الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
People's Democratic Republic of Algeria.

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministry of Higher Education
and Scientfiic Research.

جامعة الشهيد الشيخ العربي التبسي
Echahid Cheikh Larbi Tebessi University

قسم علوم المادة **Department of Material Sciences**

دروس وتمارين

ميكانيك الكم 2

من إعداد :

◄ د.بوديار عبيد ◄ أ أستاذ محاضر

السنة الجامعية: 2023-2024

المحتويات

مقدمة iii

1 العزم الحركي و السبين 1

1.1 العزم الحركي J 1
2.1 علاقات التبادل 1
3.1 العزم المداري و الدوال الهارمونية الكروية 2
4.1 العزم الزاوي للسبين 8
5.1 تجربة شتيرن و غيرلاخ 9

2 جمع العزوم الحركية 13

1.2 جمع 2 من العزوم 13
2.2 معاملات كلابش غوردن 15
3.2 الرموز 3j- نظرية فيقنر ايكارت- الرموز 6j 17

3 حركة جسيم في حقل مركزي 19

1.3 مسألة القيم الذاتية 19
2.3 جسيم حر 21
3.3 جسيم داخل صندوق 23
4.3 هزاز توافقي ثلاثي الابعاد س 26
5.3 ذرة الهيدروجين و المدارات الذرية 26

4 عموميات حول الطرق التقريبية 29

1.4 نظرية الاضطرابات المستقرة 30
2.4 نظرية الاضطرابات المتعلقة بالزمن 33
3.4 الطريقة التغايرية 37
4.4 الطريقة شبه الكلاسيكية 40
5.4 طريقة هارتري فوك 43

5 اعمال موجهة 47

6 حلول التمارين 51

المصادر 59

الرموز 61

مقدمة

ميكانيكا الكم المتقدمة هي فرع من الفيزياء الذي يعتني بسلوك الأنظمة الفيزيائية على المستوى الدقيق جداً، مثل الذرات والجزيئات والأنظمة الصغيرة الأخرى، باستخدام مبادئ ميكانيكا الكم. تستند ميكانيكا الكم إلى فكرة أن الجسيمات الصغيرة مثل الإلكترونات والفوتونات يمكن وصفها بوجود موجات بدلاً من جسيمات، وتتناول العلاقة بين الطاقة والموجات والترابط الكمومي بين الجسيمات. بالإضافة إلى ذلك، فإن التفاعلات في العالم الكمومي تتم بطريقة مختلفة تمامًا عن العالم الكلاسيكي، حيث تتم الملاحظة بمفاهيم الاحتمالية والاستمرارية بدلاً من القيم المحددة بوضوح.

تعتبر ميكانيكا الكم المتقدمة مجالًا مثيرًا ومعقدًا، وتتضمن العديد من التطبيقات العملية المهمة، مثل الحوسبة الكمومية التي تعتمد على مبادئ العدم التحديد والترابط الكمومي للمعالجة الموازية للمعلومات. بالإضافة إلى ذلك، فإن التشفير الكمومي يقدم نهجًا جديدًا وآمنًا لتبادل المعلومات وحمايتها من التجسس.

على الرغم من الإنجازات الكبيرة التي تحققت في ميكانيكا الكم، إلا أن هناك تحديا للباحثين في هذا المجال، مثل تطوير نماذج أكثر دقة للتنبؤ بسلوك الجسيمات وفهم ذلك بشكل أفضل. بالإضافة لذلك، يتطلب الاستفادة من التكنولوجيا الكمومية تحديات تقنية كبيرة، مثل تعديل طرق الحوسبة الكمية بموارد أقل وأكثر فعالية.

باختصار، ميكانيكا الكم المتقدمة هي مجال مثير ومعقد يعتمد على مفاهيم العالم الكمومي، ويقدم تحديات وفرصًا عديدة للباحثين والمهندسين لاستكشاف وتطوير تطبيقات جديدة ومبتكرة. في ميكانيك الكم المتقدمة، يتناول الباحثون مجموعة متنوعة من المواضيع المعقدة والتي تشمل الظواهر الفيزيائية ذات الأبعاد الدقيقة. يُعَدّ برنامج التدرج في هذا المجال أحد الأساليب الحيوية التي تسهم في فهم أعمق لهذه الظواهر. يتضمن هذا البرنامج عدة مكونات أساسية، بدءًا من مفهوم العزم الحركي وانتقالاً إلى دراسة تركيب العزوم الحركية. يعمل العزم الحركي على تحديد سلوك الجسيمات على المستوى الكمي، مما يتيح فهمًا أعمق لديناميات النظم الفيزيائية.

تتوجه الميكانيك الكمية المتقدمة أيضًا إلى دراسة الحركة في حقول مركزية، حيث يتم التركيز على

الجسيمات التي تتحرك في كمون مرزي مثل الحقل الكهرباءي وحقل الجاذبية. يساهم هذا التحليل في التمكن من استعمال النظم شديدة التعقيد مثل الانوية ،الذرات،ة.

بالإضافة إلى ذلك، يُعَدّ برنامج التدرج في ميكانيك الكم المتقدمة مكانًا لاستكشاف العموميات حول الحسابات الغير دقيقة مثل الطرق الاضطرابية. تهدف هذه النظريات الى استخدام حسابات تقريبية في حالة الأنظمة شديدة التعقيد مما يتيح لنا الدخول في الظواهر التي نعجز عن معالجتها .ة.

يتطلب منا اتقان مهارات رياضية وتحليلية متقدمة. ومع ذلك، يمكن أن يسهم برنامج التدرج في تسهيل فهم هذه النظريات المعقدة وتطبيقاتها في مجالات متنوعة من الفيزياء والعلوم الأخرى. لقد وضعت في هذه المطبوعة خلاصة خبرة لعدة سنوات حيث قمت بتدريس هذا المقياس لعدة شعب كالفيزياء النظرية ، الاشعاع و فيزياء المواد . وقد حاولت الاسهاب في الشرح وتبسيطه الى اقصى الحدود ، حتى يكون مناسبا لجميع المستويات كما قمت بتدعيمه بمجموعة من التمارين ، أرجو أن أكون قد ساهمت بهذا العمل البسيط
في تعميم الفائدة ونشر العلم.ا

الاستاذ : بوديار عبيد
أستاذ محاضر أ
جامعة الشهيد الشيخ العربي التبسي

باب 1

العزم الحركي و السبين

1.1 العزم الحركي J

تلعب دوران الأنظمة دورًا أساسيًا في الفيزياء، سواء في الطيف الذري، أو التصوير بالرنين المغناطيسي، أو حتى في استقرار المركبات الفضائية. تحتل قوانين حفظ العزم الحركي مكانة مركزية، بأهمية مماثلة لحفظ الطاقة. يتم استخدام هذا المبدأ عند دراسة ذرة الهيدروجين.

في التاريخ، أكدت أعمال إيلي كارتان في عام 1913 أهمية الدوران في الفيزياء، عندما قام بتصنيف مجموعات لي واكتشف وجود قيم "نصف صحيحة" للعزم الحركي تتوافق مع الدوران نصف الصحيح الخاص بالعديد من الجسيمات.

تتميز كمية العزم الحركي بخاصية العالمية، وهي تختلف عن مستويات الطاقة التي تعتمد على النظام المعني. يتم اختيار قيم العزم الحركي من "كتالوج عالمي" نقوم بإنشائه. بينما تعتمد هذه القيم على النظام، إلا أنها تكون معيارية "جاهزة للارتداء" وليست "مصممة خصيصًا". السبب في ذلك هو أن ثابت بلانك يمتلك بُعد العزم الحركي، ويعتبر الوحدة الطبيعية لقياسات العزم الحركي، مما يجعل الكمية تشمل عوامل بلا أبعاد.

2.1 علاقات التبادل

تعريف 1

يُعرف العزم الحركي L لجسيم، المستمد من كمية الحركة p وموضعه r بالنسبة للأصل، بشكل كلاسيكي بواسطة الضرب الاتجاهي:

$$L = r \times p.$$

في ميكانيكا الكم، نمدد هذا التعريف بوضع فرضية أن الملاحظ الاتجاهي $\hat{L}$ (الذي يشمل مجموعة من الثلاث ملاحظات) المقابل لهذا العزم الحركي يُعبر عنه بـ:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p},$$

وفي سياق صيغة دالة الموجة، يُمثل على النحو التالي:

$$\hat{L} = i\hat{r} \times \nabla.$$

أكثر من هذا التمثيل المحدد، ما هو مهم حقًا هو علاقات الاقتران لهذه الثلاث ملاحظات $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, و $\hat{L}_z$، حيث أن هذه العلاقات مستقلة عن التمثيل المستخدم. تعتبر هذه العلاقات الجبرية حاسمة لأنها تحدد الخصائص الميكانيكية الكمية للعزم الحركي وتتميز في المعادلة:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$
$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x. : \hat{L} \times \hat{L} = i\hat{L}.$$
$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

هذا التعبير الموجز يلخص البنية الجبرية الأساسية للعزم الحركي في ميكانيكا الكم.

3.1 العزم المداري و الدوال الهارمونية الكروية

تُعرف مؤثرات الرفع والخفض، $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$، والتي تلعب دورًا حيويًا في ميكانيكا الكم، كالتالي:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$
$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

حيث تنطبق العلاقات المترافقة $\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$ و $\hat{L}_-^\dagger = \hat{L}_+$.

تشير هذه العلاقات إلى أن $\hat{L}_x$، $\hat{L}_y$، و $\hat{L}_z$ لا تشترك في دالة ذات قيمة ذاتية مشتركة. عند فحص ما إذا كان $\hat{L}$ يتبادل مع هذه المؤثرات، يتضح أنه لا يتبادل أيضًا. هذا يقودنا لاستكشاف المؤثر $\hat{L}^2$، حيث نجد أنه يتبادل مع كل مكون من مكونات العزم الحركي:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0.$$

تعني هذه القابلية للتبادل أن أي زوج من هذه المؤثرات يمكن تحليله في وقت واحد، مما يبسط الإطار الرياضي في بعض الحالات.

يعتبر العمل بإحداثيات كارتيزية تحديًا بسبب الترابط بين الإحداثيات الثلاث، بينما توفر الإحداثيات الكروية نهجًا أبسط، نظرًا لتوافقها الطبيعي مع خصائص التماثل لمشاكل العزم الحركي في ميكانيكا الكم. يُمثل مؤثر الكمية الحركية في ميكانيكا الكم بالصورة $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. عند التعبير عنه في الإحداثيات الكروية، يأخذ مؤثر التدرج ∇ الشكل:

$$\nabla = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi},$$

حيث $\hat{r}$, $\hat{\theta}$, و $\hat{\phi}$ هي متجهات وحدة في الاتجاهات الشعاعية، القطبية، والزوالية على التوالي.

وبالتالي، يُعطى مكونات مؤثر الكمية الحركية في هذه الإحداثيات بواسطة:

$$\hat{p}_r = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r},$$

$$\hat{p}_\theta = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta},$$

$$\hat{p}_\phi = -i\hbar\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}.$$

استخدام هذه العناصر يمكننا من بناء مؤثر العزم الحركي $\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p}$. بالنظر إلى خصائص الضرب التبادلي في الإحداثيات الكروية، حيث $\hat{r} \times \hat{r} = 0$, $\hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\phi}$, و $\hat{r} \times \hat{\phi} = -\hat{\theta}$، وبالأخذ في الاعتبار أن $\vec{r} = r\hat{r}$، فإن التعبير عن $\hat{L}$ يبسط بشكل كبير. نجد:

$$\hat{L} = -i\hbar\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right),$$

والذي يحتوي على مصطلحين فقط، مما يعكس عدم وجود اعتمادية على r.

لإيجاد تعابير للمكونات الديكارتية لـ $\hat{L}$ (أي $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, و $\hat{L}_z$) في الإحداثيات الكروية، من المفيد التعبير عن $\hat{\theta}$ و $\hat{\phi}$ من حيث المتجهات الوحدة الديكارتية:

$$\hat{\theta} = \cos\theta\cos\phi\hat{x} + \cos\theta\sin\phi\hat{y} - \sin\theta\hat{z},$$

$$\hat{\phi} = -sin\phi\hat{x} + \cos\phi\hat{y}.$$

استبدال هذه التعابير في صيغة $\hat{L}$ يوفر فهمًا أكثر بديهية لكيفية تصرف العزم الحركي في أنظمة الإحداثيات المختلفة، وبخاصة تبسيط الحسابات مقارنةً بالإحداثيات الديكارتية. تُعطى تعبيرات مكونات مؤثر العزم الحركي $\hat{L}$ في الإحداثيات الكروية على النحو التالي:

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial \phi}\right),$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

هذه المؤثرات تصف مكونات العزم الحركي على طول المحاور الديكارتية عند استخدام الإحداثيات الكروية، مما يلتقط الديناميكيات الدورانية حول كل محور. للمبتدئ، قد يكون محاولة إيجاد دالة ذات قيمة ذاتية لمؤثر $\hat{L}$، مؤثر العزم الحركي، تحديًا كبيرًا بسبب الحاجة لحل ثلاث معادلات ذات قيم ذاتية لمكوناته $\hat{L}_x$، $\hat{L}_y$، و $\hat{L}_z$ في آن واحد. يُعتبر التركيز على $\hat{L}^2$، مربع مؤثر العزم الحركي، بالإضافة إلى $\hat{L}_z$ استراتيجية أفضل. هذا مفيد لأن المُعامل $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$، ما يدل على أن $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ يمكن أن يشتركا في دوال ذات قيم ذاتية مشتركة، وعادةً ما يكون من الأسهل إيجاد دالة ذات قيمة ذاتية لـ $\hat{L}_z$.

لفهم تعقيد معادلة القيمة الذاتية لـ $\hat{L}^2$، دعونا نستعرض تعبيرها أولاً:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}\cdot\hat{L} = -\hbar^2\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\cdot\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right).$$

هذا الضرب النقطي يشمل تعقيدات لأن $\hat{\theta}$ يعتمد على كل من θ و ϕ، والمؤثرات تعمل على الدوال التي تتبعها. على سبيل المثال، فكر في:

$$-\hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\cdot\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}.$$

في ضرب متجه بسيط، يجب أن يكون هذا صفراً لأن $\hat{\theta}\cdot\hat{\phi} = 0$، ولكن الأمر يصبح معقدًا عندما تكون المشتقات متورطة. للتبسيط، دعونا ننتقل إلى الإحداثيات الديكارتية:

$$-\hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\cdot\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\phi}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}\right) = -\hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\cdot\left(\frac{\partial}{\partial\phi}(-\sin\phi\hat{x} + \cos\phi\hat{y})\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\phi}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}\right)$$

$$= \hat{\theta}\frac{1}{sin\theta}\cdot(\cos\phi\hat{x} + \sin\phi\hat{y})\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{1}{\sin\theta}\left(\cos\theta\cos^2\phi + cos\theta\sin^2\phi\right)\frac{\partial}{\partial\theta} = \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta},$$

حيث النتيجة صفر بسبب $\hat{\theta}\cdot\hat{\phi} = 0$.

أخيرًا، تبسط التعبير الكامل لـ $\hat{L}^2$ إلى:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right].$$

هذا يوضح البنية الرياضية المعنية في العزم الحركي في ميكانيكا الكم ويترك التقييم التفصيلي للمصطلحات المتبقية كتمرين لاستكشاف أعمق. لإيجاد الدوال الذاتية للمؤثر $\hat{L}^2$، نستخدم المبدأ الذي يقول إن مؤثرين متبادلين يشتركان في مجموعة من الدوال الذاتية المشتركة، كما تعلمنا في القسم السابق. بشكل أساسي، نبدأ بتحديد الدوال الذاتية لمؤثرات أبسط، ثم نجمع الحل الكامل في النهاية. نظراً لأن $\hat{L}^2$ يتبادل مع $\hat{L}_x$، $\hat{L}_y$، و$\hat{L}_z$، يمكن اختيار أي منهم. ومع ذلك، في الإحداثيات الكروية، $\hat{L}_z$ هو الخيار الأسهل (راجع المعادلة 5.3.4).

لنسمي الدالة الذاتية للمؤثر $\hat{L}^2$ بـ Y_{lm}، والمعروفة بالتوافقيات الكروية، حيث يكون $\hat{L}^2 Y_{lm} = \lambda Y_{lm}$، حيث λ هو القيمة الذاتية لها. بما أن $\hat{L}^2$ و$\hat{L}_z$ متبادلان ويشتركان في جزء من الدوال الذاتية، سنستخدم $\hat{L}_z$ لتحديد الجزء المعتمد على ϕ في Y_{lm}، الذي ندعوه $\eta(\phi)$، بحيث يكون $\hat{L}_z\eta(\phi) = c\eta(\phi)$، حيث c هي القيمة الذاتية لـ $\hat{L}_z$.

جزء آخر من Y_{lm} يتم التعبير عنه بـ $g(\theta)$، مما يسمح لنا بكتابة Y_{lm} كـ $Y_{lm} = g(\theta)\eta(\phi)$. بما أن g نفسها مستقلة عن ϕ، فإن لدينا $\hat{L}_z g\eta = g\hat{L}_z\eta$، مما ينتج $\hat{L}_z Y_{lm} = cY_{lm}$. بما أن $\hat{L}_z$ يمثل فعلياً دورانًا بزاوية ϕ حول محور z، فإنه لا يعتمد على r أو θ. ونتيجة لذلك، يمكننا تحويل معادلة التفاضل الجزئي إلى معادلة تفاضل كاملة:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\eta = c\eta \rightarrow -i\hbar\frac{d}{d\phi}\eta = c\eta, \qquad (8.3.4)$$

حيث η هي الدالة الذاتية وc هو قيمتها الذاتية. حل هذه المعادلة هو $\eta(\phi) = \eta_0 e^{i\frac{c}{\hbar}\phi}$، حيث η_0 هو ثابت التطبيع. بينما يمكن أن تأخذ c أي قيمة بشكل عام، تفرض أنظمة فيزيائية معينة، مثل ذرة الهيدروجين التي تظهر تماثل دوراني (تعود إلى حالتها الأصلية بعد دوران 360 درجة)، أن $\eta(\phi + 2\pi) = \eta(\phi)$. تُبسط هذه الشرط إلى:

$$\eta(\phi) = \eta_0 e^{i\frac{c}{\hbar}\phi} = \eta(\phi + 2\pi) = \eta_0 e^{i\frac{c}{\hbar}\phi + i\frac{2c\pi}{\hbar}} \rightarrow \exp\left(i\frac{2c\pi}{\hbar}\right) = 1.$$

هذا يعني أن القيمة الذاتية c يجب أن تأخذ قيمًا محدودة بحيث:

$$\frac{c}{\hbar}2\pi = m2\pi \text{ أو } c = m\hbar,$$

حيث m هو عدد صحيح يعرف باسم رقم الكم للعزم الزاوي المغناطيسي. يُظهر هذا أن قيم eigenvalues للمؤثر $\hat{L}_z$ مُقننة، وهذه القننة تأتي من التماثل الدوراني للنظام. تُعبر الدالة الذاتية $\eta(\phi)$ كالتالي: $\eta(\phi) = \eta_0 e^{im\phi}$، حيث يتم تحديد η_0 من خلال تطبيع الدالة الذاتية:

$$\int_0^{2\pi} \eta^*(\phi)\eta(\phi)d\phi = \eta_0^2 2\pi = 1 \rightarrow \eta_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

ومن ثم $\eta(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$. معادلة eigen لـ $\hat{L}_z$ هي:

$$\hat{L}_z \eta(\phi) = m\hbar\eta(\phi). \tag{9.3.4}$$

عند ضرب $\eta(\phi)$ بدالة أخرى $g(\theta)$، التي لا تعتمد على ϕ، فإن الدالة الناتجة تظل دالة ذاتية لـ $\hat{L}_z$. هذا يفسر لماذا كُتبت الدالة الناتجة في القسم السابق على شكل $Y_{lm} = \eta g$.

