km} بالمعادلة (5.17) وذلك لأن H'_{km} مؤثر ثابت ولا يعتمد على الزمن، وبالتالي يمكن إخرجه من التكامل. حيث أن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n يعطى بالعلاقة

$$\begin{aligned} P_{nm} &= |C_m^{(1)}|^2 = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau \langle n | H' | m \rangle e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2 \\ &= \frac{|H'_{nm}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2 = \frac{|H'_{nm}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{nm}\tau} - 1}{i\omega_{nm}} \right|^2 \\ &= \frac{|H'_{nm}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{2e^{i\omega_{nm}\tau/2} \left(\frac{e^{i\omega_{nm}\tau/2} - e^{-i\omega_{nm}\tau/2}}{2} \right)}{i\omega_{nm}} \right|^2 \\ &= \frac{|H'_{nm}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{nm}\tau}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right)^2} = \frac{|H'_{nm}|^2}{\hbar^2} F(\omega, \tau) \end{aligned}$$

حيث استخدمنا $\omega = \frac{\omega_{nm}}{2} = \frac{E_n - E_m}{2\hbar}$. وباستخدام الملحق 5.A والخاصية $(\delta(ax)) = \frac{1}{a} \delta(x)$ نجد أن:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} F(\omega, \tau) \sim \pi\tau \delta\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right) = \pi\tau \delta\left(\frac{E_m - E_n}{2\hbar}\right) = 2\pi\tau\hbar \delta(E_m - E_n)$$

ومنها نصل للنتيجة المطلوبة (5.20) .

لنتوقف هنا لسأل، ماذا نستنتج من المعادلة (5.20)؟ نستنتج التالي:

١- احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n تزداد بزيادة زمن الاضطراب τ .

٢- من خواص الدالة δ ، فإن المعادلة (5.20) تعني أن الانتقال يحدث بين المستويين m و n فقط. بالتالي فإنه لا يحدث أي تغيير في الطاقة الكلية للنظام، بمعنى أن الطاقة الكلية محفوظة.

٣- من الخاصية السابقة نستنتج أن الاضطراب الزمني لا يغير من طاقة النظام الكلية، بمعنى أنه لا يضيف ولا ينقص من طاقة النظام.

ومعدل الانتقال يعطي بالعلاقة:

$$\Gamma_{nm} = \frac{P_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{nm}|^2 \delta(E_m - E_n)$$

وتسمى هذه العلاقة "قاعدة فيرمي الذهبية"

مثال: لاضطراب صغير توافقي يعطى بالعلاقة:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} 2H_1 \sin(\omega t) & 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}$$

حيث H_1 مؤثر هيرميتي لا يعتمد على الزمن. أوجد احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m الى المستوى النهائي n .

الحل: قبل أن نبدأ بحل المثال سنقوم بإعادة كتابة الاضطراب بشكل جديد يبسط الحسابات وهو:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} \frac{H_1}{i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) & 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}$$

حيث استخدمنا المفكوك $\sin(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$.والآن سعة الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n تحسب كالتالي:

$$\begin{aligned} C_m^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau \langle n | 2H_1 \sin(\omega t) | m \rangle e^{i\omega_n t} dt = \\ &= -\frac{\langle n | H_1 | m \rangle}{\hbar} \int_0^\tau [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] e^{i\omega_n t} dt \\ &= -\frac{\langle n | H_1 | m \rangle}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_n + \omega)\tau} - 1}{\omega_n + \omega} - \frac{e^{i(\omega_n - \omega)\tau} - 1}{\omega_n - \omega} \right] \end{aligned}$$

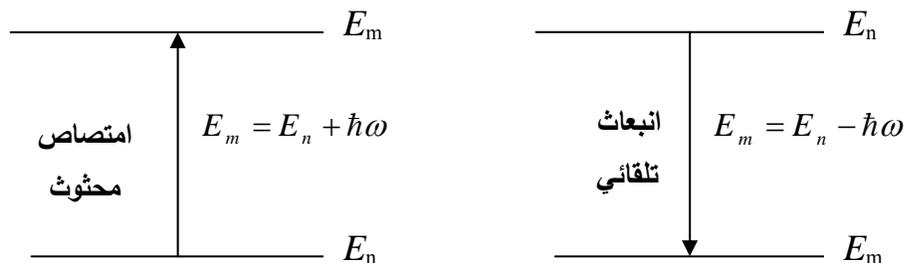
وقد افترضنا سابقاً أن عناصر مصفوفة التفاعل $\langle n | H_1 | m \rangle$ صغيرة ومتماثلة، بمعنى أن $\langle n | H_1 | m \rangle = \langle m | H_1 | n \rangle$. وبالتالي نجد هنا أن سعة الانتقال تبلغ قيمةً منفردة (singular) بحالتين اثنتين وهما:

