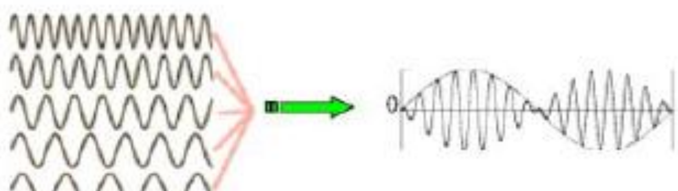
الفصل الثاني

الصفات الاولية للميكانيك الكمي

1. مقدمة:

يبدو من خلال دراسة سرعة المجموعة أن الموجة المرافقة للجسيم ليست جيبية بل تراكب عدة موجات جيبية متقاربة التردد(حزمة أمواج) لتعطي دالة مركبة ، يمكن تحليل حزمة الأمواج تلك وفقا لتحليل فورييه حيث يمكن تحليل أي دالة دورية إلى مجموع دوال جيبية وفق آلية رياضية (راجع الرياضيات للفيزيائيين) يمكن من خلالها التعرف على الدوال الجيبية التي شكلت الدالة الدورية ،أي أن الدالة الموجية التي سنتعامل معها مستقبلا هي حزمة الأمواج (مجموعة الأمواج المتراكبة) ،يمكن كتابة ذلك بالشكل:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \ldots\ldots \psi_n \qquad (1)$$



الشكل (1): تراكب عدة موجات تعطي نبضة مغلفها يمثل سعة الدالة الموجية

مثال تراكب موجتين متقاربين في التردد والعدد ألموجي:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t) \\
\Psi_1(x,t) &= \sin(kx - \omega t) \\
\Psi_2(x,t) &= \sin((k + \Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t)
\end{aligned} \qquad (2)$$

وجمع الدالتين يعطي:

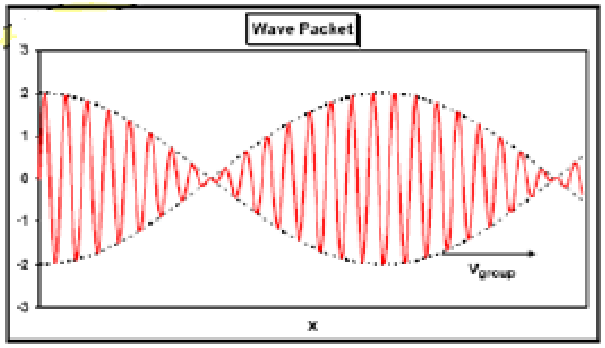
$$\Psi(x,t) = 2\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\sin\left(\frac{2k+\Delta k}{2}x - \frac{2\omega + \Delta\omega}{2}t\right) \qquad (3)$$

$$\sin A + \sin B = 2\cos(\tfrac{1}{2}(A-B))\sin(\tfrac{1}{2}(A+B)) \qquad (4)$$

Now suppose that $\Delta k \ll 2k$ and $\Delta\omega \ll 2\omega$ so that

$$\Psi(x,t) \approx 2\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\sin(kx - \omega t) = P(x,t)\sin(kx - \omega t). \qquad (5)$$

العلاقة (5) تمثل الدالة الموجية الجديدة حيث P(x,t) يمثل سعة الموجة ويلاحظ أنها تمثل موجة جيبية تغلف حزمة الأمواج المتراكبة(الشكل 2).