نظراً لأن $\hat{L}_z$ و $\hat{L}^2$ يتشاركان نفس η، يمكننا استخدام $\eta(\phi)$ للتخلص من مصطلح $\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$ في $\hat{L}^2$ (راجع المعادلة 7.3.4). بشكل محدد، نقوم بإدخال $Y_{lm}(\theta,\phi)$ في معادلة eigen:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \lambda Y_{lm}(\theta,\phi),$$

للحصول على معادلة جديدة لـ $\hat{L}^2$:

$$\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] g(\theta) = \lambda g(\theta) :$$

$$\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] g(\theta) = 0,$$

وحلها $g(\theta)$ هو دالة ليجاندر المرتبطة $P_l^m(\cos\theta)$. إيجاد $P_l^m(\cos\theta)$ رياضياً معقد ولا يضيف أي بصيرة فيزيائية إضافية. لذا، نفضل استخدام مؤثرات السلم لإيجاد تعبيرات لـ Y_{lm}. الدالة ليجاندر المرتبطة، على الرغم من استقلالها عن l في المعادلة، تعتمد على l من خلال m. l تُعرف برقم الكم للعزم الزاوي، وm هو رقم الكم للعزم الزاوي المغناطيسي، وتأخذ القيم $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$. وبالتالي، تُحدد الدالة الذاتية Y_{lm} بالكامل بمجرد تحديد l وm. كما سنثبت، $\lambda = l(l+1)\hbar^2$، حيث $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

معادلات eigen التي تُرضيها $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ هي:

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm},$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}. \tag{10.3.4}$$

في سياق المذبذب التوافقي، تلعب مؤثرات السلم دوراً محورياً في توليد سلسلة من الدوال الذاتية. يُطبق هنا أيضًا أسلوب مماثل. مؤثرات الرفع والخفض، المُشار إليهما بـ $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$، يتم تكوينهما من $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ (راجع المعادلات (3.3.4) و (5.3.4)). تُعرف هذه المؤثرات كما يلي:

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm\hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right),$$

حيث تتضمن التعبيرات عوامل الأُس العقدي، التفاضلات الجزئية بالنسبة للزوايا القطبية والزازالية (θ و ϕ)، ودالة ظل التمام التي تعدل التفاضل الزازالي، متماشية مع نظام الإحداثيات الكروية المستخدم في النظريات المتعلقة بالعزم الزاوي. حيث أن $\hat{L}_- = \hat{L}_+^\dagger$. نظرًا لأن $[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = 0$، و $[\hat{L}_y, \hat{L}^2] = 0$، و $[\hat{L}_\pm, \hat{L}^2] = 0$، فإن $\hat{L}_\pm$ و $\hat{L}^2$ يشتركان في نفس الدوال الذاتية. لذلك، إذا كانت $Y_{lm}(\theta,\phi) = g(\theta)\eta(\phi)$ دالة ذاتية لـ $\hat{L}^2$، فإن $\hat{L}_+ Y_{lm}(\theta,\phi)$ و $\hat{L}_- Y_{lm}(\theta,\phi)$ ستكونان أيضًا دوالاً ذاتية لـ $\hat{L}^2$ (انظر القسم 1.2.4). هذه العلاقة هي المفتاح لإيجاد $g(\theta)$. ومع ذلك، على عكس حالة المذبذب التوافقي، لا نعرف ما الذي ينتجه $\hat{L}_+ Y_{lm}$ أو $\hat{L}_- Y_{lm}$، لذا لا يمكننا استنتاج معادلة مثل المعادلة (12.2.3). نحن هنا بحاجة إلى مساعدة من $\hat{L}_z$.

نطبق $\hat{L}_z\hat{L}_+$ على Y_{lm} للحصول على:

$$\hat{L}_z\hat{L}_+ Y_{lm} = (\hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+) Y_{lm} = (\hat{L}_+ m\hbar + \hbar\hat{L}_+) Y_{lm} = (m+1)\hbar\hat{L}_+ Y_{lm}, \quad (12.3.4)$$

حيث استخدمنا $\hat{L}_z\hat{L}_+ = \hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+$ و $\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$.

$\hat{L}_+ Y_{lm}$ يمثل دالة ذاتية مختلفة لـ $\hat{L}_z$ لكنه يزيد قيمتها الذاتية بـ $\hbar$. هذا هو السبب في أن $\hat{L}_+$ يُعرف بمؤثر الرفع. $\hat{L}_+$ يغير قيمة $\hat{L}_z$ الذاتية، ولكنه يحافظ على قيمة $\hat{L}^2$ الذاتية كما هي. هذا يوضح فرقًا جوهريًا بين مجموعتين من المؤثرات: (1) نظرًا لأن $[\hat{L}_+, \hat{L}^2] = 0$، فإن تطبيق $\hat{L}_+$ على Y_{lm} لا يغير القيمة الذاتية لـ $\hat{L}^2$، و(2) بما أن $[\hat{L}_+, \hat{L}_z] \neq 0$، فإن تطبيق $\hat{L}_+$ على Y_{lm} يغير القيمة الذاتية لـ $\hat{L}_z$.

الآن نحن جاهزون لإيجاد الدالة الذاتية لـ $\hat{L}^2$ بطريقة مماثلة للمعادلة (12.2.3) $(\hat{a}|\phi_0\rangle = 0)$. بافتراض أن قيمة $\hat{L}_z$ الذاتية قد وصلت بالفعل إلى أقصى قيمة لها $l\hbar$، أي $\hat{L}_z Y_{ll} = l\hbar Y_{ll}$، فإن تطبيق $\hat{L}_+$ الإضافي على Y_{ll} يجب أن ينتج صفرًا:

$$\hat{L}_+ Y_{ll} = \hat{L}_+[g_l(\theta)\eta_l(\phi)] = 0 \rightarrow \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) g_l(\theta)\eta_l(\phi) = 0. \quad (13.3.4)$$

بتعويض $\eta_l(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi}$ في المعادلة (13.3.4)، نجد معادلة لـ $g_l(\theta)$,

$$\hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) g_l(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} = 0,$$

والتي تبسط إلى:

$$e^{il\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} g_l(\theta) + i\cot\theta\, g_l(\theta)(il)e^{il\phi} = 0 \rightarrow \frac{d}{d\theta} g_l(\theta) = l\cot\theta\, g_l(\theta). \quad (14.3.4)$$

نبسط المعادلة (14.3.4) إلى:

$$\frac{d}{d\theta}\ln(g_l(\theta)) = l\frac{\cos\theta}{\sin\theta} = l\frac{d}{d\theta}\ln(\sin\theta),$$

وبالتكامل، نحصل على:

$$\ln(g_l(\theta)) = l\ln(\sin\theta) \rightarrow g_l(\theta) = \sin^l\theta.$$

هذا هو حل خاص m) = (l لدالة ليجاندر المرتبطة. نظرًا لأن $g_l(\theta) = \sin^l\theta$ هي جزء θ من الدالة الذاتية لـ $\hat{L}^2$، يمكن كتابة الدالة الذاتية النهائية Y_{lm} مع l و $m = l$ كما يلي:

$$Y_{l,m=l} = g_l\eta_l = B_l\sin^l\theta e^{il\phi}, \qquad (15.3.4)$$

حيث B_l هو ثابت التطبيع. الجدول 1.4 يظهر عدة توافقيات كروية معيارية، حيث تطابق المعادلة (15.3.4) كل Y_{ll} في الجدول. في الاشتقاق السابق، بدأنا من $\hat{L}_+ Y_{ll} = 0$ للحصول على g_l. يمكننا أيضًا البدء من $\hat{L}_- Y_{l,-l} = 0$ للحصول على g_{-l}. تشكل التوافقيات الكروية Y_{lm} سلسلة خاصة من الدوال. يتم تطبيعها بشكل متعامد كما يلي:

$$\langle Y_{lm}|Y_{l'm'}\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{lm}(\theta,\phi)\,Y_{l'm'}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (16.3.4)$$

إذا طبقنا المؤثر $\hat{L}^2$ (كما هو موضح في المعادلة 7.3.4) على التوافقيات الكروية $Y_{lm=l}$ في المعادلة 15.3.4، يمكننا العثور على قيمة الذاتية لـ $\hat{L}^2$ كـ $\lambda = l(l+1)\hbar^2$. سيتم تقديم الاشتقاق التفصيلي لهذه النتيجة في التمرين التالي. على الرغم من أن الدالة الذاتية مستقلة عن m، فإن معادلة الذاتية لـ $\hat{L}^2$ تعتمد على m. لهذا السبب، إذا كان $m \neq l$، يجب تعديل مصطلحات θ و ϕ في $Y_{l,m\neq l}$ بطريقة تلغي جميع المصطلحات التي تتضمن m. يمكن تحقيق ذلك بتطبيق المؤثر الخافض $\hat{L}_-$ على Y_{ll} بشكل متكرر، كما سيتم عرضه لاحقًا.

4.1 العزم الزاوي للسبين

يُعد اكتشاف العزم الحركي الذاتي للدرجة 1/2 إنجازًا ثوريًا في ميكانيكا الكم. كانت خصائص هذه الكمية الفيزيائية، أهميتها، وانتشار تأثيراتها الفيزيائية جميعها غير متوقعة بالكامل.

لتحليل فيزياء الإلكترون بشكل كامل، لا يمكن الاكتفاء بدراسة درجات حريته المتعلقة بالحركة المكانية فقط. بل يتطلب الأمر الاعتراف بوجود درجة حرية داخلية ترتبط بعزم دوران ذاتي. بعبارة أخرى، الإلكترون، الذي يعتبر جسيمًا نقطيًا، يبدو وكأنه "يدور" حول نفسه. نستخدم مصطلح "يدور" بين علامتي اقتباس للإشارة إلى أن هذا النوع من العزم الدوراني هو ظاهرة كمية بحتة ليس لها مقابل كلاسيكي مباشر، عدا كونه عزم دوران.

قد يُشبه المرء الإلكترون بقمة دوارة كمومية. ولكن، من المهم التأكيد على كلمة "كمومي". يظل الإلكترون جسيمًا نقطيًا حتى في مقاييس دقيقة تصل إلى 10^{-18} متر. من الضروري الاعتراف بأن

جسمًا بهذا الحجم الصغير يمكن أن يمتلك عزم دوران ذاتي. يُعد هذا الجانب أكثر إثارة للاهتمام عند النظر إلى الفوتون، الذي رغم كونه جسيمًا نقطيًا وبلا كتلة، يحمل عزم دوران ذاتي، مما يجعله حالة أكثر غرابة من هذه الناحية.

في هذا الفصل، نستكشف مفهوم العزم الحركي الذاتي - شكل فريد وجوهري من عزم الدوران يميز ميكانيكا الكم عن الفيزياء الكلاسيكية. بخلاف العزم الحركي المداري، يعد العزم الحركي الذاتي خاصية أساسية للجسيمات دون الذرية، مستقلة عن خصائصها المكانية. من المستحيل تحديد موقع محدد للعزم الحركي الذاتي داخل الفضاء، حيث أن مشتقاته المكانية - التدرج، الانحراف، والالتواء - جميعها صفر. تؤسس هذه الخاصية العزم الحركي الذاتي كأحد الركائز الأساسية في ميكانيكا الكم، على الرغم من أن ذلك قد يبدو غير منطقي بالنظر إلى أن الإلكترونات، التي هي تقريبًا نقطية ولا تمتلك بنية داخلية واضحة، تظهر سلوك الدوران.

العزم الحركي الذاتي له أهمية كبيرة في الفيزياء، خاصة في تأثيره على المغناطيسية، بطريقة مماثلة لتأثير الشحنة الكهربائية، ولكن مع تفاعلات أكثر تعقيدًا. في إطار ميكانيكا الكم، يرتبط العزم الحركي الذاتي ارتباطًا وثيقًا بالأعداد الكمومية، والحالات الذاتية، والمؤثرات، والتدوين الذي تمت مناقشته سابقًا في الفصول 7 إلى 10. الجسيمات دون الذرية مثل الإلكترونات والبروتونات والنيوترونات لديها عزم حركي ذاتي نصف صحيح، بينما الفوتونات والفونونات لديها عزم حركي ذاتي صحيح، مما يؤثر على تصنيفها وسلوكها في عالم الفيزياء الجسيمية.

5.1 تجربة شتيرن و غيرلاخ

بين عامي 1921 و1922، قام والتر جيرلاخ وأوتو شتيرن في ألمانيا بتجربة هزت الأسس الراسخة للفيزياء الكلاسيكية وفتحت آفاقًا جديدة في عالم ميكانيكا الكم. في تجربتهما، قاما بتوجيه شعاع من ذرات الفضة (Ag) خلال مجال مغناطيسي متدرج. بناءً على نظريات الفيزياء الكلاسيكية، كان من المتوقع أن تظهر الذرات توزيعًا موحدًا على شاشة العرض، بأعلى تركيز في المنتصف. ولكن، النتائج التي حصلوا عليها كانت مختلفة تمامًا عن هذه التوقعات.

توضح التجربة كما هو معروض في الشكل 1.6، حيث مرت ذرات الفضة أولًا من خلال جهاز يُعرف بالكوليماتور يُنظمها إلى شعاع ضيق قبل أن تدخل إلى المجال المغناطيسي المتدرج. إذا افترضنا أن الاتجاه الرأسي هو المحور z، فإن التدرج في المجال المغناطيسي على هذا المحور، $\frac{\partial B_z}{\partial z}$، كان كبيرًا. ووفقًا لمعادلات ماكسويل، يجب أن يكون تباعد المجال المغناطيسي صفرًا $(\nabla \cdot B = 0)$، ما يعني أنه على الرغم من وجود تغيرات في المجال المغناطيسي في الاتجاهات x و y ($\frac{\partial B_x}{\partial x}$ و/أو $\frac{\partial B_y}{\partial y}$)، إلا أن قيم

هذه التغيرات كانت أصغر.

الملاحظة الرئيسية تمت مع الإلكترون السابع والأربعين في ذرة الفضة، الذي يوجد في المدار الخارجي ،5s1 مع استكمال جميع الأغلفة الداخلية (1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 4d10 .(5s1 على الرغم من أن ذرة الفضة كانت متعادلة كهربائيًا بامتلاكها عدد متساوٍ من البروتونات والإلكترونات، فقد كانت خصائصها المغناطيسية ناتجة عن هذا الإلكترون غير المزدوج قابلة للكشف. على الشاشة الموضوعة في النهاية المقابلة للتجربة، وبدلاً من رؤية قمة واحدة، تبين أن ذرات الفضة انقسمت إلى مجموعتين متميزتين، مما يدل على وجود توجهين مختلفين للعزم الدوراني الذاتي أو العزم الحركي في الإلكترونات.

هذه الملاحظة كانت حاسمة لأنها كشفت أن الإلكترونات تمتلك خاصية كمية ذاتية تُعرف بالعزم الحركي الذاتي، وهي خاصية لم تكن متوقعة بموجب الفيزياء الكلاسيكية. لقد كان هذا الاكتشاف أساسيًا في تطور ميكانيكا الكم، لا سيما في فهمنا للسلوك الكمومي للإلكترونات. لم تكشف تجربة جيرلاخ وشتيرن فقط عن كمية عزم الدوران ولكن أيضًا عن الطبيعة المنفصلة للحالات الكمومية. تخيل جسيمًا يتحرك حول دائرة نصف قطرها r بسرعة v. الآن، لنفترض أن r يقترب من الصفر بينما $|v|$ يزداد بنسبة تتناسب عكسيًا مع r. في هذه الحالة القصوى، يبدو الجسيم وكأنه يدور حول محوره بسرعة لا نهائية، ولكن مع الحفاظ على عزم دوران محدود. يمكننا تسمية عزم الدوران في هذا السيناريو القصوي بـ "العزم الحركي الذاتي". ومع ذلك، من المهم توخي الحذر هنا، لأن هذه مجرد تشبيه. لا يمكن تصور العزم الحركي الذاتي في ميكانيكا الكم بنفس طريقة تصور دالة الموجة للعزم الدوراني المداري.