الحالة الأولى: عند امتصاص طاقة كوانتية absorption a quana of energy

$$\omega_{nm} - \omega = 0 \Rightarrow E_m = E_n + \hbar\omega$$

الحالة الثانية: عند انبعاث طاقة كوانتية emission a quana of energy

$$\omega_{nm} + \omega = 0 \Rightarrow E_m = E_n - \hbar\omega$$

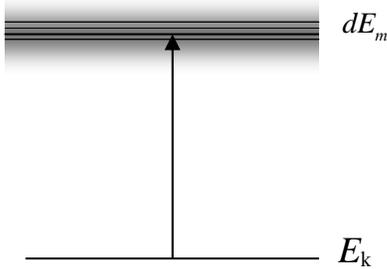


بالتالي في الحالة الأولى، أي عند امتصاص طاقة كوانتية، نجد أن معدل الانتقال (انظر المثال السابق):

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | H_1 | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega)$$

والحالة الثانية، أي عند انبعاث طاقة كوانتية، نجد أن معدل الانتقال:

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | H_1 | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n + \hbar\omega)$$



معدل الانتقال للمستويات المتصلة:

غالباً ينصب اهتمامنا في تجميع معدلات الانتقال للمستويات النهائية القريبة جداً من بعضها البعض. لنفترض مثلاً أن عدد المستويات النهائية القريبة من بعضها لوحدة الطاقة وتسمى كثافة المستويات (density of states) ويعبر عنه بالرمز $\rho(E_m)$. بالتالي فإن

$$\begin{aligned} \Gamma &= \sum_{\Delta m} \Gamma_{k \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \left| \langle m | H_1 | k \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_m) \rho(E_m) dE_m \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{\left| \langle m | H_1 | k \rangle \right|^2} \rho(E_m) \Big|_{E_m = E_k \pm \hbar\omega} \end{aligned}$$

وهي صورة اخري من صور "قاعدة فيرمي الذهبية". مع ملاحظة أن عناصر المصفوفة

تعبّر عن القيمة المتوسطة لجميع المستويات النهائية.

@ Drs. I. Nasser and Afaf Abdel-Hady

تمارين عامة

١- اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربائي E باتجاه المحور x بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -xE(t), \quad E(t) = \varepsilon e^{-t^2/\tau^2}$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t=-\infty$ ، اثبت أن احتمال أن يكون المتذبذب بالمستوي $n=1$ في اللحظة $t=\infty$ هو

$$P_{10} = \frac{\pi\tau^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2\tau^2/2}$$

٢- اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربائي E باتجاه المحور x بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -qxE(t), \quad E(t) = \varepsilon \frac{\tau}{t^2 + \tau^2}$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t=-\infty$ ، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوي آخر في اللحظة $t=\infty$. [استخدم

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} dt = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega\tau} \text{] التكامل القياسي [$$

٣- وضعت ذرة هيدروجين تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربائي E باتجاه المحور الصادي Z بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -er \cos \theta E(t), \quad E(t) = \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\tau}{t^2 + \tau^2}$$

حيث ε و τ ثوابت. باعتبار أن ذرة الهيدروجين تتواجد بالمستوي الأرضي $|1,0,0\rangle$ في اللحظة $t = -\infty$ ، اثبت أن احتمال أن يكون ذرة الهيدروجين بالمستوي $|2,1,0\rangle$ في اللحظة $t = \infty$ هو

$$\langle 2,1,0 | r \cos \theta | 1,0,0 \rangle = \frac{a_0 2^7 \sqrt{2}}{3^5} [\text{استخدم}] \cdot P_{21} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{a_0^2 e^2 \varepsilon^2 2^{15}}{3^{10}} e^{-2\omega\tau}$$

ملحق (5.A)

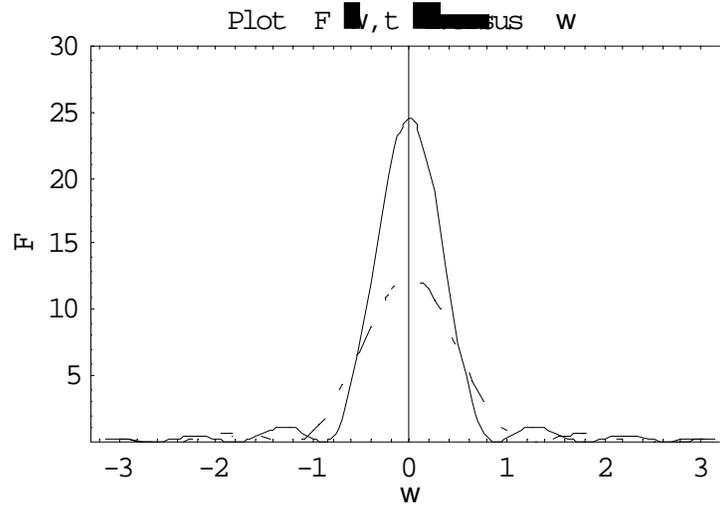
الدالة المترددة $F(\omega, t)$

Oscillating Function $F(\omega, t)$

تعرف الدالة $F(\omega, t)$ بالمعادلة:

$$F(\omega, t) = \frac{|e^{i\omega t} - 1|^2}{|\omega|^2} = \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} = \frac{\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega t}{2}\right)^2}$$