الشكل (2): تراكب (تداخل) موجتين

2. <u>المعلومات التي تحويها الدالة الموجية المرافقة للجسيم المادي وفق المنظور الجديد:</u>

نستفيد هنا من الدالة الموجية للموجة الكهرومغناطيسية باعتبار أن الفوتون يمثل الجانب المادي للموجة والتي نحصل عليها من حل المعادلة التفاضلية الموجية للفوتون (راجع الفيزياء النظرية والمعادلات التفاضلية الجزئية) وتكتب بالشكل:

$$\nabla^2 \phi(r,t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi(r,t)}{\partial^2 t}$$

$$\phi(r,t) = A e^{i(\vec{K}.\vec{r} - \omega t)} \qquad (6)$$

المعادلة (6) دالة مركبة (عقدية)تحوي وصفا موجيا لأنها تحوي متجهة الموجة والتردد الزاوي (لاحظ أن **A** تمثل سعة الموجة الموصوفة أعلاه)،ويمكننا استخدام العلاقات التي تربط الخواص الموجية مع الخواص المادية من العلاقتين :

$$\vec{P} = \hbar \vec{k} \quad \Rightarrow \vec{k} = \frac{\vec{P}}{\hbar}$$

$$E = \hbar \omega \quad \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \qquad (7)$$

وبتعويض (7) في (6) نحصل على دالة موجية تحوي في طياتها وصفا ماديا وهو ما نريده هنا بتمثيل دالة موجية تعبر عن حركة جسيم مادي وستعطيها العلاقة التالية:

$$\psi(r,t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r} - Et)} \qquad (8)$$

العلاقة (8) هي حل لمعادلة شرودينجر ،أي يجب أن نحصل عليها من حلول معادلة شرودينجر لاحقا ، ولكننا هنا نبحث عن أهميتها وماذا تقدم لنا من معلومات عن الجسيم الذي ترافقه وتتحرك معه وبسرعته؟؟؟؟؟

يفترض بالدالة الموجية أن تعطينا كافة المعلومات الفيزيائية المتعلقة بطاقة الجسم وكمية حركته وهذه أول ميزة لهذه الدالة الموجية. والفقرات اللاحقة تعطي الميزات الأخرى.

3. احتمال وجود الجسيم في مكان ما:

تحتل الدالة الموجية أو دالة الموجة مكانة مهمة في ميكانيكا الكم، حيث ينص مبدأ الشك على عدم قدرتنا بنفس اللحظة تحديد موضع وسرعة جسيم ما بنفس الدقة، لكن نعمد إلى دالة موجية مرافقة لكل جسيم حسب التصور الموجي الذي قدمه شرودنغر، وتقوم هذه الدالة الموجية بتحديد احتمال وجود الجسيم في أي نقطة من الفراغ التي يمكن للجسيم التواجد به، وذلك حسب اقتراح ماكس بورن 1926م (Max Born) والذي بين فيه أن مربع الدالة الموجية($\psi^2 = \psi\ \psi^*$ النجمة تعني مرافق الدالة المركبة(عقدية أو تخيلية))يحمل معنىً فيزيائيا رائعا ألا وهو معرفة احتمالية وجود الجسيم في عنصر حجم مقدار dv بدلالة دالته الموجية، فالدالة الموجية ψ لإلكترون ذرة الهيدروجين (مثلا)المتواجد في مكان ما من الفضاء حول النواة يمكن معرفة احتمالية تواجده في الأمكنة المختلفة المحيطة بالنواة من خلال العبارة الرياضية التالية:

$$dp = \left|\psi^2(r,t)\right| dv = \psi(r,t)\psi^*(r,t)dv \qquad (9)$$

حيث dp احتمال تواجد الجسيم بالحجم dv ويأخذ دوما قيما حقيقية.

في العلاقة (9) عند تقسيم الطرفين على عنصر الحجم نحصل على أبعاد كثافة نسميها كثافة الاحتمال (probability density)كما في العلاقة التالية:

$$\rho(r,t) = \frac{dp}{dv} = \left|\psi^2(r,t)\right| \qquad (10)$$

أما احتمال تواجد الجسيم في الفضاء كله فإننا نكامل العلاقة (9) على الفضاء كله الممتد من اللانهاية والذي يعبر عن مجموع احتمالات تواجد الجسيم في كل عناصر الحجم المتراصة حول بعضها البعض مكونة الفضاء اللانهائي ، وهنا نحن متأكدون من تواجد الجسيم في هذا الفضاء المفروض وبالتالي فان احتمال تواجد الجسيم سيكون(100%=1)،ونكتب ذلك بالعلاقة الرياضية التالية:

$$\int_0^1 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi^2(r,t)\right| dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(r,t)\psi^*(r,t)dv = 1 \qquad (11)$$