مع ذلك، لا يزال العزم الحركي الذاتي يظهر سلوكًا يشبه إلى حد كبير العزم الدوراني التقليدي فيما يتعلق بتحويلات الدوران في الفضاء. نتيجة لذلك، يلتزم بنفس علاقات الارتباط الرياضية كما هو الحال مع مؤثرات العزم الدوراني. تلبي مكونات مؤثر العزم الحركي الذاتي الثلاثة العلاقات التبادلية التالية:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z,$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x,$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y.$$

هذه العلاقات تحدد كيفية تفاعل مكونات العزم الحركي الذاتي مع بعضها البعض، وتضع الأساس لتعريف حالة العزم الحركي الذاتي من حيث مؤثر العزم الحركي الذاتي المربع $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ و $\hat{S}_z$. القيم الذاتية لهذه المؤثرات هي $\hbar^2 S(S+1)$ و $\hbar m_s$ على التوالي، حيث $S \geq |m_s|$. توفر صيغة

ديراك طريقة موجزة لوصف هذه الحالات الدورانية، حيث تُعرف حالات العزم الحركي الذاتي الذاتية كما يلي:

$$\hat{S}^2|S, m_s\rangle = \hbar^2 S(S+1)|S, m_s\rangle,$$
$$\hat{S}_z|S, m_s\rangle = \hbar m_s|S, m_s\rangle.$$

هناك فرقان رئيسيان بين العزم الحركي الذاتي والعزم الدوراني المكاني كما يلي:

- العزم الحركي الذاتي هو خاصية جوهرية فريدة للجسيم، تشبه كتلته. - يمكن أن يكون العدد الكمومي الكلي للعزم الحركي الذاتي S إما نصف صحيح أو صحيح. الجسيمات ذات قيم S نصف صحيحة تظهر خصائص مختلفة بشكل مميز عن تلك التي لها قيم S صحيحة. الجسيمات ذات العزم الحركي الذاتي نصف الصحيح تُسمى فيرميونات (نسبة إلى فيرمي)، بينما تُسمى تلك ذات العزم الحركي الذاتي الصحيح بوزونات (نسبة إلى بوز).

من الأمثلة المعروفة على الفيرميونات الإلكترون والبروتون والنيوترون، وكلها لها $S = 1/2$. من الأمثلة المعروفة على البوزونات الفوتون والديوترون، وكلها لها $S = 1$. لا يمكن للفيرميونات مشاركة حالة كمومية واحدة، التي يتم تحديدها بجميع الأعداد الكمومية المدارية المتوافقة وحالة العزم الحركي الذاتي. من ناحية أخرى، لا يوجد حد لعدد البوزونات التي يمكن أن تشغل نفس الحالة. وبالتالي، عند درجة حرارة الصفر أو قريبة من الصفر، تميل البوزونات إلى شغل الحالة الأساسية، وهو ما يُعرف بتكثيف بوز-آينشتاين.

بما أن عزم الإلكترون الحركي الذاتي هو $1/2$، فهو فيرميون ولديه حالتان دورانيتان هما:

$$|\alpha\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle,$$
$$|\beta\rangle \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

هاتان الحالتان تمثلان التوجهات الأساسية للعزم الحركي الذاتي للفيرميونات مثل الإلكترون. الحالة الكمومية $|\beta\rangle$ مُعرفة للإلكترون بأعداد الكم الدورانية $S = \frac{1}{2}$ و $m_s = -\frac{1}{2}$، ويمكن كتابتها عادةً كالتالي:

$$|\beta\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle.$$

بما أن $S = \frac{1}{2}$ ثابت بالنسبة للإلكترون، فإن هذا التدوين يبسط التواصل في ميكانيكا الكم. وفقًا لمبادئ ميكانيكا الكم، فإن الضربات الداخلية هي:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1,$$

$$\langle\beta|\beta\rangle = 1,$$
$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = 0.$$

هذه الشروط تؤكد على أن الحالات متعامدة ومعرفة بشكل جيد.

عند دمج هذه الحالات الدورانية مع حالات المدار المكاني، يمكننا تعريف الحالات المركبة في ذرة شبيهة بالهيدروجين كالتالي:

$$|n,l,m_l,\frac{1}{2}\rangle = |n,l,m_l\rangle \otimes |\alpha\rangle,$$

$$|n,l,m_l,-\frac{1}{2}\rangle = |n,l,m_l\rangle \otimes |\beta\rangle,$$

حيث يمثل $\otimes$ الجداء المباشر، وهو يوسع فضاء الحالة كما شرح في المناقشات السابقة (مثل الفصل 2). هذا الجداء المباشر ممكن لأن مجموعات الحالات تتوافق مع المتغيرات المستقلة. في كثير من النصوص، غالبًا ما يُ حذف الرمز المباشر لتبسيط التدوين ما لم يكن هناك مصدر للالتباس.

عند أخذ الضربات الداخلية لهذه الحالات مع حالة الموقع $\langle r|$، فإن النتائج هي:

$$\langle r|n,l,m_l,\frac{1}{2}\rangle = \langle r|n,l,m_l\rangle|\alpha\rangle = \psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi)|\alpha\rangle,$$

$$\langle r|n,l,m_l,-\frac{1}{2}\rangle = \langle r|n,l,m_l\rangle|\beta\rangle = \psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi)|\beta\rangle.$$

يتفاعل عزم الدوران للإلكترون مع المجال المغناطيسي من خلال لحظته المغناطيسية المُعرفة كما يلي:

$$m_s = -\frac{ge}{2m_e}S,$$

حيث $g \approx 2.002319$ ويُعرف بمعامل الدوران الشاذ. لذلك، في وجود مجال مغناطيسي على طول المحور z، يصبح الجهد V الذي يختبره الإلكترون:

$$V = -(\mathbf{m}_L + \mathbf{m}_s)\cdot\mathbf{B} = \frac{e}{2m_e}(L+gS)\cdot B = \beta B\frac{\hbar B_z}{h}(L_z + gS_z).$$

وعليه، فإن هاميلتوني الكلي $\hat{H}$ للإلكترون في نظام يشبه الهيدروجين والخاضع لمجال مغناطيسي هو:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{rel}} + \beta B\frac{\hbar B_z}{h}(\hat{L}_z + g\hat{S}_z).$$

هذا الهاميلتوني يصف طاقة الإلكترون مع مراعاة كل من مساهماته المدارية والدورانية تحت تأثير المجال المغناطيسي.

باب 2

جمع العزوم الحركية

استكمالًا لما ناقشناه في الفصلين السابقين، نتناول الآن مسألة جمع عزمين زاويين. على سبيل المثال، قد نرغب في دراسة إلكترون يمتلك كلًا من العزم الزاوي الجوهري وبعض العزم الزاوي المداري، كما في ذرة الهيدروجين الحقيقية. أو قد يكون لدينا نظام يتكون من إلكترونين ونرغب في معرفة القيم الممكنة للعزم الزاوي الكلي للنظام. في الفيزياء الكلاسيكية، العزم الزاوي هو كمية متجهة، والعزم الزاوي الكلي هو ببساطة J = J(1) + J(2). القيم القصوى والدنيا التي يمكن أن يأخذها J تتوافق مع الحالة التي يكون فيها إما J(1) وJ(2) متوازيين بحيث تكون قوة J هي |J(1)| + |J(2)|، أو متعاكسين، حيث تكون قوته |J(1)| - |J(2)|.

مع ذلك، فإن المعاملة للعزم الزاوي في الفيزياء الكمية مختلفة؛ وهذا لا ينبغي أن يكون مفاجئًا في هذه المرحلة، حيث رأينا أن العزم الزاوي في ميكانيكا الكم يخضع لخصائص محددة جدًا. يناقش هذا الفصل كيفية جمع العزمين الزاويين في نظام كمي. سيشير الأسفار (1) و(2) إلى عزمي الدوران اللذين يتم جمعهما طوال هذا الفصل.

1.2 جمع 2 من العزوم

في ميكانيكا الكم، يُمثل العزم الزاوي الكلي بواسطة المؤثر $\hat{J} \equiv \hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)}$ (المعادلة 1.10). قد يُمثل هذا العزم الزاوي المداري لنظامين كميين مستقلين، أو يجمع بين العزم الزاوي المداري والسبين في نظام كمي واحد. الافتراض الأساسي هنا هو أن $\hat{J}_1$ و $\hat{J}_2$ هما عزمان زاويان مستقلان، كل منهما يلتزم بالعلاقات التبادلية القياسية للعزم الزاوي:

$$[\hat{J}_x^{(n)}, \hat{J}_y^{(n)}] = i\hat{J}_z^{(n)}$$

$$[\hat{J}^{(n)^2}, \hat{J}_i^{(n)}] = 0$$

(المعادلة 2.10)

حيث يُشير $n = 1,2$ إلى العزمين الزاويين الفرديين و $i = x, y, z$. تُشير عبارة "وهكذا" إلى علاقات مماثلة للتباديل الدورية.

يعمل المؤثرون $\hat{J}_k^{(1)}$ على متجهات الحالة التي تنتمي إلى فضاء هلبرت H_1، في حين يعمل $\hat{J}_k^{(2)}$ على متجهات الحالة في فضاء هلبرت آخر H_2. يعمل العزم الزاوي الكلي $\hat{J}$ ضمن فضاء الجداء $H = H_1 \otimes H_2$. كما نوقش في الفصل الثاني، تتوافق مكونات $\hat{J}^{(1)}$ مع مكونات $\hat{J}^{(2)}$، وهذا يعني:

$$[\hat{J}_i^{(1)}, \hat{J}_k^{(2)}] = 0 i, k = x, y, z$$

(المعادلة 3.10)

هذا يُظهر أن العزمين الزاويين متوافقان كمقياسين قابلين للملاحظة. ونتيجة لذلك، تتوافق المؤثرات الأربعة $\hat{J}^{(1)2}$، $\hat{J}_z^{(1)}$، $\hat{J}^{(2)2}$، و $\hat{J}_z^{(2)}$ مع بعضها البعض، مما يعني أنها تشترك في مجموعة من المتجهات الذاتية المشتركة. تشكل هذه المتجهات قاعدة للفضاء H، وتعرف باسم القاعدة غير المقترنة، وتُمثل في تدوين ديراك بـ $\{|j_1, m_1, j_2, m_2\}$. تُشير الأرقام داخل الكيت إلى القيم الذاتية المرتبطة بهذه المؤثرات. لأي زوج محدد j_1, j_2، يوجد $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ متجهات في هذه القاعدة.

تلبي هذه المتجهات القاعدية المعادلات الذاتية التالية:

$$\hat{J}^{(1)2}|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

(المعادلة 4.10)

$$\hat{J}_z^{(1)}|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = m_1|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

(المعادلة 5.10)

$$\hat{J}^{(2)2}|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

(المعادلة 6.10)

$$\hat{J}_z^{(2)}|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = m_2|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle.$$

(المعادلة 7.10)

من السهل التحقق من أن مؤثرات العزم الزاوي الكلي تلتزم بالعلاقات التبادلية القياسية:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0.$$

(المعادلة 8.10)

وبالتالي، بالنسبة لأي مؤثر عزم زاوي، يكون لـ $\hat{J}^2$ قيم ذاتية تساوي $j(j+1)$، في حين أن المؤثر المقابل لمكون z من العزم الزاوي الكلي له قيم ذاتية m، تتراوح بين j و $-j$ بخطوات صحيحة لأي j معطى.

السؤال الذي يطرح نفسه عند التعامل مع عزمين زاويين، والذين يتميزان بأعداد الكم j_1 و j_2، هو: ما هي القيم المسموحة لعدد الكم الزاوي الكلي j؟ تعالج نظرية جمع العزم الزاوي هذا السؤال.

النظرية 1.10: القيم المسموح بها لعدد الكم الزاوي الكلي j، بالنظر إلى عزمين زاويين يتوافقان مع أعداد الكم j_1 و j_2، تتراوح من الفرق المطلق إلى مجموع j_1 و j_2. على وجه التحديد، القيم المسموحة لـ j هي:

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, ..., |j_1 - j_2|$$

(المعادلة 9.10)

لكل من هذه القيم من j، يمكن لعدد الكم المغناطيسي m أن يأخذ $(2j+1)$ قيم، وهي:

$$m = j, j-1, ..., -j$$

(المعادلة 10.10)

2.2 معاملات كلابش غوردن

بالنظر إلى المعادلة 12.4، يتبادل $\hat{J}^2$ مع $\hat{J}_1^2$ و $\hat{J}_2^2$ بالإضافة إلى المعادلة 9.4. من المهم ملاحظة أن $\hat{J}^2$ لا يتبادل مع $\hat{J}_{z1}$ و $\hat{J}_{z2}$ على حدة. لذلك، يمكننا وصف حالات النظام بطريقتين، وهما باستخدام مؤثرات العزم الزاوي الكلي $\hat{J}, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2$ واستخدام العزمين الزاويين المنفصلين ومكوناتهما z $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_{z1}, \hat{J}_{z2}$. كلا التمثيلين مرتبطان من خلال تحويل وحدوي. يستخدم التمثيل الأول المتجه الذاتي $|j, m\rangle$ بينما يستخدم الثاني $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$.

يمكننا التعبير عن كل قاعدة بالكامل من حيث الأخرى، حيث يشكل كل مجموعة قاعدة كاملة. يوصف هذا العلاقة بالتوسع التالي:

$$|j, m\rangle = \sum_{j_1, m_1, j_2, m_2} C^{j,m}_{j_1, m_1, j_2, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

(المعادلة 13.4)

يُقترح هذا الصياغة بسبب درجات التحرر للحالات $|j, m\rangle$ و $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ بالنسبة لأعداد الكم m و m_1, m_2 على التوالي، مما يعني أن الأبعادية للفضاء الممتد بواسطة $|j, m\rangle$ يجب أن تكون مماثلة لتلك الممتدة بواسطة $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$.

بأخذ المعادلة 11.4 في الاعتبار، يعطى المكون z للعزم الزاوي الكلي بواسطة:

$$m = m_1 + m_2$$

(المعادلة 14.4)

نقدم علاقة الإغلاق وعلاقة التعامد للمتجهات الذاتية $|j, m\rangle$:

$$\sum_{j_1, m_1, j_2, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle\langle j_1, m_1, j_2, m_2| = I$$

(المعادلة 15.4)

$$\langle j, m | j', m'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

(المعادلة 16.4)

من هنا، يتم تطبيق معاملات كليبش-غوردان أو معاملات الربط الناقل، والتي تلبي الشرط الأول للتعامد والتطبيع:

$$\sum_{j_1, m_1, j_2, m_2} C^{j,m}_{j_1, m_1, j_2, m_2} C^{j', m'}_{j_1, m_1, j_2, m_2} = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

(المعادلة 17.4)

من المهم ملاحظة أن الجمع يتم فقط على فهرس واحد في هذه العلاقات. وبالمثل، يساعد تقديم علاقة الإغلاق في الحفاظ على اكتمال القاعدة. عند دمج علاقة التعامد لمتجهات الكيت $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$، يمكن التعبير عنها على النحو التالي:

$$\sum_{j_1, j_2} \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle\langle j_1, m_1, j_2, m_2| = \delta_{mm'}\delta_{jj'}$$

(المعادلة 19.4)

أو يمكن التعبير عن العلاقة بتركيز على الأعداد الكمية المغناطيسية، محافظة على التعامد بين الحالات المختلفة:

$$\sum_{j_1, j_2} \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle\langle j_1, m_1', j_2, m_2'| = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}$$

(المعادلة 20.4)

كما في المعادلات السابقة، يتم أخذ الجمع على فهرس واحد لكل حالة. من المعادلة 14.4، حيث $m = m_1 + m_2$، يبسط الجمع على m إلى مصطلح واحد بسبب القيود المفروضة بواسطة الأعداد الكمية.

علاوة على ذلك، يمكن أيضًا اعتبار معاملات كليبش-غوردان $C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}$، والتي تربط بين حالات العزم الزاوي $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ والحالة المجمعة $|j, m\rangle$، كمكونات دالة الموجة للحالة $|j, m\rangle$ في تمثيلات m_1 و m_2. يبرز هذا الرأي دور هذه المعاملات في الانتقال بين الحالات المفككة للعزم الزاوي والحالة المجمعة، مما يسهل الحسابات في ميكانيكا الكم التي تشمل الأنظمة المركبة.

3.2 الرموز -3j نظرية فيقنر ايكارت- الرموز 6j

من الممارسات التقليدية، نعتبر قيم $j_{jj} = j_1 \times j_2 \times j_1$ و $j \times j - j\, j$ على أنها حقيقية وموجبة. يتم تحديد معاملات كليبش-غوردان $C^{j}_{j_1 m_1, j_2 m_2}$ وفقًا للتطبيع المشار إليه في المعادلة 17.4. في حالة $j = m = 0$، تعطي الإجراءات الناتج التالي:

$$\delta_{m1,-m2} = \frac{1}{\sqrt{j_1 + j_2 + 1}}$$

(المعادلة 21.4)

بناء قاعدة غير قابلة للانقسام في فضاء المنتج ذي الأبعاد الأعلى بسيط. على سبيل المثال، فكر في:

$$\epsilon = \epsilon_{j_1} \otimes \epsilon_{j_2} \otimes \epsilon_{j_3}$$

(المعادلة 22.4)

باتباع هذا الإعداد، يتصرف التحويل كما لو كان حالة $|jm\rangle$:

$$\sum_{m_1, m_2, m_3} |j_1 m_1, j_2 m_2, j_3 m_3\rangle\langle j_1 m_1, j_2 m_2, j_3 m_3|$$

(المعادلة 23.4)

إذا كان $|jm\rangle = |00\rangle$ (المعادلة 24.4)، وباستبدال المعادلة 21.4، نقوم بعد ذلك ببناء ما يُعرف بالدالة الثابتة:

$$\sum_{j_1, m_1} \sum_{j_2, m_2} \sum_{j_3, m_3} \delta_{m1,-m2} \delta_{m2,-m3}$$

(المعادلة 25.4)

هذا الحساب يؤدي إلى تقديم ما يُعرف برمز ويغنر :3-j

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \equiv \left((-1)^{j_1 - j_2 - m_3}\right) \frac{\delta_{m_1 + m_2 + m_3, 0}}{\sqrt{(2j_3 + 1)(j_1 + j_2 - j_3)!}}$$

هذا الرمز يمثل مكونات تحويلات العزم الزاوي، مدمجًا توازن الأعداد الكمية ومعكسًا التماثلات وقواعد الاختيار للربط الزاوي في ميكانيكا الكم. تبسط اتفاقية الطور خصائص التماثل لرمز ويغنر 3j. عند تبديل عمودين أو تغيير كل m_i إلى $-m_i$، يظهر عامل إضافي $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$. نتيجةً لذلك، تترك التبديلات الدورانية للأعمدة رمز ويغنر 3j دون تغيير:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}$$

(المعادلة 27.4)

مع متابعة علاقة العكس، لدينا:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3-(m_1+m_2+m_3)} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

(المعادلة 28.4)

في نظام يتكون من جسيمين، حيث يرتبط كل جسيم بمؤثر العزم الزاوي الكلي $\hat{J}_1$ و $\hat{J}_2$، ويمثل $\hat{J}$ العزم الزاوي الكلي للنظام بأكمله، نعيد صياغة تمثيل معاملات كليبش-غوردان كما يلي:

$$\Gamma = (-1)^{j_1+j_2-j} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

(المعادلة 29.4)

يُعبر عن التحويل العكسي للمعادلة 13.4 بالشكل التالي:

$$\sum_{m_1,m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = \delta_{m,m_1+m_2}$$

(المعادلة 30.4)

من هنا، تسمح معاملات كليبش-غوردان بالتعبير عن متجهات القاعدة القديمة $\{|j_1, m_1, j_2, m_2\}$ من خلال متجهات القاعدة الجديدة $\{|j, m\}$. يمكن أيضًا تمثيل الجداء القياسي في المعادلة 30.4، بالنظر إلى أن معاملات كليبش-غوردان تُختار لتكون حقيقية، على النحو التالي:

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1,m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$$

هذا التنسيق يسمح بالتحويل المباشر بين مجموعات القواعد القديمة والجديدة، مما يمكّن من تمثيل وحساب حالات العزم الزاوي في ميكانيكا الكم.