والرسم التالي يوضح شكل الدالة (عند قيمة ثابتة للزمن) ومنه يتعين لها الخواص التالية:



الدالة $F(\omega, t)$ لقيم مختلفة للزمن، $F(\omega, 7)$ للخط المستمر و $F(\omega, 5)$ للخط المنقطع.

١- من الرسم نجد أن الدالة (عند قيمة ثابتة للزمن) يوجد لها قمة حادة حول القيمة $\omega = 0$.

٢- ارتفاع القمة يتناسب مع t^2 . وتحسب رياضياً كالتالي (باستخدام نظرية لينتز للنهايات):

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} F(\omega, t) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{t \sin(\omega t)}{2\omega} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{t^2 \cos(\omega t)}{2} = \frac{t^2}{2}$$

٣- عرض الدالة (اتساعها) يتناسب تقريباً مع $\frac{2\pi}{t}$. هذا ناتج من استخدامنا للشرط:

$$\begin{aligned} F(\omega, t) = 0 &\Rightarrow \frac{\omega t}{2} = n\pi \\ &\Rightarrow \omega = \frac{2\pi n}{t}, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

٤- مساحة المنحني (area under the curve) تتناسب مع:

$$\text{Area} \propto t^2 \times \frac{2\pi}{t} \propto t$$

وبالتالي فإن المساحة تزداد مع الزمن وتكون أكبر مساحة مركزة حول القيمة $\omega = 0$. وعندما يزداد الزمن إلى قيمة لا نهائية، نجد أن الدالة تصبح دالة دلتا $\delta(\omega)$.

٥- باستخدام التعويض $x = \frac{\omega t}{2}$ نجد أن:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega, t) d\omega = t \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi t$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi \quad \text{حيث استخدمنا التكامل القياسي}$$

٦- من القمة الحادة حول القيمة $\omega = 0$ نجد أن هناك تشابهاً مع الدالة دلتا $\delta(\omega)$ ، ومنه نجد:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F(\omega, t) \sim \pi t \delta(\omega)$$

ملحق (A)

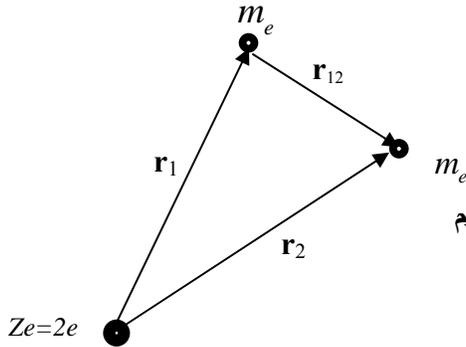
نظام الوحدات الذرية

System of Atomic Units

يستخدم نظام الوحدات الذرية بإسهاب في الحسابات الخاصة بميكانيكا الكم وذلك لمساواة الثوابت الخاصة (مثال لذلك شحنة الإلكترون e وثابت بلانك المعدل $\hbar = h/2\pi$) بالواحد الصحيح. لنأخذ مثالاً على ذلك بالهملتونيان الخاص بالإلكتروني ذرة الهليوم والذي يعبر عنه بالمعادلة (مع إهمال حركة النواة):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + k\frac{e^2}{r_{12}} \quad (\text{A.1})$$

حيث m_e هي كتلة الإلكترون، k ثابت قانون كولومب، و Ze هي شحنة النواة وتساوي $2e$ في حالة الهيليوم.



شكل (A.1) إحدائيات تستخدم لوصف ذرة الهيليوم

دعنا نعرف هنا قيم الوحدات الخاصة بحيث أن $\hbar = 1, m_e = 1, e = 1, k = 1/4\pi\epsilon_0 = 1$ فتأخذ المعادلة السابقة الشكل:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{A.2})$$

ولا تعتمد على أي ثابت فيزيائي. ونتيجةً لهذا التبسيط فإننا نجد أننا نستطيع أن نبسط جميع الكميات الفيزيائية الأخرى مثل نصف قطر بور a_o :

$$a_o = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 1 \quad (\text{atomic units}) \quad (\text{A.3})$$

و تسمى وحدة الأطوال الذرية بالاسم بور. وتعرف أيضاً الطاقة كالتالي:

$$E = \frac{ke^2}{a_o} = 1 \quad (\text{atomic units}) \quad (\text{A.4})$$

وتسمى وحدة الطاقة الذرية بالاسم هارترى و يرمز لها بالرمز $H \equiv \text{Hartree}$.

