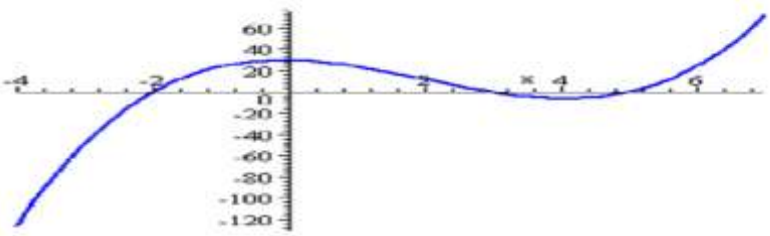
فرضيات ميكانيك الكم The Postulates of Quantum Mechanics

حتى سنة 1925 م كل المحاولات لمعالجة التراكيب الذرية والجزيئية كانت ضمن الميكانيك الكلاسيكي ، حيث كنت وحدات تراكيب الذرة تعامل كجسيمات عند استخراج العزوم والمواقع كما جاء به بور مثلاً. وفي سنة 1925 – 1926 م اقترح كل من هايزنبرغ وشرودنجر وعلى انفراد موجة ميكانيك الكم والتي تتعامل مع المشاكل الذرية والجزيئية وبشكل مختلف تماما عن الميكيانيك الكلاسيكي. بغض النظر عن الاختلاف الشكلي، فأن ما جاء به هايزنبرغ وشرودنجر في موجة الميكانيك الكمي كانت متماثلة. علما ان تفسير شرودنجر كان الى حد ما تفسير فيزيائي لموجة الميكانيك.

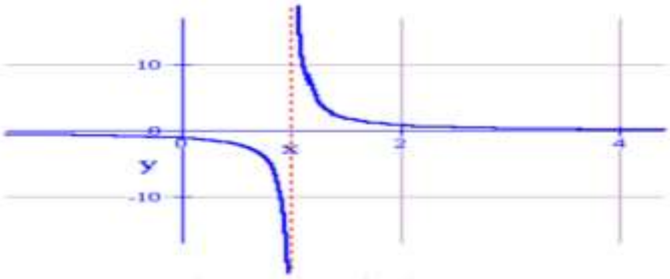
ان المتغير الديناميكي *Dynamical Variable* يعبر عن أي خاصية للنظام فمثلاً الموقع r والطاقة E ومركبة الزخم الخطي P و .... الخ كلها متغيرات ديناميكية. وبصورة عامة فأن اية كمية مهمة في الميكانيك الكلاسيكي هي متغير ديناميكي. اما الملحوظ *Observable* او (المتغير الملحوظ) فهو متغير ديناميكي يمكن ملاحظته وقياسه. وتكون جميع المتغيرات الديناميكية في الميكانيك الكلاسيكي متغيرات ملحوظة. نفترض نظاماً معيناً من الجزيئات بحيث ان هذا النظام يمكن وصفه بشكل تقليدي من خلال إعطاء قيم لاحداثيات العام q_A والزخم العام p_k و زمن معين نفترضه t .

الفرضية الأولى:

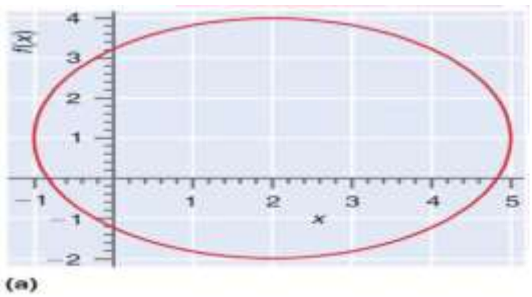
ان نظام الجزيئات الذي افترضناه يمكن وصفه بواسطة دالة رياضية $\psi_{(q,t)}$ تدعى بالدالة الموجية. اذ ان الدالة $\psi_{(q,t)}$ تمثل الاحداثيات الفراغية *Spatial Coordinates* والاحداثيات الوقتية *Time Coordinates* لذلك النظام. نلاحظ ان ψ عبارة عن بناء رياضي لوصف النظام. كذلك يمكن ان توصف حالة النظام بواسطة دالة للاحداثيات و الزمن تسمى هذه الدالة بدالة حالة النظام $\psi = \psi_{(x,y,z,t)}$ وتحتوي هذه الدالة على كافة المعلومات التي يمكن تحصيلها من النظام ومن صفات هذه الدالة ان تكون مستمرة هي ومشتقتها الاولى ووحيدة القيمة كما ان مربعها قابل للتكامل و المقصود بكون ان مربع الدالة قابل للتكامل هو $\int |\psi|^2\, dt \neq \infty$ حيث ان $dt = dx\, dy\, dz$ يسمى بعنصر الحجم التفاضلي.