باب 3

حركة جسيم في حقل مركزي

نحن جاهزون الآن لدراسة فئة عامة من الأنظمة الفيزيائية ثلاثية الأبعاد. هذه الأنظمة تتطور في إطار إمكانية مركزية، أي إمكانية طاقة تعتمد فقط على المسافة r من الأصل: $V(r) = V(r)$. عند استخدام الإحداثيات الكروية لوصف الفضاء ثلاثي الأبعاد، لا تعتمد الإمكانية المركزية على المتغيرات الزاوية θ و ϕ. بمعنى آخر، هذه الأنظمة تتمتع بتماثل كروي، أي أنها ثابتة تحت التدوير. سنرى في هذا الفصل أن العمل بالإحداثيات الكروية يسمح لنا بتبسيط معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن للنظام ثلاثي الأبعاد للتركيز على الجزء الشعاعي من دالة الموجة. هذا يحولها بشكل فعال إلى مشكلة قيمة ذاتية لنظام أحادي البعد يُعرف على المحور شبه الحقيقي الموجب. سنتعمق في إمكانية كولومب - وهي مثال على الإمكانية المركزية - خصوصًا في سياق ذرة الهيدروجين، والتي سنغطيها بشكل شامل لاحقًا.

1.3 مسألة القيم الذاتية

كما هو معتاد في ميكانيكا الكم، تُشفر ديناميكيات النظام من خلال حل معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن. في تمثيل الموضع، يتضمن هذا صياغة مسألة القيمة الذاتية لمؤثر هاميلتون، والتي تظهر كمعادلة تفاضلية لدوال الموجة للحالات الثابتة:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r).$$

(المعادلة 1.11)

هنا، نستخدم μ لتمثيل كتلة الجسيم، لتمييزها عن العدد الكمي المغناطيسي m، الذي يلعب أيضًا دورًا مهمًا في الحل. استخدام الإحداثيات الكروية يبسط تعبير المشغل لابلاسي، المعطى بواسطة:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

(المعادلة 2.11)

الخطوة الأساسية في حل معادلة القيمة الذاتية (المعادلة 1.11) هي التعرف على أنه يمكن تحليل المشغل لابلاسي على النحو التالي:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2r^2}\hat{L}^2,$$

حيث يمثل $\hat{L}^2$ مشغل العزم الزاوي المربع. هذه الصياغة تفصل بين المكونات الشعاعية والزاوية، مما يسمح بنهج أكثر استقامة لحل مسألة القيمة الذاتية. كما هو معتاد في ميكانيكا الكم، يتم توصيف سلوك النظام من خلال حل معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن. لنظام يتأثر بإمكانية مركزية، نمثل مسألة قيمة ذاتية لمؤثر هاملتون على شكل معادلة تفاضلية تخص دوال الموجة للحالات الثابتة:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi) + V(r)\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi).$$

(المعادلة 1.11)

في هذا السياق، μ يعبر عن كتلة الجسيم، ويختلف عن العدد الكمي المغناطيسي m، الذي يحمل أهمية كبيرة في الحلول القادمة. استخدام الإحداثيات الكروية يبسط المشغل لابلاسي كما يلي:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

(المعادلة 2.11)

خطوة حاسمة في حل معادلة القيمة الذاتية (المعادلة 1.11) هي استخدام تحليل المشغل لابلاسي لفصل المتغيرات:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2r^2}\hat{L}^2,$$

حيث $\hat{L}^2$ هو مشغل العزم الزاوي المربع. هذا الفصل بين المكونات الشعاعية والزاوية أساسي لتبسيط مسألة القيمة الذاتية.

بالنسبة للجزء الزاوي، فإن دوال الموجة الذاتية لـ $\hat{L}^2$ هي الدوال الكروية $Y^m(\theta,\phi)$. وبالتالي، نبحث عن حل لمعادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن بتقسيمها إلى جزء شعاعي $R(r)$ وجزء زاوي $Y^m(\theta,\phi)$:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y^m(\theta,\phi). \quad (11.5)$$

تحويل المعادلة الأصلية إلى معادلة تفاضلية عادية للدالة الشعاعية $R(r)$ يبسط المشكلة:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]R=0.(11.6)$$

استبدال $R(r)=\frac{\chi(r)}{r}$ في المعادلة 6.11 يقود إلى:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r)=0.(11.8)$$

هذه الإعداد يصف مشكلة القيمة الذاتية أحادية البعد في الإمكانية المعدلة $V(r)=V(r)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}$، والتي تجمع بين الإمكانية الأصلية ومصطلح "الطرد المركزي".

الحلول لهذه المعادلة الشعاعية يجب أن تظل محدودة في كل مكان، وخاصة في الأصل، مما يفرض $\chi(0)=0$ لتلبية شروط الحدود. هذا الشرط صحيح حتى للإمكانيات التي تتباعد عندما $r\to 0$.

شرط التطبيع لدالة الموجة الشعاعية يضمن أن التكامل $|R(r)|^2r^2dr$ على كل الفضاء يساوي واحد، مما يعكس كثافة الاحتمال للعثور على الجسيم ضمن مسافة شعاعية معينة من الأصل. هذا التكوين يبرز كيف تتعامل ميكانيكا الكم مع ديناميكيات الأنظمة تحت الإمكان

يات المركزية، مؤكداً على دور العزم الزاوي في تحديد التوزيع المكاني للحالات الكمية.

2.3 جسيم حر

في القسم 1.4.2، استكشفنا ديناميكيات جسيم حر في بُعد واحد. عند توسيع هذا إلى ثلاثة أبعاد، تصبح معادلة شرودينغر للجسيم الحر:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V_0\psi=E\psi$$

حيث V_0 هو إمكانية ثابتة. غالبًا، يمكننا أن نضع $V_0=0$، مما يبسط المعادلة إلى:

$$\nabla^2\psi+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

(المعادلة 42.6)

من خلال تعريف $k^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$، نجد حلاً على الشكل $\psi=Ce^{ikr}$، حيث C ثابت و r يمثل المسافة الشعاعية.

لتطبيق تطبيع الصندوق، نقيد $\psi(r)$ ضمن حجم مكعبي ذي جانب L، والذي هو كبير لكن محدود. يؤدي ذلك إلى:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{ikr}$$

هنا، تكون قيم متجه الموجة k مُقَرّبة بحيث $k_i = \frac{2\pi n_i}{L}$، حيث n_i (أي (n_x, n_y, n_z) تأخذ قيم صحيحة.

عند تحويل المعادلة (42.6) إلى إحداثيات كروية قطبية (r, θ, ϕ)، واتباع الإجراء الموجود في القسم 2.6، نستنتج المعادلة الشعاعية:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0$$

(المعادلة 43.6)

من خلال تعريف $kr = \rho$، تبسط هذه إلى:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R = 0$$

(المعادلة 44.6)

اختيار $R_l(\rho) = \xi_l(\rho)/\rho$ يقودنا إلى:

$$\frac{d^2\xi}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d\xi}{d\rho} + \left(1 - \frac{(l+1/2)^2}{\rho^2}\right)\xi = 0$$

(المعادلة 45.6)

هذا هو شكل معادلة بسل. الحل يُعطى من حيث دوال بسل الكروية، التي يتم تعريفها بهذه المعادلة. الحلول المعيارية تتضمن شروط الحدود التي تعكس القيود الفيزيائية للمشكلة، مثل الاقتصار على النهايات في الأصل والتلاشي في اللانهاية للحالات المربوطة، أو التطابق مع حالات الانتثار عند مسافات كبيرة للجسيمات الحرة. هنا، C_1 و C_2 هما ثوابت و J_l تمثل دوال بيسل. تُعرّف الدوال الكروية بيسل $j_l(\rho)$ ودوال نيومان الكروية $n_l(\rho)$ بالنسبة لدوال بيسل كما يلي:

$$j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (6.47)$$

و

$$n_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}\left(-J_{l+\frac{1}{2}}(-\rho) + J_{l-\frac{1}{2}}(\rho)\right) \quad (6.48)$$

وبالتالي، يمكن التعبير عن الجزء الشعاعي من دالة الموجة $R_l(\rho)$ كما يلي:

$$R_l(\rho) = A j_l(\rho) + B n_l(\rho) \quad (6.49)$$

حيث A و B هما ثوابت جديدة.
سلوك الدوال الكروية بيسل ونيومان عندما $\rho \to 0$ يقدر بـ:

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad (6.50)$$

و

$$n_l(\rho) \approx -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \quad (6.51)$$

تقترح المعادلة (51.6) أنه يجب أن تكون $B = 0$ لتجنب تباعد $R_l(\rho)$ عندما $\rho \to 0$، مما سيخالف الشرط الذي يقضي بأن تكون دالة الموجة لها قيمة محدودة في كل مكان. لذلك نستنتج أن:

$$R_l(\rho) = A j_l(\rho)$$

وبالتالي، طاقة الجسيم الحر هي:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

دالة الموجة لحالة العزم الزاوي l هي:

$$\psi_l(r,\theta,\phi) = A j_l(kr) Y_m(\theta,\phi) \quad (6.52)$$

يُعطى حل أكثر تعميمًا للجسيم الحر في حالة الطاقة E كما يلي:

$$\psi_k(r,\theta,\phi) = \sum_{l,m} A_l j_l(kr) Y_m(\theta,\phi)$$

هذا التعبير يجمع بين جميع حالات العزم الزاوي الممكنة، المفهرسة بواسطة l و m، مع دمج الدوال الكروية بيسل والتوافقيات الكروية لتشكيل حل كامل لجسيم حر في فضاء ثلاثي الأبعاد.

3.3 جسيم داخل صندوق

البئر الكروي اللانهائي يعمل كنظير ثلاثي الأبعاد لإمكانية الصندوق التي نوقشت في القسم 1.6. هنا، يُحبس جسيم بكتلة μ داخل حدود كروية بنصف قطر a، وخارجها يوجد حاجز لا يمكن اختراقه مُعرف بالإمكانية:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{لـ} r \geq a \\ 0 & \text{لـ} r < a \end{cases}$$

(المعادلة 13.7)

هذا الترتيب موضح في الشكل 1.7.

بالنسبة لجسيم بعزم زاوي صفر ($l = 0$)، تبسط المعادلة الشعاعية بشكل كبير. حل المعادلة الشعاعية لـ $l \neq 0$ يتطلب استخدام دوال بيسل ونيومان الكروية، وهي أكثر تعقيدًا ولا تُغطى في هذا الكتاب.

في السيناريو حيث $l = 0$، من الأفضل استخدام النموذج المحدد للمعادلة الشعاعية، المشار إليها بالمعادلة (11.7). نستخدم اللاحقة '0' مع U للدلالة على أن الحل ينطبق فقط على $l = 0$. داخل البئر، تبسط المعادلة إلى:

$$\frac{d^2U_0}{dr^2} + k^2U_0 = 0, (7.14)$$

حيث يُعرف k^2 كالتالي:

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} (7.15)$$

المعادلتان (14.7) و (15.7) تعكسان تلك الخاصة ببئر إمكاني أحادي البعد لانهائي، مما يعزز اختيارنا لهذا النموذج المحدد من المعادلة الشعاعية. يمكن التعبير عن الحل مباشرة كالتالي:

$$U_0(r) = A\sin(kr) + B\cos(kr). (7.16)$$

ما هي شروط الحدود المناسبة في هذه الحالة؟ من المهم تذكر أن الحل للمعادلة الشعاعية لا يُعطى مباشرة بواسطة U، بل بواسطة $R = \frac{U}{r}$. هذا التحويل ضروري لأن دالة الموجة الفيزيائية $R(r)$ يجب أن تكون محدودة ومتسقة في كل الفضاء، وخاصة في الأصل حيث يجب أن تكون $R(0)$ محدودة. بالإضافة إلى ذلك، يجب أن تلبي $U_0(r)$ شرط الصفر عند حدود البئر $(r = a)$، لضمان بقاء الجسيم محبوسًا داخل الحد الكروي. يترجم هذا الشرط الحدودي إلى التأكد من أن $U_0(a) = 0$، مما يؤدي عادةً إلى كمية مستويات الطاقة داخل البئر، حيث تلبي فقط بعض الأطوال الموجية k هذا الشرط مع $U_0(r)$ التي تمثلها الدوال الموجية.

لمنع التباعد عندما $r \to 0$، من الضروري أن $U(r = 0) = 0$، مما يتطلب تحديد $B = 0$ في الحل المعطى في المعادلة (16.7). علاوة على ذلك، نظرًا لطبيعة الحاجز غير القابل للاختراق، يجب أيضًا أن $U(r = a) = 0$، مما يؤدي إلى الشرط $ka = n\pi$. وبالتالي، يمكن التعبير عن مستويات الطاقة لجسيم بعزم زاوي $l = 0$ في بئر كروي لا نهائي كالتالي:

$$E_n(l = 0) = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}.$$

(المعادلة 17.7)

مستويات الطاقة لجسيم بعزم زاوي $l = 0$ في بئر كروي لا نهائي تماثل تلك الموجودة في بئر مستطيل لا نهائي أحادي البعد، مع استبدال عرض البئر المستطيل بنصف قطر البئر الكروي.

من المهم الإشارة إلى أن التفسير المقدم هنا بخصوص اختفاء $U(r)$ عند $r = 0$ مبسط نوعًا ما وهو في الأساس لأغراض توضيحية. يمكن العثور على مناقشات أكثر تفصيلاً في المراجع مثل شانكار.

في هذا السيناريو، يُعطى الدالة الموجية الكاملة بواسطة:

$$\psi_{n00}(r,\theta,\phi) = R_n(r)\,Y_{0,0}(\theta,\phi) = \frac{A}{\sqrt{4\pi r}}\sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right).$$

لتطبيع هذا، نقوم بالتكامل:

$$A^2\int_0^a \left(\frac{\sin(n\pi r/a)}{\sqrt{4\pi r}}\right)^2 r^2 dr = 1,$$

مما ينتج $A = \sqrt{2/a}$. وبالتالي، تصبح الدالة الموجية:

$$\psi_{n00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a r}}\sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right). \quad (7.18)$$

يُعطى قيمة التوقع لـ r لجسيم في مثل هذه الإمكانية من خلال دمج مربع الجزء الشعاعي من الدالة الموجية موزونًا بـ r، والذي يؤدي إلى:

$$\langle r\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a r\sin^2\left(\frac{n\pi r}{a}\right)dr,$$

مما يؤدي إلى:

$$\langle r\rangle = \frac{a}{2}.$$

هذه النتيجة تعني أنه، في المتوسط، يوجد الجسيم على مسافة $a/2$ من مركز البئر الكروي، وهي نتيجة تعكس التوقع الكلاسيكي لمثل هذه الإمكانية المتماثلة. المسافة الشعاعية المتوسطة r مستقلة عن العدد الكمي n: زيادة طاقة الجسيم تغير توزيع احتماليته، لكنها لا تؤثر على موقعه المتوسط. إذا كان $l \neq 0$، فإن r ستعتمد على كل من n و l.

4.3 هزاز توافقي ثلاثي الابعاد س

5.3 ذرة الهيدروجين و المدارات الذرية

على عكس النماذج الكمومية البسيطة مثل الجسيم في صندوق أو المذبذب التوافقي، يمثل ذرة الهيدروجين نظامًا فيزيائيًا حقيقيًا يمكن وصفه بدقة باستخدام ميكانيكا الكم. ليس فقط لأهميتها الذاتية، بل تقدم الحلول لمعادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين نماذج أولية للمدارات الذرية المستخدمة في الحسابات التقريبية للذرات والجزيئات الأكثر تعقيدًا.

بالنسبة لإلكترون في مجال نواة بشحنة ،Ze+ يمكن كتابة معادلة شرودنجر كالتالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) - \frac{Ze^2}{r}\psi(r) = E\psi(r)$$

من المفيد استخدام الوحدات الذرية حيث يُقاس الطول بالبور:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 5.29 \times 10^{-11} \text{ م} \equiv 1 \text{ بور},$$

والطاقة بالهارتري:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \approx 4.358 \times 10^{-18} \text{ ج} = 27.211 \text{ فولت إلكترون} \equiv 1 \text{ هارتري}.$$

وحدات الإلكترون فولت (eV) هي وحدة مريحة لطاقات الذرات، حيث يُعرف الإلكترون فولت بأنه الطاقة التي يكتسبها الإلكترون عندما يُسرع عبر فرق جهد قدره 1 فولت. تبلغ طاقة الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين $-1/2$ هارتري أو -13.6 إلكترون فولت. التحويل إلى الوحدات الذرية يعادل تعيين $\hbar = e = m = 1$ في جميع الصيغ التي تحتوي على هذه الثوابت. إعادة كتابة معادلة شرودنجر في الوحدات الذرية تبسطها إلى:

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\psi(r) - \frac{Z}{r}\psi(r) = E\psi(r)$$

نظرًا للتماثل الكروي لطاقة الجهد (وظيفة من r فقط)، فمن المفيد حل هذه المشكلة باستخدام الإحداثيات القطبية الكروية. يستفيد هذا النهج من التماثل لتبسيط المعادلة ويسمح بفصل المتغيرات لإيجاد الحلول التي تمثل الأماكن المحتملة للإلكترونات (المدارات) في مختلف الحالات الطاقية حول النواة.