باستخدام وحدة الطاقة الذرية نجد أن طاقة المستوى الأرضي لذرة الهيدروجين = - 0,5 هارترى. الجدول التالي يحتوي على عدد من أسماء القيم الفيزيائية المهمة والقيم المكافئة لها في النظام القياسي.

واجب منزلي: احسب القيمة المكافئة للطاقة 1 هارترى في النظام القياسي.

$$\begin{aligned} 1 \text{ Hartree} &= \frac{k^2 me^2}{\hbar^2} = \frac{me^2}{(4\pi\epsilon_o)^2 \hbar^2} = \frac{(9.1091 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6021 \times 10^{-19} \text{ C})^4}{(1.1126 \times 10^{-10} \text{ C}^2 \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-1})^2 (1.0545 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2} \\ &= 4.3595 \times 10^{-18} \text{ J} \end{aligned}$$

وبالتالي

$$\begin{aligned} 1 \text{ Hartree (1 H)} &= 4.3595 \times 10^{-18} \text{ J} \\ &= 27.2 \text{ eV} \\ &= 2 \text{ Ry} \end{aligned}$$

حيث $1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ eV}$ هي وحدة أخرى للطاقة، ويقال عليها وحدة ريدبرج.

تحول الوحدة $1 \text{ Hartree (1 H)} = 4.3595 \times 10^{-18} \text{ J}$ إلى التعريفات التالية:

١ - بضربها بعدد أفوجادرو نحصل على

$$1 \text{ Hartree} = 2625 \text{ kJmol}^{-1}$$

٢- لدراسة الأطياف الذرية نلجأ لحساب فرق الطاقة بين المستويات المختلفة باستخدام وحدة

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = hc\bar{\nu} \quad () \text{ وتستننتج من العلاقة}$$

$$\begin{aligned} \bar{\nu} &= \frac{1 \text{ Hartree}}{hc} = \frac{4.36 \times 10^{-18} \text{ J}}{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})(3.0 \times 10^8 \text{ m/s})} \\ &= 2.195 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \\ &= 2.195 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

جدول الوحدات الذرية (باستخدام ثابت التركيب الدقيق α (fine structure constant) ،
 $\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} = 1/137.036$ وسرعة الضوء c في الفراغ (velocity of light in vacuum) ،
 $(c = 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s})$

الوحدات القياسية	الوحدات الذرية	الكمية ومدلولها الفيزيائي
$9.1091 \times 10^{-31} \text{ kg}$	$m_e = 1$	الكتلة (كتلة الإلكترون)
$1.6021 \times 10^{-19} \text{ C}$	$ e = 1$	الشحنة (شحنة الإلكترون)
$5.2916 \times 10^{-11} \text{ m}$	$a_o = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 1$	المسافة (نصف قطر المدار الأول لذرة الهيدروجين)
$1.0545 \times 10^{-34} \text{ J.s}$	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1$	العزم الزاوي (ثابت بلانك المعدل)
$2.18769 \times 10^6 \text{ m/s}$	$v_o = \alpha c = 1$	السرعة (مقدار سرعة الإلكترون بأول مدار لبور)
$4.3594 \times 10^{-18} \text{ J}$ $= 27.2116 \text{ eV}$	$E = \frac{ke^2}{a_o} = 1$	الطاقة (ضعف طاقة تأين ذرة الهيدروجين)
$2.4189 \times 10^{-17} \text{ s}$	$\frac{a_o}{v_o} = 1$	الزمن (الزمن الدوري لحركة الإلكترون بأول مدار لبور)

ملحق (B)

تكامل كولم

Coulomb's Integral $I(Z)$

بهذا الملحق سنستعرض تكامل كولم $I(Z)$ ونثبت أن:

$$I(Z) = \iint \psi_{1s}^*(r_1) \psi_{1s}^*(r_2) \frac{1}{|r_2 - r_1|} \psi_{1s}(r_1) \psi_{1s}(r_2) dr_1 dr_2 = \frac{5}{8} Z \quad (\text{B.1})$$

حيث $\psi_{1s}(r_i) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr_i}$ هي الدالة المميزة لإلكترون ذرة الهيدروجين بالمستوى الأرضي. هذا التكامل يمثل طاقة التفاعل بين إلكتروني ذرة الهليوم وذلك بفرض أنهم موزعون بكثافة كهربية تعطي بالعلاقات:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= -e \psi_{1s}^*(r_1) \psi_{1s}(r_1) = -e |\psi_{1s}(r_1)|^2, \\ \rho_2 &= -e \psi_{1s}^*(r_2) \psi_{1s}(r_2) = -e |\psi_{1s}(r_2)|^2 \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

حساب تكامل كولم يعتبر من المسائل الرياضية الصعبة نتيجة وجود الحد $\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|r_2 - r_1|}$ وبالتالي لا نستطيع فصل المتغيرات. القارئ المبتدئ عليه أن يكتفي بالنتيجة (B.1) إذا لم تكن خلفيته الرياضية تسمح له بالتكملة.