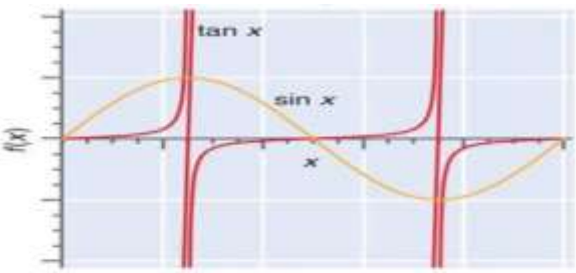
ان الدالة $f_{(x)} = x^3 - 6x^2 - x + 30$ دالة مستمرة ومقبولة فيزيائيا



الدالة $f_{(x)} = \frac{1}{1-x}$ غير مستمرة عند $x=1$ وغير مقبولة فيزيائياً.



الدالة $9 = (x-2)^2 + \left(f_{(x)} - 1\right)^2$ غير مقبولة فيزيائيا لانها غير احادية القيمة



الدالة $sin\ (x)$ دالة مقبولة لانها لا تؤول الى المالانهاية بينما $tan\ (x)$ دالة غير مقبولة لانها تؤول الى المالانهاية.

ان الحالة القياسية للتكامل اعلاه هو عندما يكون

$$\int |\psi|^2\, dt = 1$$

ويقال عندها ان الدالة سوية او معايرة *normalized* اما عندما تكون قيمة التكامل

$$\int |\psi|^2\, dt = 0$$

فيقال ان الدالة متعامدة *orthogonal* و هذا يحصل بصورة عامة تكون دوال الموجة مختلفة و من الواضح ان الحالة القياسية للدالة المقبولة فيزيائيا هي تلك التي تحقق الشرط

$$\int |\psi_n\, \psi_m|\, dt \;=\; \delta_{n\,m}$$

ان الرمز $\delta_{n\,m}$ يلفظ دلتا كرونيكر و ياخذ قيمة 0 عندما $n \neq m$ وتكون قيمته 1 عندما اما عندما يكون $n = m$

$$\int |\psi|^2 \, dt = k$$

حيث ان k عدد حقيقي فتكون عندها ψ عندها مقبولة فيزيائيا و لكن غير معايرة, و لغرض معايرة الدالة الموجية الغير معايرة نفرض ان قيمة العدد الحقيقي k يساوي N^2 حيث ان N الجذر التربيعي للعدد k

$$\int |\psi|^2 \, dt = N^2$$

ثم نقسم المعادلة على N^2 فينتج

$$\int \left(\frac{|\psi|}{N}\right)^2 \, dt = 1$$

و بذلك حصلنا على دالة جديدة هي $\bar{\psi} = \frac{\psi}{N}$ ومن الواضح من هذه المعادلة انه يمكن حساب ثابت المعايرة N من خلال العلاقة

$$N = \frac{1}{\sqrt{|\psi|^2 \, dt}}$$

ومن ثم بقسمة ψ على N نحصل على دالة موجية معايرة.