في الإحداثيات الكروية القطبية r, θ, ϕ، يُعطى تعبير عن عامل لابلاسيان الذي يُعد ضروريًا لحل معادلة شرودنجر لذرة تشبه الهيدروجين، على النحو التالي:

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\psi(r,\theta,\phi)-\frac{Z}{r}\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi)$$

يُظهر المعادل 30.7 أن الحدود الثاني والثالث في لابلاسيان تمثل عامل الزخم الزاوي $\hat{L}^2$. وبالتالي، يمكن أن يكون للمعادلة 26.8 حلول قابلة للفصل من النموذج:

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\,Y_{lm}(\theta,\phi)$$

بتعويض هذا النموذج في المعادلة 26.8 واستخدام معادلة قيمة ذاتية للزخم الزاوي، نستنتج معادلة تفاضلية عادية للدالة الشعاعية $R(r)$:

$$-\frac{1}{2r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{2r^2}-\frac{Z}{r}R(r)=ER(r)$$

هنا، في نطاق المتغير r، يعمل مصطلح الزخم الزاوي $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ كإضافة فعالة إلى طاقة الجهد، ويمكن تحديده بأنه قوة الطرد المركزي التي تدفع الإلكترون للخارج، في مواجهة جذب كولومب. بإجراء الاشتقاقات المتتالية والتبسيط، نحصل على:

$$\frac{1}{2}R''(r)+\frac{1}{r}R'(r)+\left(\frac{Z}{r}-\frac{l(l+1)}{2r^2}+E\right)R(r)=0$$

عندما $r\to\infty$، نستكشف الحلول الأسمبتوتية. في التقريب الأسمبتوتي، تبسط المعادلة إلى:

$$R''(r)-2|E|R(r)\approx 0$$

بالنظر إلى أن الطاقة E سالبة للحالات المقيدة، فإن حلول هذه المعادلة هي من النموذج:

$$R(r)\approx \text{ثابت}\times e^{\pm\sqrt{2|E|}r}$$

نرفض الأس الإيجابي كحل غير مقبول فيزيائيًا لأنه يعني أن $R(r)$ ستقترب من اللانهاية كما $r\to\infty$، مما يخالف الشرط القائل بأن دالة الموجة يجب أن تظل محدودة في كل مكان. باختيار الأس السالب وتعيين $E=-\frac{Z^2}{2}$، وهو طاقة الحالة الأرضية في نظرية بور (بالوحدات الذرية)، نحصل على:

$$R(r)\approx \text{ثابت}\times e^{-Zr}$$

هذا التعامل يوضح كيف تؤدي النمذجة الكمومية لذرة الهيدروجين إلى تفسيرات فيزيائية قابلة للقياس والحلول ذات المعنى. تبين أن التقريب الأسمبتوتي، الذي يبسط المعادلة، هو في الواقع حل دقيق للمعادلة الشعاعية عندما $l=0$، وهو ما حدث بشكل مشابه لمشكلة المذبذب التوافقي التي نوقشت

في فصل سابق. تُعرف الحلول بـ $R_{nl}(r)$، حيث يُشار إلى n بأنها العدد الكمي الرئيسي، و l يمثل الزخم الزاوي، والذي يعمل كمعامل في المعادلة الشعاعية. يتوافق هذا الحل المحدد مع $R_{10}(r)$.

يجب تطبيع الحل وفقًا للشرط التالي:

$$\int_0^\infty [R_{10}(r)]^2 r^2 \, dr = 1$$

مع الأخذ بعين الاعتبار التكامل المحدد:

$$\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} \, dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

نحصل على دالة شعاعية معيارية:

$$R_{10}(r) = 2Z^{3/2} e^{-Zr}$$

نظرًا لأن هذه الدالة لا تحتوي على عقد، يتم التعرف عليها على أنها حالة الأرض للذرة المشابهة للهيدروجين. بضربها في الدالة الكروية $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$، نحصل على دالة الموجة الكاملة:

$$\psi_{100}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}$$

والتي تُعرف بشكل تقليدي بوظيفة $1s$، $\psi_{1s}(r)$.

باستخدام التكامل المبسط لدالة تتمتع بالتناظر الكروي، يمكن كتابة شرط التعيير لدالة الموجة $1s$ كما يلي:

$$\int_0^\infty [\psi_{1s}(r)]^2 4\pi r^2 \, dr = 1$$

هذا الاشتقاق الشامل لا يؤكد فقط صحة الحل الأسمبتوتي لكل دقيق تحت ظروف معينة، بل يوفر أيضًا الخطوات اللازمة لتطبيع واستخدام الدالة في الأوصاف الميكانيكية الكمومية للذرات المشابهة للهيدروجين.

باب 4

عموميات حول الطرق التقريبية

نظرية الاضطراب هي طريقة رياضية تستخدم على نطاق واسع في مختلف المجالات مثل الفيزياء والكيمياء، ولا تقتصر على ميكانيكا الكم فقط. في الواقع، قبل ظهور ميكانيكا الكم بوقت طويل، كان الفيزيائيون يستخدمون نظرية الاضطراب بفعالية كأداة تحليلية حاسمة. إحدى التطبيقات المحددة داخل الكيمياء الكمية تشمل تقدير تآثر الإلكترونات باستخدام هذه النظرية.

المبدأ الأساسي لنظرية الاضطراب يتضمن تحليل نظام فيزيائي حيث من الصعب الحصول على حلول دقيقة. تقترب النظرية من هذا من خلال تقسيم هاملتوني النظام إلى مكونين: جزء قابل للحل وجزء مشكل يفتقر إلى حل تحليلي. عادةً ما يُعبر عن الهاملتوني بـ $H = H_0 + H_1$، حيث H_0 هو المكون الأبسط مع قيم وحالات ذاتية معروفة. يعقد إدخال H_1 النظام، ولكن يمكن التعامل معه إذا اعتبر صغيرًا بالنسبة لـ H_0. هذا يسمح بتقريب قيم وحالات النظام الذاتية من خلال معاملة H كـ $H = H_0 + H_1$. تستكشف نظرية الاضطراب كيف تتأثر هذه الحلول عندما يخضع النظام للاضطراب المقدم من H_1.

توجد منهجيات متعددة ضمن نظرية الاضطراب، ولكن هنا نركز على منهج رايلي-شرودنغر. في هذا الإطار، يحدد الهاملتوني، H، النظام قيد الدراسة. الحلول لمعادلة شرودنغر لهذا الهاملتوني، المعطاة بـ

$$H\psi_n = E_n\psi_n$$

تشمل قيم الطاقة الذاتية والدوال الذاتية. يتم تفهرسها بواسطة n، والتي تشمل مجموعة من ثلاثة أعداد كمية (n, l, m).

تميز النظرية بين حالتين: الحالة غير المنحطة، حيث كل دالة ذاتية ψ_n مرتبطة بشكل فريد بقيمة طاقة محددة E_n، والحالة المنحطة، حيث تنتمي دوال ذاتية متعددة ψ_n إلى نفس قيمة الطاقة E_n.

1.4 نظرية الاضطرابات المستقرة

لنفترض أن لدينا نظامًا موصوفًا بقيم ذاتية ودوال ذاتية معروفة أو يمكن الحصول عليها بسهولة:

$$\psi_n^{(0)} = H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$$

نكتب هاميلتوني النظام على النحو التالي:

$$H = H_0 + \lambda H_1$$

حيث λ هو معامل الاضطراب مع $0 \leq \lambda \leq 1$. الآن، تصبح معادلة شرودنجر للنظام:

$$(H_0 + \lambda H_1)\psi_n = E_n\psi_n$$

نظرًا لأن هاميلتوني H يعتمد على λ، يجب أن تعتمد الدوال الذاتية ψ_n والقيم الذاتية E_n أيضًا على λ. لذلك، يمكن توسيع ψ_n و E_n في سلسلة توسعية بالنسبة لـ λ:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots$$

حيث نستخدم الاختصارات التالية في التوسعة:

$$E_n^{(k)} = \left.\frac{\partial^k E_n}{\partial\lambda^k}\right|_{\lambda=0} \frac{1}{k!}$$

$$\psi_n^{(k)} = \left.\frac{\partial^k \psi_n}{\partial\lambda^k}\right|_{\lambda=0} \frac{1}{k!}$$

إن E_n و ψ_n لنظام هما مجموع الحدود التصحيحية. من الضروري أن يُؤخذ في الاعتبار تقارب هذه السلاسل التوسعية، حيث يجب تقطيع السلسلة عمليًا.

عند استخدام السلاسل التوسعية في معادلة شرودنجر، نحصل على:

$$(H_0+\lambda H_1)(\psi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\lambda^2\psi_n^{(2)}+\dots) = (E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2 E_n^{(2)}+\dots)(\psi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\lambda^2\psi_n^{(2)}+\dots)$$

للحفاظ على المساواة لكل $0 \leq \lambda \leq 1$، لكل قوة من λ، يجب أن تكون جميع الحدود في الجانب الأيسر مساوية لتلك الموجودة في الجانب الأيمن. هذا يؤدي إلى:

$$H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$$

لتوضيح وإعادة صياغة المعادلات المقدمة باستخدام تنسيق LaTeX، ولشرح السياق والتطبيق بشكل أفضل، إليك النسخة المعدلة:

نبدأ بالهاميلتوني $H = H_0 + \lambda H_1$ ومعادلة شرودنجر للنظام المضطرب:

$$(H_0 + \lambda H_1)\psi_n = E_n\psi_n$$

عند التوسع، نعبر عن القيم الذاتية والدوال الذاتية من حيث سلسلة القوى في λ:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots$$

بتطبيق هذه التوسعات على معادلة شرودنجر المضطربة، نحاول مطابقة الحدود ذات القوى المتساوية لـ λ. هذا ينتج مجموعة من المعادلات:
في الرتبة الثانية لـ λ، لدينا:

$$H_0\psi_n^{(2)} + H_1\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}$$

يمكن تعميم هذه المعادلات لأي رتبة k من الاضطراب كالتالي:

$$\sum_{i=0}^{k} H_0\psi_n^{(k-i)} + H_1\psi_n^{(i)} = \sum_{i=0}^{k} E_n^{(k-i)}\psi_n^{(i)}$$

المعادلة للرتبة الصفرية توفر القيم الذاتية والدوال الذاتية غير المضطربة (أو الرتبة الصفرية):

$$H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$$

نفترض أن الدوال الذاتية لـ H_0 متعامدة تمامًا، لذلك:

$$\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = \delta_{mn}$$

ثم يتم الحصول على الطاقة من الرتبة الصفرية من:

$$E_n^{(0)} = \langle\psi_n^{(0)}|H_0|\psi_n^{(0)}\rangle$$

من خلال تطبيق هذه الطريقة بشكل منهجي، يمكن حساب تصحيحات الطاقة $\left(E_n^{(k)}\right)$ والدوال الذاتية $\left(\psi_n^{(k)}\right)$ لكل رتبة k، بشرط أن يكون لدينا جميع التصحيحات اللازمة من الرتب السابقة. هذا يوفر طريقة منهجية لتقريب القيم الذاتية والدوال الذاتية للنظام عندما يتم تعطيله بواسطة H_1. لتوضيح وإعادة صياغة المعادلات والأوصاف المقدمة، سنقوم بتنسيقها باستخدام LaTeX للتعبيرات الرياضية وشرح كل خطوة بشكل أكثر وضوحًا:
عند تشغيل $\psi_m^{(0)}$ من اليسار على كلا الجانبين من المعادلة، يمكننا استنتاج العلاقة التالية:

$$\langle\psi_m^{(0)}|H_0\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|H_1\psi_n^{(0)}\rangle = \langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(0)}\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}\rangle$$

باستخدام الأورثوغونالية $\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = \delta_{mn}$ وخاصية أن H_0 عامل هرميتي $(= \langle\psi_m^{(0)}|H_0\psi_n^{(1)}\rangle$ $\langle H_0\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle)$، تبسط المعادلة إلى:

$$\langle\psi_m^{(0)}|H_0\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|H_1\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\delta_{mn} + E_n^{(1)}\delta_{mn}$$

نظرًا لحالتين: 1. $m = n$: تبسط المعادلة أكثر إلى:

$$\langle\psi_n^{(0)}|H_1|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}$$

2. $m \neq n$: يمكن إعادة كتابة المعادلة كالتالي:

$$\langle\psi_m^{(0)}|H_1|\psi_n^{(0)}\rangle = -\langle\psi_m^{(0)}|H_0\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

مع مزيد من التبسيط، بالنظر إلى أن $\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$ لـ $m \neq n$، نحصل على:

$$\langle\psi_m^{(0)}|H_1|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$$

أخيرًا، يمكن إعادة صياغة المعادلة الرئيسية للتأكيد على العلاقات بين الاضطرابات وحلول الرتبة الصفر:

$$H_1\psi_n^{(0)} - \psi_n^{(1)}H_0 = \psi_n^{(1)}E_n^{(0)} - E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}$$

هذا يوحي بأن $\psi_n^{(1)}$، التصحيح الرتبة الأولى للدالة الذاتية، يمكن بناؤها كمجموع خطي للحلول الدقيقة لـ H_0. يوفر هذا خيارًا ملائمًا، على الرغم من أنه ليس فريدًا، لقاعدة أورثونورمال كاملة.

تجلب هذه الإعادة صياغة والتوضيح وضوحًا للحسابات والآثار المترتبة على تطبيق نظرية الاضطراب على الأنظمة الميكانيكية الكمومية. لإعادة صياغة النص والمعادلات المقدمة، مع تحسين الوضوح والتماسك باستخدام تنسيق LaTeX:

نعتبر التصحيحات $\psi_n^{(k)}$ للحالة الذاتية، التي يمكن بناؤها كمزيج خطي من الحلول الدقيقة لـ H_0. وعليه، نأخذ:

$$\psi_n^{(k)} = \sum_\mu C_{n\mu}^{(k)}\psi_\mu^{(0)}$$

حيث يجب تحديد معاملات التوسع $C_{n\mu}^{(k)}$. لإيجاد معامل التوسع $C_{n\mu}^{(1)}$، نستخدم المعادلة المضطربة المعاد كتابتها مع $k = 1$ ودمج التوسع من المعادلة:

$$\sum_\mu C_{n\mu}^{(1)}\langle\psi_\mu^{(0)}|H_0|\psi_\mu^{(0)}\rangle - E_n^{(0)}\langle\psi_\mu^{(0)}|\psi_\mu^{(0)}\rangle = \langle\psi_\mu^{(0)}|H_1|\psi_n^{(0)}\rangle$$

بتبسيط ذلك باستخدام التعامدية للحالات الذاتية $\langle\psi_\mu^{(0)}|\psi_\mu^{(0)}\rangle = \delta_{\mu n}$، نشتق:

$$C_{n\mu}^{(1)} = \frac{\langle\psi_\mu^{(0)}|H_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_\mu^{(0)}} \quad \text{لـ} \mu \neq n$$

من المهم ملاحظة أن المعادلة (20.7) صالحة فقط لـ $\mu \neq n$، وليست صالحة لـ $\mu = n$. وبالتالي، نحصل على:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{\mu \neq n} \frac{\langle \psi_\mu^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_\mu^{(0)}} \psi_\mu^{(0)}$$

بالإضافة إلى ذلك، وجدنا أنه إذا كان $\psi_n^{(1)}$ يلبي المعادلة (18.7)، فإن $\psi_n^{(1)} + A\psi_n^{(0)}$ يلبيها أيضًا، لأي ثابت A. هذا يوفر لنا الحرية لطرح مصطلح $\psi_n^{(0)}$، وبالتالي، لا حاجة لتضمين مصطلح $\mu = n$ في المجموع لبناء $\psi_n^{(1)}$.

تساعد هذه الصياغة على توضيح الطريقة لبناء التصحيحات التقريبية للحالات الذاتية لنظام كمي موصوف بالهاميلتوني $H = H_0 + \lambda H_1$، مستفيدة من خصائص H_0 والاضطراب H_1.

2.4 نظرية الاضطرابات المتعلقة بالزمن

تعريف 1

نستكشف هاميلتونيات مستقلة عن الزمن $\hat{H}(0)$ التي تخضع لتعديلات بسبب الاضطرابات المعتمدة على الزمن $\delta H(t)$. تستخدم تحليلاتنا صورة التفاعل في ميكانيكا الكم، حيث يتم دمج التطور الزمني الناتج عن $\hat{H}(0)$ في العوامل، على غرار صورة هايزنبرغ، بينما يؤثر التطور الزمني الناتج عن $\delta H(t)$ على الحالات، على غرار صورة شرودنجر. نقوم ببناء سلسلة التقريب بناءً على قوى $\delta H(t)$ ونفحص بدقة احتمالات الانتقال من الرتبة الأولى للاضطرابات المألوفة. بالنسبة للانتقالات من حالة مبدئية متقطعة إلى حالة نهائية ضمن استمرارية، نستخرج معدلات الانتقال التي يلخصها قاعدة فيرمي الذهبية. بالإضافة إلى ذلك، نمذج بشكل صريح ونحل معادلة شرودنجر لحالة متقطعة تتحلل إلى استمرارية تحت تأثير اضطراب ثابت.

أما بالنسبة للتطبيقات، فنحن ندرس ظواهر مثل التأين الذاتي، تأين الهيدروجين بواسطة الإشعاع، ومعدلات الامتصاص والإصدار المحفز في أنظمة الذرية ذات المستويين. نستفيد من تحليل أينشتاين للذرات ذات المستويين والإشعاع الأسود في التوازن الحراري لتحديد معدل الإصدار العفوي.

نقاشنا حول هاميلتونيات المعتمدة على الزمن قد أبرز الصعوبات والتحديات في إيجاد حلول دقيقة للمعادلات التفاضلية التي تحكم معاملات الزمن $c_n(t)$. في معظم الحالات، وخاصة خارج الحالات البسيطة مثل مشكلة الفترة الزمنية المزدوجة التي نوقشت سابقًا، لا تتوفر حلول دقيقة بسهولة. لذلك، نعتمد عادةً على حلول تقريبية، يمكن تطويرها من خلال توسعة الاضطراب:

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots$$

هنا، $c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$، وما إلى ذلك، تمثل سعات الرتبة الأولى، الثانية، وهكذا، بالنسبة لمعامل قوة الجهد المعتمد على الزمن. الطريقة المستخدمة لاشتقاق هذه الحلول تتضمن عملية تكرارية مشابهة لتلك المستخدمة في نظرية الاضطراب المستقلة عن الزمن. إذا كانت الحالة i هي الوحيدة المشغولة في البداية، نبدأ بتقريب c_n على الجانب الأيمن من المعادلة التفاضلية بواسطة $c_n^{(0)} = \delta_{ni}$ (مستقلة عن t)، ثم نستخدم هذا للربط بين المشتقة الزمنية لـ $c_n^{(1)}$، ندمج المعادلة التفاضلية للحصول على $c_n^{(1)}$، ومن ثم نقوم بإدخال $c_n^{(1)}$ مرة أخرى في المعادلة لاشتقاق $c_n^{(2)}$، وهكذا. هذه الطريقة التكرارية هي كيف طور ديراك نظرية الاضطراب المعتمدة على الزمن في عام 1927.