وسوف نبدأ بتعريف الإزاحة بالصورة:

$$|r_2 - r_1| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}$$

بالتالي نحصل على التكامل بالصورة (مع ملاحظة أن $dr_i = r_i^2 \sin \theta_i d\theta_i d\varphi_i$):

$$\begin{aligned} I &= \frac{Z^6}{\pi^2} \int_0^\infty e^{-2Zr_1} 4\pi r_1^2 dr_1 \int_0^\infty e^{-2Zr_2} r_2^2 dr_2 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}}_{2\pi} \\ &= 8Z^6 \int_0^\infty e^{-2Zr_1} r_1^2 dr_1 \int_0^\infty e^{-2Zr_2} r_2^2 dr_2 \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} \end{aligned}$$

وباستخدام التعويض $x = \cos \theta$ ولذا $dx = \sin \theta d\theta$ نجد التكامل على الزاوية θ يعطى:

$$\int_0^{\pi} \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} = \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2xr_1 r_2}} \approx \begin{cases} \frac{2}{r_1}, & r_1 > r_2 \\ \frac{2}{r_2}, & r_2 > r_1 \end{cases}$$

ومنه نجد أن:

$$I = 16Z^6 \int_0^{\infty} e^{-2Zr_1} r_1^2 dr_1 \left[\underbrace{\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-2Zr_2} r_2^2 dr_2}_{I_1} + \underbrace{\int_{r_1}^{\infty} e^{-2Zr_2} r_2 dr_2}_{I_2} \right]$$

حيث التكاملات:

$$I_1 = \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-2Zr_2} r_2^2 dr_2 = \frac{1}{4Z^3 r_1} \left\{ e^{-2Zr_1} (-1 - 2Zr_1 - 2Z^2 r_1^2) + 1 \right\}$$

$$I_2 = \int_{r_1}^{\infty} e^{-2Zr_2} r_2 dr_2 = \frac{e^{-2Zr_1}}{4Z^2} (1 + 2Zr_1)$$

وأخيراً:

$$\begin{aligned} I &= 16Z^6 \int_0^{\infty} e^{-2Zr_1} r_1^2 dr_1 \left[\frac{e^{-2Zr_1}}{4Z^3 r_1} (-1 + e^{2Zr_1} - r_1 Z) \right] \\ &= 4Z^3 \int_0^{\infty} e^{-4Zr_1} (-1 + e^{2Zr_1} - r_1 Z) r_1 dr_1 = 4Z^3 \left(\frac{5}{32Z^2} \right) \\ &= \frac{5}{8} Z \end{aligned}$$

ملحق (C)

جدول للتفاضلات البسيطة

Table of Simple Derivatives

في الجدول التالي الحروف u و v تستخدم كدوال في المتغير x . الحروف a, b, \dots و m, n, \dots تستخدم كثوابت و $i = \sqrt{-1}$.

$\frac{d}{dx} a = 0$	$\frac{d}{dx} \cos(u) = -\sin(u) \frac{du}{dx}$
$\frac{d}{dx} x = 1$	$\frac{d}{dx} \cos(ax) = -a \sin(ax)$
$\frac{d}{dx} (au) = a \frac{du}{dx}$	$\frac{d}{dx} \ln(u) = \frac{1}{u} \frac{du}{dx}$
$\frac{d}{dx} (uv) = u \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx}$	$\frac{d}{dx} e^u = e^u \frac{du}{dx}$
$\frac{d}{dx} ax^n = nax^{n-1}$	$\frac{d}{dx} e^{ax} = ae^{ax}$
$\frac{d}{dx} \sin(u) = \cos(u) \frac{du}{dx}$	$\frac{d}{dx} e^{ax^2} = 2axe^{ax^2}$
$\frac{d}{dx} \sin(ax) = a \cos(ax)$	