إن العلاقة التي تحقق الشرط في العلاقة (11) تسمى دالتها الموجية بالدالة المعايرة أو المنظمة وتسمى العلاقة بعلاقة المعايرة أو شرط لتنظيم (normalization condition)،وإذا كانت الدالة ليست معايرة فإننا نضربها بثابت بحيث تتحقق العلاقة (11) كما يلي:

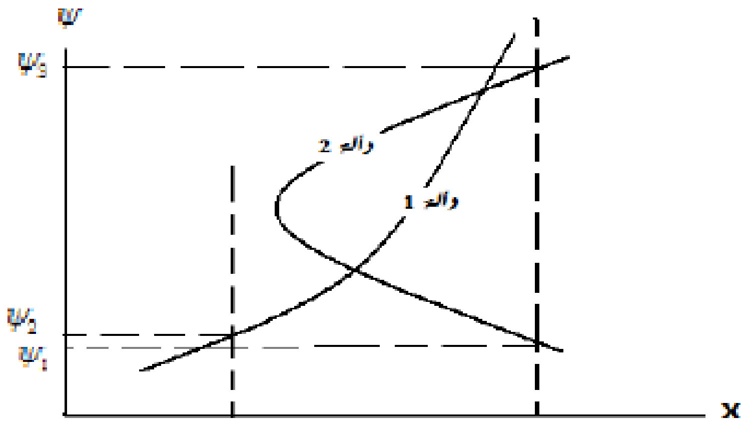
$$\int_0^1 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r,t)|^2 dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(r,t)\psi^*(r,t).dv = N \neq 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(r,t)\psi^*(r,t).dv = N \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\psi(r,t)|^2}{N}.dv = 1$$

$$\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r,t)|^2 .dv = 1 \qquad (12)$$

يشترط بالدالة الموجية التي تحقق شرط المعايرة مايلي :

- أن تكون الدالة الموجية أحادية القيمة أي أن كل قيمة محددة للموضع يقابلها قيمة وحيدة للدالة الموجية فقط وليس أكثر، وهذا شرط أساسي لان الدالة أحادية القيمة تعطي احتمال واحد لتواجد الجسيم بينما المتعددة القيمة تعطي أكثر من احتمال لتواجد الجسيم وهذا مرفوض لان الجسيم لايمكن أن يتواجد في أكثر من مكان في نفس اللحظة والعكس أيضا لايمكن لجسيم أن يكون له دالتان مختلفتان في نفس المكان ، انظر الشكل (3) يمثل دالتين أحداهما أحادية القيمة والثانية متعددة القيمة.



الشكل (3) يمثل دالتين أحداهما أحادية القيمة والثانية متعددة القيمة

- أن تكون الدالة الموجية متصلة (continuous) وكذلك مشتقاتها متصلة ، لأن كون الدالة غير متصلة (عندها انقطاع في الدالة في مكان ما) يصبح الجسيم غير في معرف في منطقة الانقطاع .

- يجب على الدالة أن تكون معرفة في كل نقطة ولا يجوز ان تكون قيمتها مالانهاية لان احتمال تواجد الجسيم يصبح مالانهاية وهو أمر غير مقبل فيزيائيا.