بدلاً من العمل فقط مع $c_n(t)$، نقترح التركيز على مشغل التطور الزمني $U_I(t, t_0)$ في صورة التفاعل، وهو مفهوم سنوضحه لاحقًا. نشتق توسعة الاضطراب لـ $U_I(t, t_0)$، وفي النهاية نربط عناصر المصفوفة لـ U_I بـ $c_n(t)$. على الرغم من أن هذا النهج قد يبدو زائدًا لمجرد حل مشكلات بسيطة في ميكانيكا الكم غير النسبية، فإن الصيغة التشغيلية التي نطورها قيمة للغاية. يمكن تطبيقها على الفور على مشكلات أكثر تعقيدًا، بما في ذلك نظرية الحقل الكمومي النسبي ونظرية العديد من الأجسام.

مشغل التطور الزمني في صورة التفاعل مُعرف بـ:

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_I$$

المعادلة التفاضلية المقابلة للحالة كيت في صورة التفاعل هي:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0)$$

يجب حل هذه المعادلة التفاضلية التشغيلية بشرط البداية:

$$U_I(t, t_0)\Big|_{t=t_0} = 1$$

لنلاحظ أن هذه المعادلة التفاضلية، مع شرط البداية، مكافئة للمعادلة التكاملية التالية:

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

من خلال تكرار هذه المعادلة التكاملية، يمكننا الحصول على حل تقريبي:

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} V_I(t') \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') U_I(t'', t_0) dt'' \right) dt'$$

هذه الطريقة التكرارية توفر لنا نهجًا قابلًا للتطبيق لتقريب ديناميكيات الأنظمة التي تخضع لهاميلتونيات المعتمدة على الزمن. السلسلة الممثلة بالمعادلة التالية تُعرف باسم سلسلة دايسون، وقد سميت على اسم فريمان جيه. دايسون، الذي استخدم هذه الطريقة في سياق الديناميكا الكهرومغناطيسية الكمومية المتغايرة .(QED) توفر هذه السلسلة طريقة للتعبير عن مشغل التطور الزمني $U_I(t, t_0)$ كتوسعة من حيث هاملتوني التفاعل $V_I(t)$ المتكامل عبر الزمن:

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 V_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1)V_I(t_2) + \ldots$$

$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1)V_I(t_2)\ldots V_I(t_n) + \ldots$$

تستمر هذه التوسعة بلا نهاية، مع إضافة مصطلحات من مرتبة أعلى في الاضطراب. يتضمن كل مصطلح في السلسلة تكاملات متداخلة لهاملتوني التفاعل المطبق بشكل متتابع في أوقات مختلفة، مرتبة من t_0 إلى t. تعتبر هذه الترتيب ضروري بسبب عدم التبادلية لهاملتوني في أوقات مختلفة، وهو جانب رئيسي في النظريات الكمومية غير التبادلية مثل .QED

إذا تجاهلنا السؤال الصعب حول تقارب هذه السلسلة، والذي يمكن أن يكون غير تافه في نظرية الحقل الكمومي بسبب تصبح التفاعلات قوية أو انهيار تقريبات الاضطراب، يمكننا حساب $U_I(t, t_0)$ إلى أي مرتبة محددة باستخدام نظرية الاضطراب. تسمح هذه الطريقة للفيزيائيين بتقريب تأثيرات التفاعلات في الأنظمة الكمومية بمرور الوقت، مما يوفر رؤى حول الديناميكيات التي تكون في غير ذلك معقدة جدًا لحلها بدقة. بمجرد تحديد مشغل التطور الزمني $U_I(t, t_0)$، يمكننا التنبؤ بتطور الزمن لأي حالة كمومية. على سبيل المثال، إذا كانت الحالة الابتدائية في $t = 0$ هي واحدة من حالات الطاقة الذاتية لـ H_0، فلتحديد الحالة الكيت في وقت لاحق، كل ما نحتاج إليه هو ضربها بـ $U_I(t, 0)$:

$$|i, t_0 = 0; t\rangle_I = U_I(t, 0)|i\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|U_I(t, 0)|i\rangle$$

في الواقع، $\langle n|U_I(t, 0)|i\rangle$ هو بالضبط ما كنا نشير إليه سابقاً كـ $c_n(t)$ [انظر المرجع السابق]. سنناقش هذا بمزيد من التفصيل لاحقاً.

لقد قدمنا سابقاً مشغل التطور الزمني $U(t, t_0)$ في صورة شرودنجر (انظر القسم 2.2). دعونا الآن نستكشف العلاقة بين $U(t, t_0)$ و $U_I(t, t_0)$. تُظهر المراجع السابقة أن:

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar}|\alpha, t_0; t\rangle_S = e^{iH_0 t/\hbar}U(t, t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_S = e^{iH_0 t/\hbar}U(t, t_0)e^{-iH_0 t_0/\hbar}|\alpha, t_0; t_0\rangle_I$$

وبالتالي، لدينا:

$$U_I(t,t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} U(t,t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar}$$

الآن، دعونا ننظر إلى عنصر المصفوفة لـ $U_I(t,t_0)$ بين حالات الطاقة الذاتية لـ H_0:

$$\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = e^{i(E_n t - E_i t_0)/\hbar} \langle n|U(t,t_0)|i\rangle$$

من القسم 2.2، $\langle n|U(t,t_0)|i\rangle$ مُعرف كمقدار انتقال. وبالتالي، $\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle$ لدينا هنا ليس تماماً كما تم تعريف مقدار الانتقال سابقاً. ومع ذلك، فإن احتمال الانتقال المُعرف كمربع القيمة المطلقة لـ $\langle n|U(t,t_0)|i\rangle$ هو نفسه كالكمية المماثلة في صورة التفاعل:

$$|\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle|^2 = |\langle n|U(t,t_0)|i\rangle|^2$$

هذا الشرح يربط بين الصيغ الرسمية للتطور الزمني في ميكانيكا الكم عبر صور مختلفة ويظهر كيف أن صورة التفاعل وصورة شرودنجر مرتبطتان من خلال التحويلات الوحدوية للهاملتوني ومتجهات الحالة. يُذكر عرضاً أنه إذا تم أخذ عناصر مصفوفة $U_I(t,t_0)$ بين الحالات الابتدائية والنهائية التي ليست حالات طاقة ذاتية، على سبيل المثال، بين $|a\rangle$ و $|b\rangle$ (التي هي أيجنكيتس لـ A و B على التوالي)، حيث $[H_0, A] = 0$ و/أو $[H_0, B] = 0$، فإننا عموماً نحصل على:

$$|\langle b|U_I(t,t_0)|a\rangle| = |\langle b|U(t,t_0)|a\rangle|,$$

كما يمكن للقارئ التحقق بسهولة. لحسن الحظ، في المشكلات التي تُثبت صورة التفاعل أنها مفيدة، عادة ما تُؤخذ الحالات الابتدائية والنهائية على أنها حالات طاقة ذاتية لـ H_0. وإلا، كل ما يلزم هو توسيع $|a\rangle$، $|b\rangle$، وهكذا من حيث أيجنكيتس الطاقة لـ H_0.

عائدين إلى $\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle$، نوضح ذلك بالنظر في وضع فيزيائي حيث في $t = t_0$، يُعرف أن النظام في الحالة $|i\rangle$. الحالة كيت في صورة شرودنجر $|i,t_0;t\rangle_S$ هي ثم تكون مساوية لـ $|i\rangle$ مع عامل طور. في تطبيق صورة التفاعل، من المناسب اختيار عامل الطور في $t = t_0$ بحيث:

$$|i,t_0;t_0\rangle_S = e^{-iE_i t_0/\hbar}|i\rangle,$$

مما يعني أنه في صورة التفاعل لدينا المعادلة البسيطة:

$$|i,t_0;t_0\rangle_I = |i\rangle.$$

في وقت لاحق لدينا:

$$|i,t_0;t\rangle_I = U_I(t,t_0)|i\rangle.$$

مقارنة ذلك بالتوسع:

$$|i, t_0; t\rangle_I = \sum_n c_n(t)|n\rangle,$$

نرى أن:

$$c_n(t) = \langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle.$$

نعود الآن إلى التوسع التقريبي لـ $U_I(t, t_0)$. يمكننا أيضاً توسيع $c_n(t)$ كما في السابق، حيث $c_n^{(1)}$ هي من الرتبة الأولى في $V_I(t)$، $c_n^{(2)}$ هي من الرتبة الثانية في $V_I(t)$، وهكذا. مقارنة توسع كلا الجانبين، نحصل على:

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \text{ مستقل عن } t)$$

$$c_n^{(1)}(t) = -i\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle n|V_I(t')|i\rangle dt' = -i\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t'}V_{ni}(t')dt'$$

$$c_n^{(2)}(t) = \left(-i\frac{1}{\hbar}\right)^2\sum_m\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''e^{i\omega_{nm}t'}V_{nm}(t')e^{i\omega_{mi}t''}V_{mi}(t''),$$

حيث استخدمنا:

$$e^{i(E_n-E_i)t/\hbar} = e^{i\omega_{ni}t}.$$

احتمال الانتقال من $|i\rangle$ إلى $|n\rangle$ مع $n \neq i$ يُحصل عليه بواسطة:

$$P(i \to n) = |c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots|^2.$$

3.4 الطريقة التغايرية

تعريف 1

درسنا نظريات الاضطراب التي تتناول الحالات المستقلة عن الزمن والحالات المعتمدة على الزمن. بالنسبة للحالات المستقلة عن الزمن، حصلنا على تصحيحات من الدرجة الأولى والثانية لقيم الطاقة الذاتية ودوالها الذاتية. أما في حالة الاضطرابات المعتمدة على الزمن، ركزنا على احتمالية انتقال نظام من حالة ابتدائية 'i' إلى حالة نهائية 'f'، وتناولنا أيضًا تأثيرات التغيرات الأديباتية والمفاجئة.

في هذا الفصل، نقدم طريقة التقدير، وهي نهج بديل يساعد في بناء حلول تقريبية لدالة الحالة

الأرضية الذاتية. يمكن لهذه الطريقة أن تكون فعّالة أيضًا في تقريب طاقات الحالات المنفصلة الأولى لنظام مقيد. بينما تعتمد نظرية الاضطراب على مجموعة معروفة من الحالات غير المضطربة وتستخدم هاملتوني الاضطراب $H^{(1)}$ لتسهيل التقريبات، تسلك طريقة التقدير مسارًا مختلفًا من خلال البدء بحالة تجريبية افتراضية لتحديد الطاقة المرتبطة بها. توفر كل حالة تجريبية مصممة جيدًا تقديرًا موثوقًا للطاقة، على الرغم من أن الدقة قد تختلف. العنصر الأساسي في طريقة التقدير هو قدرتها على تحسين هذه التخمينات بشكل منهجي من خلال البصيرة الفيزيائية والابتكار، مما يمكّن من صياغة دوال ذاتية دقيقة للغاية.

لنفترض أن ϕ_n هي دوال ذاتية لمعادلة قيم ذاتية حيث $H\phi_n = E_n\phi_n$، حيث يمتد n عبر 0، 1، 2، إلخ. يمكن التعبير عن دالة موجية عشوائية كـ $\psi = \sum_n a_n\phi_n$. فكر في التكامل $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H\psi \, d\tau$. يمكن حساب هذا التكامل على النحو التالي:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H\psi \, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_m a_m^* \phi_m^* H \sum_n a_n \phi_n \, d\tau = \sum_n |a_n|^2 E_n$$

هذا المجموع أكبر من أو يساوي $\sum_n |a_n|^2 E_0$، حيث E_0 هي طاقة الحالة الأرضية. بالنسبة لـ ψ المعيارية، الشرط $\sum_n |a_n|^2 = 1$ صالح. وبالتالي،

$$E_0 \leq \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H\psi \, d\tau$$

هذه المعادلة معروفة بنظرية التقدير. بالنسبة لـ ψ غير المعيارية، تتعدل المعادلة إلى:

$$E_0 \leq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H\psi \, d\tau}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, d\tau}$$

تنص النظرية على أنه بغض النظر عن شكل دالة الموجة ψ، الحد الأعلى لطاقة الحالة الأرضية E_0 يعطى بواسطة $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H\psi \, d\tau$. وبالتالي، يمكن اختيار دالة تجريبية مناسبة $\psi = \phi(c_i)$، تعتمد على معاملات c_i، وتحديد أفضل حد أعلى لطاقة الحالة الأرضية من خلال تصغير التكامل $\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* H\phi \, d\tau$ بالنسبة للمعاملات c_i.

الشروط اللازمة لكي تكون $E(c_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(c_i) H\phi(c_i) \, d\tau$ في الحد الأدنى هي أن يكون الاشتقاق الأول لـ E بالنسبة إلى c_i يساوي صفر، وأن يكون الاشتقاق الثاني لـ E بالنسبة إلى c_i موجبًا. تستخدم هذه الشروط لتحديد القيمة الدنيا لـ E. لتحديد الخطأ في طاقة الحالة الأساسية التي تُقدر باستخدام طريقة التقريب، نفترض أن ϕ هي دالة ذاتية تجريبية للحالة الأرضية بينما ϕ_0 هي الدالة الذاتية الحقيقية للحالة الأرضية. يُعبر عن الفرق بينهما كالتالي: $\phi - \phi_0 = \lambda\Delta\phi$، حيث λ هي ثابت صغير، و$\Delta\phi$ متعامدة مع ϕ_0.

يُعطى الطاقة E_ϕ المرتبطة بالدالة التجريبية ϕ بواسطة:

$$E_\phi = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\phi_0 + \lambda\Delta\phi)^* H(\phi_0 + \lambda\Delta\phi)\, d\tau}{\int_{-\infty}^{\infty} (\phi_0 + \lambda\Delta\phi)^* (\phi_0 + \lambda\Delta\phi)\, d\tau}$$

بتوسيع وتبسيط هذه المعادلة، نجد:

$$E_\phi = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\phi_0^* H(\phi_0 + \lambda\Delta\phi) + \lambda(\Delta\phi)^* H(\phi_0 + \lambda\Delta\phi))\, d\tau}{\int_{-\infty}^{\infty} (\phi_0^*\phi_0 + \lambda\phi_0^*\Delta\phi + \lambda(\Delta\phi)^*\phi_0 + \lambda^2(\Delta\phi)^*\Delta\phi)\, d\tau}$$

هذا يقلل إلى:

$$E_\phi = E_0 + \lambda^2 \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta\phi)^* H\Delta\phi\, d\tau}{1 + \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\Delta\phi)^*\Delta\phi\, d\tau}$$

الذي يقارب إلى:

$$E_\phi = E_0 + \lambda^2 \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta\phi)^* H\Delta\phi\, d\tau}{1} \approx E_0 + \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\Delta\phi)^* H\Delta\phi\, d\tau$$

بافتراض أن مصطلحات λ^2 هي الأساسية وأن القوى الأعلى مثل λ^4 قليلة الأهمية.

وبالتالي، الخطأ في تقدير طاقة التقريب هو من الرتبة λ^2، وهذا يعكس مدى قرب الدالة التجريبية ϕ من تقريب الحالة الأرضية الحقيقية ϕ_0. يوفر هذا الخطأ قياسًا لمدى أهمية انحراف الدالة التجريبية عن الحالة الأرضية الحقيقية من حيث فرق الطاقة. يمكن استخدام طريقة التقريب بفعالية أيضًا لحساب قيم طاقة الحالات المثارة. يتم ذلك من خلال اختيار دوال ذاتية تجريبية متعامدة مع جميع دوال الحالات الأدنى. على سبيل المثال، لنفترض اختيار دالة ذاتية تجريبية ψ_t محددة كالتالي:

$$\psi_t = \psi - \phi_0 \int \phi_0^* \psi\, d\tau$$

بهذا التكوين، يُحسب التكامل $\int \phi_0^* \psi_t\, d\tau$ إلى:

$$\int \phi_0^* \psi_t\, d\tau = \int \phi_0^* \psi\, d\tau - \int \phi_0^* \phi_0\, d\tau \int \phi_0^* \psi\, d\tau$$

بما أن $\int \phi_0^* \phi_0\, d\tau = 1$، يترتب على ذلك أن $\int \phi_0^* \psi_t\, d\tau = 0$، وهذا يؤكد أن ψ_t متعامدة مع دوال الحالة الأرضية، مما يعني أن توسيع $\psi_t = \sum_n a_n \phi_n$ سيستثني المكون a_0.

ونتيجة لذلك، يكون القيمة المتوقعة للطاقة E_t لهذه الدالة التجريبية ψ_t هي:

$$E_t = \int \psi_t^* H \psi_t\, d\tau = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n$$

ومن هنا، يتبع أن:

$$E_t \geq \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_1 \geq E_1$$

تُشير هذه المعادلة إلى أن دالة الموجة التجريبية ψ_t توفر حدًا أعلى لطاقة الحالة المثارة الأولى. بتوسيع هذا المنطق، إذا كانت ψ_t متعامدة مع ϕ_i لـ $i = 0, 1, \ldots, n$، فإن ψ_t ستضع حدًا أعلى للقيمة الذاتية للطاقة $(n+1)$. تسمح هذه الطريقة بتقريب منهجي للحالات ذات الطاقة العليا عن طريق ضمان التعامد مع جميع حالات الطاقة الأدنى.