(D) ملحق

متطابقات رياضية عامة

General Mathematical Identities

$\sin \theta \pm \sin \varphi = 2 \left[\sin\left(\frac{\theta \pm \varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta \mp \varphi}{2}\right) \right]$	$\cos 2\theta = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta = 1 - 2 \sin^2 \theta$
$\sin \theta + \cos \varphi = 2 \left[\cos\left(\frac{\theta + \varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta - \varphi}{2}\right) \right]$	$= 2 \cos^2 \theta - 1$
$\cos \theta - \cos \varphi = -2 \left[\sin\left(\frac{\theta + \varphi}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta - \varphi}{2}\right) \right]$	$e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta, \quad i = \sqrt{-1}$
$\sin \theta \sin \varphi = \frac{1}{2} [\cos(\theta - \varphi) - \cos(\theta + \varphi)]$	$\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}, \quad \cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$
$\cos \theta \cos \varphi = \frac{1}{2} [\cos(\theta - \varphi) + \cos(\theta + \varphi)]$	$(1+x)^n = 1 + \frac{nx}{1!} + \frac{n(n-1)x^2}{2!} + \dots, \quad x < 1$
$\sin \theta \cos \varphi = \frac{1}{2} [\sin(\theta - \varphi) + \sin(\theta + \varphi)]$	$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad x < 1$
$\sin(\theta \pm \varphi) = \sin \theta \cos \varphi \pm \cos \theta \sin \varphi$	$e^{ a } = \sum_n \frac{ a ^n}{n!}$
$\cos(\theta \pm \varphi) = \cos \theta \cos \varphi \mp \sin \theta \sin \varphi$	$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots, \quad x < 1$
$\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$	
$\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta$	

ملحق (E)

جدول التكاملات المستخدمة

Table of Used Integrals

في الجداول التالية يجب إضافة ثابت التكامل لجميع التكاملات الغير محددة.

$\int dx = x$	$\int \frac{1}{x} dx = \int x^{-1} dx = \ln(x)$
$\int adx = ax$	$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}, \quad n \neq -1$
$\int a f(x) dx = a \int f(x) dx$	$\int e^x dx = e^x$
$\int (u+v) dx = \int u dx + \int v dx$	$\int e^{ax} dx = \frac{1}{a} e^{ax}$
$\int u dv = u \int dv - \int v du = uv - \int v du$	$\int b^{ax} dx = \frac{1}{a \ln(b)} b^{ax}; \quad b > 0$
$\int \cos(a\theta) d\theta = \frac{1}{a} \sin a\theta$	$\int \ln(x) dx = x \ln(x) - x$
$\int \sin(a\theta) d\theta = -\frac{1}{a} \cos a\theta$	$\int a^x \ln(a) dx = a^x; \quad a > 0$

تكامل من النوع $\int x^n e^{-ax} dx$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad n > 1, 2, 3, \dots, \quad a > 0$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax} dx = \frac{1}{a}, \quad \int_0^{\infty} x e^{-ax} dx = \frac{1}{a^2}, \quad \int_0^{\infty} x^2 e^{-ax} dx = \frac{2}{a^3}$$

تكامل من النوع $\int x^n e^{-ax^2} dx$

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}, \quad n > 1, 2, 3, \dots, \quad a > 0$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1.3.5 \dots (2n-1)}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad n > 1, 2, 3, \dots, \quad a > 0$$

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}$
$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_0^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a^2}$
$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{4a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int_0^{\infty} x^5 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{a^3}$

تكامل من النوع $\int f(\theta) \sin^2 \theta d\theta$ و $\int f(\theta) \cos^2 \theta d\theta$

$\int_0^x \sin^2(a\theta) d\theta = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$	$\int_0^x \cos^2(a\theta) d\theta = \frac{x}{2} + \frac{\sin(2ax)}{4a}$
$\int_0^{\pi} \sin^2(\theta) d\theta = \frac{\pi}{2}$	$\int_0^{\pi} \cos^2(\theta) d\theta = \frac{\pi}{2}$
$\int_0^{\pi} \theta \sin^2(\theta) d\theta = \frac{\pi^2}{4}$	$\int_0^{\pi} \theta \cos^2(\theta) d\theta = \frac{\pi^2}{4}$
$\int_0^{\pi} \theta^2 \sin^2(\theta) d\theta = \frac{\pi}{12} (-3 + 2\pi^2)$	$\int_0^{\pi} \theta^2 \cos^2(\theta) d\theta = \frac{\pi}{12} (3 + 2\pi^2)$
$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \theta}{\theta^2} d\theta = \pi$	$\int_0^{\pi} \sin \theta \cos^2(\theta) d\theta = \frac{2}{3}$

تكامل من النوع $\int f(\theta) \sin(ma\theta) d\theta$ و $\int f(\theta) \cos^2(ma\theta) d\theta$

$$\int_0^x \sin(a\theta) \sin(2a\theta) d\theta = \frac{\sin(ax)}{2a} - \frac{\sin(3ax)}{6a},$$

$$\int_0^x \cos(a\theta) \cos(2a\theta) d\theta = \frac{\sin(ax)}{2a} + \frac{\sin(3ax)}{6a}$$

$$\int_0^x \sin(a\theta) \sin(ma\theta) d\theta = \frac{\sin[(m-1)ax]}{2a(m-1)} - \frac{\sin[(m+1)ax]}{2a(m+1)},$$

$$\int_0^x \cos(a\theta) \cos(ma\theta) d\theta = \frac{\sin[(m-1)ax]}{2a(m-1)} + \frac{\sin[(m+1)ax]}{2a(m+1)}$$