4.الدوال المميزة (الخاصة)(eigenfunction) والقيم المميزة(الخاصة)(eigenvalue):

تصف الدالة الموجية في ميكانيكا الكم الحالة الكمومية إما لأحد الجسيمات الأولية أو لمجموعة من الجسيمات الأولية في الفراغ ،وتعين احتمال تواجده أو تواجدها في مكان معين. والدالة الموجية في ميكانيكا الكم تكون عادة حل لمعادلة مأخوذة عن معادلة شرودينجر.ويمكن للمعادلة الموجية أن تصف الحالة الكمومية لجسيم أولى ، واقع تحت تأثير خارجي (مثل حركة الإلكترون حول النواة في الذرة) أو حالة الإلكترون الحر ، كما يمكن صياغة المعادلة الموجية لمجموعة من الجسيمات لدراسة حركتها أو تفاعلاتها طبقا لميكانيكا الكم .

وفي حال الإلكترون في ذرة الهيدروجين مثلا نحن بحاجة لمعرفة وضع الإلكترون بالنسبة للنواة ،وبما أن الإلكترون يتوضع في مستويات طاقة منفصلة (نظرية بور مثلا) فكل مستوي طاقة يوصف بقيمة محددة للطاقة وفق علاقة بور :

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}$$
$$n = 1, 2, 3, 4 \ldots\ldots\ldots \qquad (13)$$

العلاقة (13) تعطينا قيما محددة للطاقة نسميها القيم الخاصة ، والذي يحدد احتمالية تواجد الإلكترون على تلك القيم الخاصة هو الدالة الموجية التي تخص ذلك الإلكترون في ذلك المكان ولذلك تسمى بالدالة الخاصة(المميزة) لأنها تخص الإلكترون الموجود على مستوي الطاقة المحدد بالرقم n.

وحلول معادلة شرودينجر (ستعالج لاحقا)لا تقبل أي قيمة للطاقة بل بعض القيم $E_1, E_2, E_3 \ldots\ldots E_n$ والتي من أجل كل قيمة منها يتحقق شرط المعايرة والتي تسمى بالقيم الخاصة(المميزة) والدالة الموجية الموافقة لتلك القيمة تسمى القيمة الخاصة كما ذكرنا أعلاه.أي:

$$E_1, E_2, E_3, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots E_n$$
$$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \psi_n \qquad (14)$$

(راجع حل معادلة شرودينجر في بئر جهد)

5. شرط التعامد (orthogonality condition):

عندما يكون لدين قيمتين خاصتين يعودان إلى دالتين خاصتين فان تكامل جداء أحد هاتين الدالتين في مرافق الدالة الأخرى ممدا في المكان كله يساوي الصفر ، وإذا تحقق هذا الشرط فإننا نسميه شرط التعامد ، ويكتب رياضيا بالشكل:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \psi_m^* \, dv = 0$$
$$n \neq m \qquad (15)$$

وشرط العلاقة (15) أن يكون لكل دالة مميزة قيمة مميزة تختلف عن الأخرى،وهذا يعطينا تصور أخر لأهمية الدالة الموجية في ميكانيكا الكم وتأكيد آخر على القيم المميزة والدوال المميزة المرافقة لها .

يمكننا دمج شرط المعايرة وشرط التعامد في علاقة رياضية واحدة كما يلي :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \psi_m^* dv = \delta_{nm}$$

$$when \quad n = m \Rightarrow \delta_{nn} = 1 \Rightarrow normalization\ condition$$

$$when \quad n \neq m \Rightarrow \delta_{nm} = 0 \Rightarrow orthogonality\ condition \qquad (16)$$

الرمز $\boldsymbol{\delta_{nm}}$ يسمى دلتا كرونيكر (Kronecker) وهو يساوي الواحد عندما (n=m) وهو شرط المعايرة، ويساوي الصفر عندما($n \neq m$) وهو شرط التعامد.

بهذه المحاضرات الأربع نكون قد أعطينا مقدمة ممتازة لنبدأ بعدها باستنتاج معادلة شرودينجر وحل بعض الأمثلة عليها.ولا ننسى أن معادلة شرودينجر وحلوها يجب أن لا تخالف محتوى المحاضرات السابقة التي تدعمها بشكل مباشر.