4.4 الطريقة شبه الكلاسيكية

تعريف 1

طريقة فينتزل-كرامرز-بريلوين ،(WKB) المعروفة أيضًا باسم التقريب شبه الكلاسيكي، تُستخدم بشكل أساسي لتقريب دوال الموجة لأنظمة الكم التي تتفاعل مع إمكانيات ثابتة وبطيئة التغير. يُطلق على هذه الطريقة اسم "شبه الكلاسيكية" لأن الإمكانيات البطيئة التغير عادة لا تظهر السلوكيات الكمومية التي تنشأ من ثنائية موجة-جسيم للمادة. في مثل هذه الحالات، غالبًا ما يكون الوصف الكلاسيكي كافيًا لشرح الظاهرة، مما يجعل طريقة WKB مفيدة بشكل خاص في الحدود شبه الكلاسيكية للأعداد الكمومية الكبيرة

بالنسبة لنظام كمومي أحادي البعد، يمكن كتابة المعادلة الشرودنجر الزمنية المستقلة على النحو التالي:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

أو يمكن إعادة ترتيب هذه المعادلة إلى:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

حيث يمثل $\hbar$ ثابت بلانك المخفض، m كتلة الجسيم، $V(x)$ طاقة الإمكانية، E طاقة الجسيم، و$\psi(x)$ دالة الموجة. تشكل هذه الصيغة الأساس لتطبيق طريقة WKB لاستكشاف الأنظمة الكمومية تحت الشروط المحددة. في الميكانيكا الكلاسيكية، يمكن التعبير عن الطاقة الكلية لنظام ما كما يلي:

$$\frac{p(x)^2}{2m} + V(x) = E$$

حيث $p(x)$ تمثل كمية الحركة للجسيم، وهي دالة للموقع x؛ $V(x)$ هي دالة الطاقة الكامنة، و E هي الطاقة الكلية للنظام. يشير هذا المعادلة إلى أن كمية الحركة (أو بمعنى آخر، الطاقة الحركية) للجسيم تتغير في كل نقطة في الفضاء.

مستخدمين مفهوم ثنائية موجة-جسيم دي بروجلي، يمكن أن يعطى طول موجة الجسيم $\lambda(x)$ كدالة للفضاء بالصيغة التالية:

$$\lambda(x) = \frac{h}{p(x)}$$

حيث $p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}$. إذا كان $E-V(x)$ أقل من صفر، يصبح $p(x)$ تخيليًا، وعمليًا، لا يمكن أن يوجد الجسيم في المناطق التي يحدث فيها هذا.

منتقلين من التحليل الكلاسيكي إلى شبه الكلاسيكي، حيث تُعامل كمية الحركة ليس كعامل ولكن ككمية كلاسيكية، يمكننا استخدام هذه العلاقة لصياغة معادلة شرودنجر من حيث دالة الموجة:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

افتراضًا أن دالة الموجة $\psi(x)$ تكون دالة جيبية، وهي شائعة الاستخدام لتقريب الأنظمة الكمية أحادية البعد:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}$$

حيث $A(x)$ هي سعة دالة الموجة التي تتغير مع الموضع، و $\phi(x)$ هي الطور.

بالتعويض عن هذه الدالة في معادلة شرودنجر، نحصل على:

$$\frac{d^2A(x)}{dx^2} + 2i\frac{dA(x)}{dx}\frac{d\phi(x)}{dx} + iA(x)\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - A(x)\left(\frac{d\phi(x)}{dx}\right)^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A(x)$$

يمكن فصل الأجزاء الحقيقية والتخيلية من هذه المعادلة إلى معادلتين منفصلتين:

$$\frac{d^2A(x)}{dx^2} - A(x)\left(\frac{d\phi(x)}{dx}\right)^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A(x)$$

$$2i\frac{dA(x)}{dx}\frac{d\phi(x)}{dx} + iA(x)\frac{d2\phi(x)}{dx^2} = 0$$

بما أن $V(x)$ تتغير ببطء، فإن $A(x)$ أيضًا تتغير ببطء، مما يسمح لنا بإهمال الاشتقاق الثاني للسعة $\frac{d^2A(x)}{dx^2}$ في حساباتنا. هذا التبسيط هو سمة من سمات تقريب WKB. نتيجة لذلك، تبسط معادلة الطور إلى:

$$\left(\frac{d\phi(x)}{dx}\right)^2 = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

بأخذ تكامل هذه العلاقة، نحصل على:

$$\phi(x) = \int \frac{p(x)}{\hbar}\, dx$$

هذه الصياغة تجسر بين الوصفين الكلاسيكي والكمومي، باستخدام تقريب WKB للأنظمة ذات الإمكانيات البطيئة التغير. وبالتالي، فإن طور دالة الموجة يحمل دلالة فيزيائية، حيث إن معدل تغيره بالنسبة للموقع يتوافق مباشرةً مع كمية الحركة للجسيم. يمكننا تبسيط المعادلة لتصبح:

$$\frac{d}{dx}\left(A^2 \frac{d\phi(x)}{dx}\right) = 0$$

ومن هذا، يترتب أن:

$$A^2 \frac{d\phi(x)}{dx} = \text{ثابت} = C$$

حيث C هو عدد حقيقي. نفترض أن سعة الموجة $A(x)$ تتغير كالتالي:

$$A(x) = \sqrt{\frac{\hbar C}{p(x)}} = \frac{A(x_0)\sqrt{2p(x_0)}}{\sqrt{p(x)}}$$

حيث يُشتق الجانب الأيمن من الشروط الابتدائية.
يمكننا الآن التعبير عن دالة الموجة كما يلي:

$$\psi(x) = A(x) e^{\left(\frac{i}{\hbar}\int p(x)\, dx\right)}$$

باستخدام المعادلة السابقة، يصبح هذا التعبير:

$$\psi(x) = A(x_0)\sqrt{\frac{p(x_0)}{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x)\, dx\right)$$

إذا عرفنا $\psi(x_0) = A(x_0)$، فيمكن تبسيط دالة الموجة إلى:

$$\psi(x) = \psi(x_0)\sqrt{\frac{p(x_0)}{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x)\, dx\right)$$

كثافة احتمال وجود الجسيم في الموقع x تعطى بواسطة:

$$P(x) = |\psi(x)|^2 \propto \frac{1}{p(x)} = \frac{1}{mv(x)}$$

وبالتالي، فإن احتمالية العثور على الجسيم في موقع معين في الفضاء تتناسب عكسيًا مع السرعة الكلاسيكية للجسيم، مما يعني أن تحديد موقع الجسيم يكون أصعب عندما يكون في حركة سريعة. هذا يتوافق مع التوقعات الكلاسيكية، حيث أن الوقت الذي يقضيه الجسيم في أي منطقة يتناسب عكسيًا مع سرعته في تلك المنطقة. لذلك، $P(x)$ يتصرف بشكل مشابه للدالة التوزيعية الكلاسيكية.

نرى لماذا يجب أن تتغير سعة دالة الموجة ببطء شديد كما هو معروض:

$$\psi(x) \propto \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \propto \frac{1}{\sqrt{v(x)}}$$

وبالتالي، يكون تقريب WKB تقريبًا جيدًا حيث تكون $V(x)$ دالة ناعمة وبطيئة التغير بما يكفي.

5.4 طريقة هارتري فوك

تؤدي الطبيعة المتماثلة لتقريب هارتري إلى تمثيل معيب بشكل كبير لدالة الموجة للأنظمة المتعددة الجسيمات. وبفضل مساهمات جون سلاتر، تم تحقيق تقدم من خلال دمج الطبيعة المضادة للتماثل لدالة الموجة، مما أدى إلى تطوير تقريب هارتري-فوك. وقد سُمي هذا الأسلوب نسبةً إلى دوغلاس هارتري وفلاديمير فوك.

في نهج هارتري-فوك، تعتبر إحداثيات دوران كل إلكترون حاسمة. يتم تمثيل إحداثيات الإلكترون بـ $\vec{r}_i s_i$، حيث s_i تمثل الدوران. انطلاقًا من مدارات الإلكترون الفردية، $\phi_i(\vec{r}s)$، يمكن بناء دالة موجية لعدة إلكترونات على النحو التالي:

$$\psi(\vec{r}_1 s_1, \vec{r}_2 s_2, \vec{r}_3 s_3, \ldots) = \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1 s_1) & \phi_1(\vec{r}_2 s_2) & \cdots & \phi_1(\vec{r}_M s_M) \\ \phi_2(\vec{r}_1 s_1) & \phi_2(\vec{r}_2 s_2) & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_M(\vec{r}_1 s_1) & \cdots & \cdots & \phi_M(\vec{r}_M s_M) \end{vmatrix}$$

تُعرف هذه الدالة الموجية باسم محدد سلاتر. يضمن هذا التكوين التماثل الصحيح لدالة الموجة وفقًا لمبدأ باولي للاستبعاد. يضمن تكوين المحدد أنه إذا احتل إلكترونان نفس المدار، مما ينتج عنه وجود صفين متطابقين، فإن المحدد - وبالتالي دالة الموجة - يصبح صفرًا. وبالمثل، إذا احتل إلكترونان نفس النقطة في الفضاء المعمم، بمعنى أن $\vec{r}_i s_i = \vec{r}_j s_j$، فإن المحدد يتلاشى أيضًا بسبب وجود عمودين متطابقين. عندما يتم تبادل إلكترونين، يتوافق ذلك مع تبادل عمودين في المحدد، مما ينتج عنه تغيير في إشارة المحدد.

يُعتبر محدد سلاتر مفيدًا للغاية لأنه يتتبع تلقائيًا الطبيعة المضادة للتماثل لدالة الموجة، مما يبسط حساب أنظمة الإلكترونات المتعددة في ميكانيكا الكم. عند استخدام محدد سلاتر لتقييم الطاقة الإلكترونية الكلية مع الحفاظ على تعيير المدارات، يمكننا استنتاج المدارات من معادلات هارتري-فوك. تدمج هذه المعادلات كلاً من التفاعل الكولومبي ومضاد التماثل اللازم بموجب مبدأ استبعاد باولي، والذي يُعبر عنه من خلال محدد سلاتر.

فيما يلي وصف مُعاد صياغته:

معادلات وإمكانيات هارتري-فوك: 1. **كثافة الشحنة الإلكترونية (ρ):**

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{M} |\phi_j(\vec{r})|^2$$

تمثل هذه كثافة احتمال وجود أي إلكترون في الموضع $\vec{r}$.

2. **كثافة الشحنة التبادلية المعتمدة على المدار (ρ^i_{HF}):**

$$\rho^i_{HF}(\vec{r},\vec{r}') = \frac{\sum_{j=1}^{M} \phi_j^*(\vec{r}')\phi_i(\vec{r}')\phi_i^*(\vec{r})\phi_j(\vec{r})}{\phi_i^*(\vec{r})\phi_i(\vec{r})}$$

تأخذ هذه الكثافة في الاعتبار التفاعلات التبادلية بين الإلكترونات ذات الدوران المماثل، وهي جوهرية للحفاظ على مضاد التماثل في دالة الموجة.

3. **إمكانية كولومب أو هارتري (V_H):**

$$V_H(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}')e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r'$$

تمثل هذه الإمكانية التفاعل الكهروستاتيكي الكلاسيكي بين الإلكترونات.

4. **إمكانية التبادل (V_{ix}):**

$$V_{ix}(\vec{r}) = -\int \frac{\rho^i_{HF}(\vec{r},\vec{r}')e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r'$$

تأخذ هذه في الاعتبار التفاعلات التبادلية الكمومية الخاصة بالفرميونات، والتي تكون مضادة للتماثل تحت تبادل الجسيمات.

معادلة هارتري-فوك الناتجة:

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_N(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{ix}(\vec{r})\right)\phi_i(\vec{r}) = E_i\phi_i(\vec{r})$$

يجب حل هذه المعادلة لكل مدار ϕ_i، مع الأخذ في الاعتبار كلاً من التفاعلات بين الإلكترون والنواة والإلكترونات، بما في ذلك التبادل.

الطاقة الإلكترونية الكلية لهارتري-فوك (E_{HF}):

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^{M} E_i - \frac{1}{2}\int \rho(\vec{r}) V_H(\vec{r}) d^3r - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M}\int \phi_i^*(\vec{r})\phi_i(\vec{r}) V_{ix}(\vec{r}) d^3r$$

تعكس هذه الصيغة الطاقة الإلكترونية مع مراعاة التفاعلات بين الإلكترونات، مصححة للعد المزدوج للتفاعلات في الإمكانيات الكولومبية والتبادلية.

تعد تقريب هارتري-فوك تطويراً لنهج هارتري بإدخال مضاد التماثل مباشرة في دالة الموجة وإدارة التفاعل المعقد بين التفاعلات في نظام متعدد الإلكترونات، مما يجعله أكثر تعقيدًا قليلاً ولكن بدقة أساسية أكبر. حل هذه المعادلات لـ M مدارات ينتج عنه M معادلات، مما يدل على تعقيد وطلب حسابي لطريقة هارتري-فوك. هناك فرق كبير في كيفية التعامل مع التجميع في طريقة هارتري-فوك مقارنة بطريقة هارتري. تحديداً، تشمل تجميعات هارتري-فوك العبارات حيث $i = j$. هذه الإضافة تعكس تصحيحًا حاسمًا: يقوم مصطلح التبادل المقابل لـ $i = j$ بإلغاء مصطلح مكافئ في تجميع كولومب. يُفسر مصطلح $i = j$ في كل من مساهمات كولومب والتبادل كآلية للتحجيم الذاتي للإلكترون.

في نهج هارتري، يتم استبعاد الإلكترون صراحةً من المساهمة في إمكانية الفحص، لتجنب أي تفاعل ذاتي. بالمقابل، في إطار هارتري-فوك، يتم إلغاء هذا التحجيم الذاتي في إمكانية كولومب بدقة بواسطة مصطلح التحجيم الذاتي في إمكانية التبادل. إذا لم يحدث هذا الإلغاء بدقة، ستكون هناك مساهمة "الطاقة الذاتية" في الطاقة الكلية، وهو أمر غير مرغوب فيه لأنه يمثل تقديرًا غير دقيق لطاقة الإلكترون بسبب التفاعل مع نفسه.

غالبًا ما لا تظهر الأشكال التقريبية لإمكانية التبادل هذه الخاصية بالإلغاء. نتيجةً لذلك، يتضمن الطاقة الكلية المحسوبة مكونًا للطاقة الذاتية، والذي يجب إزالته للوصول إلى تقدير دقيق لطاقة هارتري-فوك.

تعتبر دوال موجة هارتري-فوك تقريبًا لدوال موجة الحالة الأساسية للأنظمة المتعددة الجسيمات الحقيقية. الاختلافات في الطاقة التي لا تأخذها طريقة هارتري-فوك في الحسبان تُشار إليها باسم مساهمات الترابط. يمكن تعريف "طاقة الترابط"، E_{corr}، على أنها الفرق بين الطاقة الكلية الصحيحة للنظام وطاقات هارتري-فوك:

$$E_{corr} = E_{exact} - E_{HF}$$

استخدم ريتشارد فينمان مصطلحًا غير "علمي" بعض الشيء لطاقة الترابط، حيث أشار إليها بـ "طاقة خفية" لأنها تُظهر مدى صعوبة تحديد هذه الكمية. يُعتبر هذا التوصيف دقيقًا. على الرغم من توفر

حسابات أكثر دقة مع أجهزة الكمبيوتر عالية الأداء المعاصرة، لا تزال الحسابات لطاقة الخفية تشكل تحديًا.

باب 5

اعمال موجهة

تمرين 1

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

حيث p يمثل كمية حركة الجسيم، وm كتلته، و$V(r)$ الطاقة الكامنة التي تعتمد فقط على المسافة الشعاعية r.

لماذا يتم الانحفاظ العزم الحركي لجسيم دوراني عندما يتحرك تحت تأثير هذ الكمون الكروي ؟ ناقش .

تمرين 2

دعونا نفكر في الهاملتوني $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$. نريد أن نظهر أن مشتقة قيمة التوقع لزخم الحركة الزاوي بالنسبة للوقت تساوي صفر، $\frac{d\langle \mathbf{L} \rangle}{dt} = 0$.

هذه النتيجة تعني أن زخم الحركة الزاوي الكلي محفوظ في نظام ذو طاقة كامنة متماثلة كرويًا.

تمرين 3

ا: ابحث عن تأثير $L_{\pm}$ على ψ.

تمرين 4

ا: أثبت أن $\psi_{\pm} = N(x \pm iy)f(r)$ هي دالة ذاتية لكل من L^2 و L_z، واذكر القيم الذاتية المقابلة.

تمرين 5

: أظهر أن $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})$.

تمرين 6

: حدد القيم الذاتية والمتجهات الذاتية للعامل $\sigma \cdot \hat{n}$، حيث $\hat{n}$ هو متجه وحدة في اتجاه عشوائي.

تمرين 7

: احصل على التمثيل المصفوفي لمكونات الزخم الزاوي لـ $j = \frac{1}{2}$ و $l = 1$.

تمرين 8

ا أظهر أن المصفوفات التالية، التي تُمثل عوامل الزخم الزاوي L_x، L_y، و L_z، تلبي علاقات الابدال للزخم الزاوي:

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{-} \quad L_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \text{-} \quad L_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{-}$$

هذه المصفوفات هي تمثيلات لمكونات الزخم الزاوي في فضاء ثلاثي الأبعاد لحالة كمومية بـ $l = 1$، مثل المدار الذري p. يجب أن تلبي العلاقات التبادلية التالية:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

تمرين 9

حالة ψ للإلكترون معطاة بدالة الموجة:

$$\psi(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin^2\theta \cos\phi \, e^{i\phi}$$

شرط التطبيع للجزء الشعاعي $f(r)$ من دالة الموجة معطى كالتالي:

$$\int_0^\infty |f(r)|^2 r^2 \, dr = 1$$

(أ) النتائج المحتملة لقياس L_z في هذه الحالة: يمثل المؤثر L_z مكون الزخم الزاوي على المحور z، وفي ميكانيكا الكم، يُعطى بـ $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$. لتحديد النتائج المحتملة لقياس L_z، ينبغي تطبيق L_z على دالة الموجة ψ والتحقق مما إذا كانت ψ حالة ذاتية لـ L_z.
تطبيق L_z على ψ:

$$L_z\psi(\theta,\phi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sin^2\theta\cos\phi\, e^{i\phi}\right)$$

هذا يتطلب التفاضل بالنسبة لـ ϕ، والذي سنقوم بحسابه بالتفصيل.
(ب) حساب القيمة المتوقعة لـ L_z: يمكن حساب القيمة المتوقعة لـ L_z باستخدام:

$$\langle L_z\rangle = \int \psi^*(\theta,\phi)L_z\psi(\theta,\phi)\,d\Omega$$

حيث ψ^* هي التوافقية المرافقة لـ ψ.