تكامل من النوع $\int_0^{\infty} \frac{x^m}{(x^2 + a^2)^n} dx$

$\int_0^{\infty} \frac{1}{x^2 + a^2} dx = \frac{\pi}{2a}$	$\int_0^{\infty} \frac{x}{(x^2 + a^2)^2} dx = \frac{1}{2a^2}$
$\int_0^{\infty} \frac{1}{(x^2 + a^2)^2} dx = \frac{\pi}{4a^3}$	$\int_0^{\infty} \frac{x^2}{(x^2 + a^2)^2} dx = \frac{\pi}{4a}$
$\int_0^{\infty} \frac{1}{(x^2 + a^2)^4} dx = \frac{5\pi}{32a^7}$	$\int_0^{\infty} \frac{x^2}{(x^2 + a^2)^4} dx = \frac{\pi}{32a^5}$

تكامل من النوع $\int x^n \sin^2 x dx$

$$\int x \sin^2 x \, dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin 2x}{4} - \frac{\cos 2x}{8}.$$

$$\int x^2 \sin^2 x \, dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4} - \frac{1}{8} \right) \sin 2x - \frac{x \cos 2x}{4}.$$

$$\int x^3 \sin^2 x \, dx = \frac{x^4}{8} - \left(\frac{x^3}{4} - \frac{3x}{8} \right) \sin 2x - \left(\frac{3x^2}{8} - \frac{3}{16} \right) \cos 2x.$$

تكامل من النوع $\int x^n \cos x \, dx$

$$\int x \cos x \, dx = \cos x + x \sin x.$$

$$\int x^2 \cos x \, dx = 2x \sin x + (x^2 - 2) \cos x.$$

$$\int x^3 \cos x \, dx = (3x^2 - 6) \sin x - (x^3 - 6x) \cos x.$$

تكامل من النوع $\int \sin^n x \, dx$

$$\int \sin^2 x \, dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin 2x}{4} = \frac{x}{2} - \frac{\sin x \cos x}{2}.$$

$$\int \sin^3 x \, dx = \frac{\cos^3 x}{3} - \cos x.$$

$$\int \sin^4 x \, dx = \frac{3x}{8} - \frac{\sin 2x}{4} + \frac{\sin 4x}{32}.$$

$$\int \sin^5 x \, dx = -\frac{5 \cos x}{8} + \frac{5 \cos 3x}{48} - \frac{\cos 5x}{80}.$$

$$\int \sin^6 x \, dx = \frac{5x}{16} - \frac{15 \sin 2x}{64} + \frac{3 \sin 4x}{64} - \frac{\sin 6x}{192}$$

$$\int \sin^7 x \, dx = -\frac{35 \cos x}{64} + \frac{7 \cos 3x}{64} - \frac{7 \cos 5x}{320} + \frac{\cos 7x}{448}.$$

تكامل من النوع $\int x^n \sin x \, dx$

$$\int x^m \sin x \, dx = -x^m \cos x + m \int x^{m-1} \cos x \, dx.$$

$$\int x \sin x \, dx = \sin x - x \cos x.$$

$$\int x^2 \sin x \, dx = 2x \sin x - (x^2 - 2) \cos x.$$

$$\int x^3 \sin x \, dx = (3x^2 - 6) \sin x - (x^3 - 6x) \cos x.$$

$$\int x^4 \sin x \, dx = (4x^3 - 24x) \sin x - (x^4 - 12x^2 + 24) \cos x.$$

$$\int x^5 \sin x \, dx = (5x^4 - 60x^2 + 120) \sin x - (x^5 - 20x^3 + 120) \cos x.$$

$$\int x^6 \sin x \, dx = (6x^5 - 120x^3 + 720x) \sin x - (x^6 - 30x^4 + 360x^2 - 720) \cos x.$$

$$\int_0^{\pi/2} \sin^n(x) dx = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (n-1) \pi}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots n \cdot 2} & ; n \text{ even, } n \neq 0 \\ \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (n-1)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots n} & ; n \text{ odd, } n \neq 1 \end{array} \right\} \text{ or}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(mx)}{x} dx = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\pi}{2}, m > 0 \\ 0, m = 0 \\ -\frac{\pi}{2}, m < 0 \end{array} \right\}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos(mx)}{x} dx = \infty$$

$$\int_0^{\pi} \sin(ax) \sin(bx) dx = \int_0^{\pi} \cos(ax) \cos(bx) dx = 0 \quad ; a \neq b; a, b \text{ integers}$$