تمرين 10

مكونات المتجهات العشوائية $\vec{A}$ و $\vec{B}$ تتبادل مع مكونات σ. برهن أن:

$$i(\vec{A}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$$

باب 6

حلول التمارين

حل التمرين 1

في الميكانيكا الكمية، تحليل المُبادلات بين معاملات مختلفة أمر حاسم لفهم خصائص الأنظمة الفيزيائية. هنا، ننظر في الهاملتوني H، والعزم الزاوي L، وعلاقتهما بمربع الزخم p^2 والجهد $V(r)$.

- $[p_z, L_x] = p_y$ ،$[p_y, L_x] = -p_z$ - $[p_x, L_z] = -p_y$ - $[p_x, L_y] = p_z$ - $[p_x, L_x] = 0$

- يتم حساب مُبادل p^2 مع L_x كالتالي: - $[p_x^2, L_x] = 0$ - $[p_y^2, L_x] = -py \cdot pz - pz \cdot py$ - $[p_z^2, L_x] = pz \cdot py + py \cdot pz$ - بجمع هذه القيم، $[p^2, L_x] = 0$. وتؤدي حسابات مماثلة إلى $[p^2, L_y] = 0$ و $[p^2, L_z] = 0$.

- بناءً على $H = \frac{1}{2m}p^2 + V(r)$، نجد: - $[H, L] = \frac{1}{2m}([p^2, L_x] + [p^2, L_y] + [p^2, L_z]) +$ - $[V(r), L]$ - نظرًا لأن $[p^2, L] = 0$ و $[V(r), L] = 0$ (حيث يعتمد $V(r)$ على المسافة الشعاعية فقط، ويتم تبادل المتجه الشعاعي مع العزم الزاوي)، نستنتج أن $[H, L] = 0$.

- $[H, L] = 0$ يُشير إلى أن العزم الزاوي L هو كمية محفوظة. هذه نتيجة أساسية تُشير إلى أنه في جهد متماثل كرويًا، يتم الحفاظ على العزم الزاوي. - المعادلة $\frac{dL}{dt} = [H, L] = 0$ تعزز هذا الحفظ، موضحة أن L لا يتغير مع مرور الوقت.

حل التمرين 2

يمكن التعبير عن معادلة قيمة التوقع لمكون x من زخم الحركة الزاوي كالتالي:

$$\frac{d\langle L_x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [H, L_x] \rangle$$

المبادلة بين الهاملتوني و L_x معطاة بواسطة:

$$[H, L_x] = \left[\frac{p^2}{2m}, L_x\right] + [V, L_x]$$

نفكك p^2 إلى مكوناته الأساسية لنحصل على:

$$[p^2, L_x] = [p_x^2, L_x] + [p_y^2, L_x] + [p_z^2, L_x]$$

كل واحد من هذه المبادلات يُعطى صفر نظرًا لخصائص زخم الحركة الزاوي في ميكانيكا الكم، والتي تقول بأن مكونات زخم الحركة الزاوي تتبادل مع مربع الزخم الكلي. وبالتالي، $[p^2, L_x] = 0$.

الآن، ننظر في مصطلح طاقة الوضع. باستخدام تعبير $L_x = yp_z - zp_y$، نحصل على:

$$[V, L_x] = [V, yp_z - zp_y] = y[V, p_z] - z[V, p_y]$$

باستخدام حقيقة أن المبادلة بين الطاقة الكامنة ومكون الزخم تُعطى بواسطة:

$$[V, p_j] = -\frac{i\hbar}{\partial j}(\nabla V)_j$$

لـ $j = y, z$، لدينا:

$$[V, p_z] = -\frac{i\hbar}{\partial z}(\nabla V)_z, \quad [V, p_y] = -\frac{i\hbar}{\partial y}(\nabla V)_y$$

وبالتالي،

$$[V, L_x] = y\left(-\frac{i\hbar}{\partial z}(\nabla V)_z\right) - z\left(-\frac{i\hbar}{\partial y}(\nabla V)_y\right) = -\frac{i\hbar}{\partial}(y(\nabla V)_z - z(\nabla V)_y)$$

يُمكن التعرف على هذا كمكون x لجداء التقاطع بين متجه الموقع $\mathbf{r}$ وتدرج V، $[V, L_x] = -\frac{i\hbar}{\partial}(\mathbf{r} \times \nabla V)_x$.

إذا كانت V طاقة كامنة متماثلة كرويًا $V(r)$، فإن تدرج ∇V يشير بشكل شعاعي ومتوازي مع $\mathbf{r}$. جداء التقاطع بين أي متجه ومتجه متوازي معه يعطي صفر:

$$\mathbf{r} \times \nabla V = 0$$

وبالتالي،

$$[H, L_x] = 0 \qquad [H, L_y] = [H, L_z] = 0$$

وبالتالي،

$$\frac{d\langle \mathbf{L} \rangle}{dt} = 0$$

حل التمرين 3

لفهم تأثير عوامل السُلّم L_+ و L_- على حالة كمومية ψ، دعنا ننظر في تفاعلها مع عامل الزخم الزاوي L_z. عند تطبيق L_z على نتيجة $L_\pm\psi$ نحصل على:

$$L_z(L_\pm\psi) = (L_zL_\pm)\psi$$

عند توسيع هذا باستخدام المبادل وخصائص الزخم الزاوي، نحصل على:

$$L_z(L_\pm\psi) = (L_zL_\pm - L_\pm L_z + L_\pm L_z)\psi = ([L_z, L_\pm] + L_\pm L_z)\psi$$

من جبر الزخم الزاوي، يُعرف أن المبادل $[L_z, L_\pm]$ يساوي $\pm\hbar L_\pm$، لذلك:

$$L_z(L_\pm\psi) = (\pm\hbar L_\pm + L_\pm L_z)\psi$$

بافتراض أن ψ هي دالة ذات قيمة ذاتية لـ L_z بقيمة ذاتية $m\hbar$، لدينا:

$$L_z(L_\pm\psi) = (\pm\hbar L_\pm + m\hbar L_\pm)\psi = (m \pm 1)\hbar(L_\pm\psi)$$

هذه النتيجة تُظهر أن $L_\pm\psi$ أيضًا دالة ذات قيمة ذاتية لـ L_z، ولكن بقيمة ذاتية متغيرة بـ $\pm\hbar$. على وجه التحديد، L_+ تزيد القيمة الذاتية بـ $\hbar$ بينما L_- تقللها بـ $\hbar$. ولهذا السبب، يُطلق على L_+ و L_- عوامل الرفع والخفض على التوالي، وهي تؤثر على المكون z من الزخم الزاوي بزيادة أو تقليل العدد الكمي m بواحدة.

حل التمرين 4

لتبسيط وتوضيح شرح الدالة ψ_+ و ψ_- كدوال ذاتية لعوامل الزخم الزاوي L^2 و L_z، وقيمهما الذاتية المقابلة، دعونا نتقدم خطوة بخطوة.

الإحداثيات المركبة $x+iy$ و $x-iy$ يمكن التعبير عنها بإحداثيات كروية:

$$x + iy = r\sin\theta(\cos\phi + i\sin\phi) = r\sin\theta e^{i\phi}$$

$$x - iy = r\sin\theta(\cos\phi - i\sin\phi) = r\sin\theta e^{-i\phi}$$

يمكن ربط هذه التعابير أكثر بالدوال الكروية الزاوية. الدالة الكروية Y_1^1 تتوافق مع $x+iy$ و Y_1^{-1} مع $x-iy$:

$$x + iy = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} r Y_1^1, \quad x - iy = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} r Y_1^{-1}$$

$$\psi_+ = -N\sqrt{\frac{8\pi}{3}} r f(r) Y_1^1$$

$$\psi_- = N\sqrt{\frac{8\pi}{3}} r f(r) Y_1^{-1}$$

بالنسبة للدوال الكروية الزاوية Y_l^m، لعوامل الزخم الزاوي L^2 و L_z تأثيرات معروفة:

$$L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m, \quad L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$$

وبالتالي، لـ $l = 1$ و $m = \pm 1$:

$$L^2\psi_+ = 2\hbar^2\psi_+, \quad L_z\psi_+ = \hbar\psi_+$$

$$L^2\psi_- = 2\hbar^2\psi_-, \quad L_z\psi_- = -\hbar\psi_-$$

القيم الذاتية لـ L^2 و L_z لـ ψ_+ هي $2\hbar^2$ و $\hbar$ على التوالي. بالنسبة لـ ψ_-، القيم الذاتية هي $2\hbar^2$ و $-\hbar$ على التوالي.

حل التمرين 5

لنبدأ بالنظر إلى الجداء النقطي لعاملي الدوران $\mathbf{S}_1$ و $\mathbf{S}_2$:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$$

مكونات S_{1x} و S_{2x} مُعرفة كالتالي:

$$S_{1x} = \frac{S_{1+} + S_{1-}}{2}, \quad S_{2x} = \frac{S_{2+} + S_{2-}}{2}$$

عند توسيع جداء $S_{1x}S_{2x}$ نحصل على:

$$S_{1x}S_{2x} = \frac{S_{1+}S_{2+} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} + S_{1-}S_{2-}}{4}$$

بالنسبة للمكونات y، يمكن تمثيلها كما يلي:

$$S_{1y} = \frac{S_{1+} - S_{1-}}{2i}, \quad S_{2y} = \frac{S_{2+} - S_{2-}}{2i}$$

$$S_{1y}S_{2y} = -\frac{S_{1+}S_{2+} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} - S_{1-}S_{2-}}{4}$$

عند إدخال هذه النتائج في تعبير $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$، نجد أن:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_{1z}S_{2z} + \frac{S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}}{2}$$

هذه الصياغة تُظهر كيف يتكون الجداء النقطي لعوامل الدوران من مساهمات من مكوناتها z والتفاعلات بين عوامل السلم الخاصة بها.

حل التمرين 6

لدينا:

$$(\sigma \cdot \hat{n})^2 = (\sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z)^2 = 1$$

وبالتالي، فإن القيم الذاتية لـ $\sigma \cdot \hat{n}$ هي ± 1. دعنا نسمي المتجهات الذاتية بـ χ_{n+} و χ_{n-}.
لتحديد $\chi_{n\pm}$، نقوم ببناء المتجهات:

$$\frac{1}{2}(1+\sigma \cdot \hat{n})\chi$$

$$\frac{1}{2}(1-\sigma \cdot \hat{n})\chi$$

حيث $\chi = a_+\chi_+ + a_-\chi_-$ هو متجه دوران عشوائي. عند تشغيل $\sigma \cdot \hat{n}$ على كل من هذه المتجهات نحصل على:

$$\sigma \cdot \hat{n}\left(\frac{1}{2}(1+\sigma \cdot \hat{n})\chi\right) = \frac{1}{2}(1+\sigma \cdot \hat{n})\chi$$

$$\sigma \cdot \hat{n}\left(\frac{1}{2}(1-\sigma \cdot \hat{n})\chi\right) = -\frac{1}{2}(1-\sigma \cdot \hat{n})\chi$$

بالنسبة لـ $\chi = \chi_+$، تصبح هاتان المعادلتان:

$$\frac{1}{2}(1+\sigma\cdot\hat{n})\chi_+ = \frac{1}{2}(1+\sigma_x n_x+\sigma_y n_y+\sigma_z n_z)\chi_+ = \frac{1}{2}(\chi_+ + n_x\sigma_x\chi_+ + n_y\sigma_y\chi_+ + n_z\sigma_z\chi_+)$$

$$= \frac{1}{2}[(1+n_z)\chi_+ + (n_x + i n_y)\chi_-]$$

$$\frac{1}{2}(1-\sigma \cdot \hat{n})\chi_+ = \frac{1}{2}[(1-n_z)\chi_+ - (n_x + i n_y)\chi_-]$$

هذه العملية تُظهر كيف يمكن تحديد المتجهات الذاتية للعامل $\sigma \cdot \hat{n}$ باستخدام تعبيرات بسيطة.

حل التمرين 7

لـ $j = 1/2$، فإن الأعداد الكمومية المغناطيسية m و m' هي $-j$ و j، والتي تكون $-1/2$ و $1/2$. قيم ذاتية لـ J^2 تُعطى بـ $j(j+1)\hbar^2 = 3\hbar^2/4$، والقيم الذاتية لـ J_z هي $m\hbar = -\hbar/2$ و $\hbar/2$. مصفوفة J^2 هي:

$$\begin{pmatrix} 3\hbar^2/4 & 0 \\ 0 & 3\hbar^2/4 \end{pmatrix}$$

والتي تكون $3\hbar^2/4$ مضروبة في مصفوفة الهوية I.

بطريقة مماثلة، يمكن تمثيل J_z كالآتي:

$$\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}$$

والتي تكون $\hbar/2$ مضروبة في مصفوفة بولي σ_z.

عوامل الرفع والخفض، J_+ و J_-، تُعطى بـ:

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ومكونات x و y، J_x و J_y، تُحسب كالتالي:

$$J_x = \frac{\hbar}{2}(J_+ + J_-) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2i}(J_+ - J_-) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

بالنسبة لـ $l = 1$، فإن التمثيلات المصفوفية هي:

$$L^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

تُمثل هذه المصفوفات زخم الحركة المداري لـ $l = 1$، مما يُظهر كيفية تحديد وتمثيل الزخم الزاوي في صورة مصفوفية لهذه الأعداد الكمومية المحددة.

حل التمرين 8

وفقًا للمعادلة ، يتم تعريف مكونات الهارمونيك الكروية كما يلي: - $Y_1^1(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$ - , $Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}$.

هذه تؤدي إلى دالة الموجة ψ:

$$\psi(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{1}{3}}(2Y_1^1(\theta,\phi) + Y_1^0(\theta,\phi))f(r)$$

هذا يدل على أن الأعداد الكمومية للحالة هي $l = 1$ مع $m = 1$ و $m = 0$. وبالتالي، فإن النتائج المحتملة لقياس L_z على هذه الحالة هي $\hbar$ و 0.

ب. حساب القيمة المتوقعة لـ L_z:

يتم اشتقاق القيمة المتوقعة لـ L_z من خلال التكامل على الفضاء:

$$\langle L_z \rangle = \int \psi^*(\theta, \phi) L_z \psi(\theta, \phi) r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

يأخذ هذا التكامل في الاعتبار خصائص الهارمونيك الكروية الأورثونورمال وحقيقة أنها معيارية، مما يبسط حساب القيمة المتوقعة.

ج. التحقق من تطبيع ψ:

يضمن شرط تطبيع دالة الموجة ψ أنها مُعدلة بشكل صحيح لتفسير الاحتمال:

$$\int |\psi|^2 \, dr \, d\theta \, d\phi = 1$$

يؤكد هذا التكامل أن ψ معيارية عبر كل الفضاء، مما يؤكد شرط احتمال الوحدة في ميكانيكا الكم.

حل التمرين 9

النظر في مصفوفات باولي للدوران σ التي تتفاعل مع المتجهات $\vec{A}$ و $\vec{B}$:

1. **تعريف مصفوفات باولي للدوران σ:**

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

2. **تفاعل المتجه $\vec{A}$ مع مصفوفات باولي:**

$$\vec{A} \cdot \vec{\sigma} = A_x \sigma_x + A_y \sigma_y + A_z \sigma_z$$

3. **تفاعل المتجه $\vec{B}$ مع مصفوفات باولي:**

$$\vec{B} \cdot \vec{\sigma} = B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z$$

جداء النقاط المتضمنة في مصفوفات باولي:

$$(\vec{A} \cdot \vec{\sigma})(\vec{B} \cdot \vec{\sigma})$$

يمكن توسيع هذا الجداء باستخدام خصائص مصفوفات باولي، لينتج عنه:

$$(\vec{A} \cdot \vec{\sigma})(\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{A} \cdot \vec{B}\mathbf{I} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$$

حيث: - **$\mathbf{I}$** هي مصفوفة الهوية. - **الجزء القياسي $\vec{A}\cdot\vec{B}$** هو جداء نقطي للمتجه $\vec{A}$ و $\vec{B}$. - **الجزء المتجهي $i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$** يتضمن جداء التقاطع لـ $\vec{A}$ و $\vec{B}$، ممثلاً في سياق مصفوفات باولي ومضروباً في الوحدة التخيلية i.

$$\vec{A}\times\vec{B} = (A_yB_z - A_zB_y)\hat{x} + (A_zB_x - A_xB_z)\hat{y} + (A_xB_y - A_yB_x)\hat{z}$$

دمج التفاعل من حيث مصفوفات باولي:

$$(\vec{A}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}) = (\vec{A}\cdot\vec{B})\mathbf{I} + i\sigma_x(A_yB_z - A_zB_y) + i\sigma_y(A_zB_x - A_xB_z) + i\sigma_z(A_xB_y - A_yB_x)$$

المصادر

[1] Griffiths, D.J. and Schroeter, D.F., 2018. Introduction to quantum mechanics. Cambridge university press.

[2] Sakurai, J.J. and Napolitano, J., 2020. Modern quantum mechanics. Cambridge University Press.

[3] Zettili, N., 2009. Quantum mechanics: concepts and applications.

[4] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. and Laloë, F., 2019. Quantum mechanics, volume 3: fermions, bosons, photons, correlations, and entanglement. John Wiley .

[5] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. and Laloe, F., 1986. Quantum Mechanics, Volume 1. Quantum Mechanics

[6] Devanathan, V., 1999. Angular momentum techniques in quantum mechanics (Vol. 108). Springer Science Business Media.

[7] M. A. Al-Gwaiz, Sturm-Liouville Theory and its Applications, Springer, 2007.

[8] J. W. Brown, R. V. Churchill, Fourier Series and Boundary value problems, McGraw-Hill, 8th ed, 2012.

[9] حسن مصطفى العويضي، المعادلات التفاضلية "الجزء الثاني"، مكتبة الرشد، 2015 .

الرموز

$\det(\cdot)$: المحدد
$\mathscr{M}_{n,m}(\mathbb{R})$: مجموعة المصفوفات ذات البعد $n \times m$
$\mathscr{M}_n(\mathbb{R})$: مجموعة المصفوفات المربعة ذات البعد $n \times n$
I_n : مصفوفة الوحدة في $\mathscr{M}_n(\mathbb{R})$
A^t : منقول مصفوفة A
$J_\alpha(\cdot)$: دالة بسل من النوع الأول
$Y_n(\cdot)$: دالة بسل من النوع الثاني