$$\int_0^{\pi/2} \sin(ax) \cos(ax) dx = \int_0^{\pi} \sin(ax) \cos(ax) dx = 0$$

$$\int_0^{\pi} \sin(ax) \cos(bx) dx = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{2a}{a^2 - b^2} & \text{if } a - b \text{ is odd} \\ 0 & \text{if } a - b \text{ is even} \end{array} \right\} \quad a, b \text{ integers}$$

$$\int \sin(mx)\sin(nx) = \frac{\sin((m-n)x)}{2(m-n)} - \frac{\sin((m+n)x)}{2(m+n)} \quad ; m^2 \neq n^2$$

$$\int \cos(mx)\cos(nx) = \frac{\sin((m-n)x)}{2(m-n)} + \frac{\sin((m+n)x)}{2(m+n)} \quad ; m^2 \neq n^2$$

$$\int \sin(mx)\cos(nx) = -\frac{\cos((m-n)x)}{2(m-n)} - \frac{\cos((m+n)x)}{2(m+n)} \quad ; m^2 \neq n^2$$

$$\int \sin(ax)\cos(ax) dx = \frac{1}{2a} \sin^2(ax)$$

$$\int \sin^2(ax)\cos^2(ax) dx = \frac{x}{8} - \frac{1}{32a} \sin(4ax)$$

$$\int \sin(ax)\cos^m(ax) dx = -\frac{\cos^{m+1}(ax)}{(m+1)a}$$

$$\int \cos(ax)\sin^m(ax) dx = \frac{\sin^{m+1}(ax)}{(m+1)a}$$

وهناك أيضاً بعض التكاملات القياسية المهمة التالية:

مع ملاحظة أن $dr_i = r_i^2 \sin \theta_i d\theta_i d\varphi_i$ و $q \cdot r = qr \cos \theta$ حيث تنحصر قيم نهايات التكامل بين القيم التالية: $\varphi = \{0, 2\pi\}$ و $\theta = \{0, \pi\}$ و $r = \{0, \infty\}$.

$$I_1 = \int \frac{e^{-br \pm iq \cdot r}}{r} dr = \frac{4\pi}{b^2 + q^2};$$

$$I_2 = \int e^{-br \pm iq \cdot r} dr = -\frac{\partial I_1}{\partial b} = \frac{8\pi b}{(b^2 + q^2)^2};$$

$$I_4 = \int \frac{e^{\pm iq \cdot r}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dr = \frac{4\pi}{q^2} e^{\pm iq \cdot r'}$$

$$I_5 = \iint \frac{e^{-2b(r_1+r_2)}}{r_1} dr_1 dr_2 = \iint \frac{e^{-2b(r_1+r_2)}}{r_2} dr_1 dr_2 = \frac{\pi^2}{b^5}$$

$$I_6 = \iint \frac{e^{-2b(r_1+r_2)}}{r_{12}} dr_1 dr_2 = \frac{5\pi^2}{8b^5}, \quad r_{12} = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$$

$$I_7 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} dt = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega\tau}$$

$$I_8 = \left| \int e^{-br + i\omega r} dr \right|^2 = \frac{1}{b^2 + \omega^2}$$

المراجع

A- English

- 1- Nouredine Zettili, "Quantum mechanics, Concepts and Applications", (John Wiley, 2001).
- 2- Amit Goswami, "Quantum mechanics", (Wm. C. Brown , 1992).
- 3- B. H. Bransden and C. J. Joachain, "Introduction to Quantum mechanics", (Longman Scientific and Technical, London, 1994).
- 4- D. Griffiths "Introduction to Quantum mechanics", (Prentic-Hall , Englewood Cliffs, N.J. 1995).
- 5- E. Merzbacher, "Quantum mechanics", 3rd Ed., (John Wiley, 1998).

B- Arabic

- ١- "مقدمه في الميكانيك الكمي" تأليف د. هاشم قاسم و د. ضياء المختار الناشر: الناشر: جامعه البصرة، الجمهورية العراقية، وزارة التعليم العالي و البحث العلمي ١٩٨٥.
- ٢- "المنهج الدراسي الأول لميكانيكا الكم" تأليف أ. د. إبراهيم ناصر و د. عفاف السيد عبد الهادي - الناشر: مكتبة النهضة المصرية ٢٠٠٣.
- ٣- "قاموس العلوم الرياضية" تأليف د. معروف سمحان، د. عند الرحمن أبو عمه، د. فوزي الذكر - الناشر: جامعة الملك سعود، النشر العلمي والمطابع.
- ٤- "المعجم الشامل لمصطلحات مجمع اللغة العربية في العلوم التقنية والهندسية" تأليف د. نبيل عبد السلام هارون- الناشر: دار الحيل-بيروت (١٩٩١).