من المعروف ان الدوال التي تتراوح قيمتها بين الصفر و الواحد الصحيح هي دوال تحمل معنى احتمالي لذلك فان التكامل $\int |\psi|^2 \, dt$ يحمل معنى احتمالية تواجد النظام ضمن حالة معينة مثل احتمالية وجود الالكترون في منطقة معينة و التكامل $\int |\psi_n \, \psi_m| \, dt$ له معنى احتمالية انتقال النظام ضمن الحالتين $n\,, m$ مثل احتمالية الانتقال الطيفي من الحالة الارضية الى الحالة المثارة و بما ان قيمة التكامل ككل تعطي معنى احتمالي وان dt تمثل عنصر الحجم التفاضلي لذلك فان مربع دالة الموجة أي $|\psi|^2 \;,\; \psi_n \, \psi_m$ تعطي معنى كثافة الاحتمالية وان حاصل ضرب كثافة الاحتمالية في عنصر الحجم يعطي دالة الاحتمالية مثلما ان ضرب الكثافة الكتلية في الحجم يعطي الكتلة وضرب الكثافة الوزنية في الحجم يعطي الوزن فان ضرب كثافة الاحتمالية في عنصر الحجم تعطي الاحتمالية وان اجراء عملية التكامل بعدها يعمل على جمع الاحتماليات على طول مدى التكامل.

يبقى ان نذكر انه في حالات معينة تحتوي دالة الموجة على مقدار مركب (جزء تخيلي) يتضمن العدد $i = \sqrt{-1}$ في هذه الحالة يكون التربيع المباشر لدالة الموجة لغرض الحصول على الاحتمالية و كثافتها سوف يعطي مقدار معقد لا يحمل اي معنى فيزيائي لذا فللحصول على المربع المطلق لدالة الموجة المعقدة يتم من خلال ضربها في مرافقها و الذي نحصل عليه من قلب إشارة كل حد يتضمن i اذ ان اي عدد مركب ذو الصيغة العامة $z = a + ib$ عندما يضرب في مرافقه و الذي تكون صيغته $z^* = a - ib$ تحصل عملية الضرب كالاتي

$$|Z\,Z^*| = (a+ib)*(a-ib) = a^2 + iab - iab - i^2\,b^2$$
$$|Z\,Z^*| = a^2 + b^2$$

و بالتالي تتبقى الكميات الحقيقية و التي تعطي معنى فيزيائي.

الفرضية الثانية

يوجد لكل كمية ملحوظة *Observable Quantity* في نظام ما عامل يدعى بالعامل الهيراميتي ولايجاد العامل لاي كمية ملحوظة نستخدم الطريقة التقليدية اولاً ، لتعريف الملحوظة. وهي الاحداثيات q_k والزخم P_k ، ثم نبقي الاحداثيات ونعوض عن الزخم بالحد $\frac{h}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\, q_k}\right)$ للحصول على العامل.

الفرضية الثالثة

ان الدالة الموجية $\psi_{(q,t)}$ تحقق معادلة ذات صيغة:

$$\bar{H}\,\psi_{(q,t)} = -\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial\, t}\,\psi_{(q,t)}$$

حيث $\bar{H}$ تمثل العامل المختص بطاقة النظام ويدعى بعامل هاملتون. وهذه المعادلة تدعى بمعادلة شرودنكر التي تعتمد على الزمن. كذلك تجدر الإشارة انه توجد معادلة أخرى لشرودنكر التي تتعامل مع الحالة الاستقرارية ولا تعتمد على الزمن (شرودنكر اللاوقتية).

الفرضية الرابعة

عند قياس قيمة a_i لملحوظ باستخدام العامل $\bar{A}$ يجب ان تكون النتيجة تحقق المعادلة الاتية:

$$A\,\psi_1 = a_i\,\psi_i$$

حيث ان ψ_1 تمثل الدالة الموجية للحالة التي قيست فيها القيمة a_i . ان هذه المعادلة تعني ان العامل $\bar{A}$ المؤثر على الدالة ψ_i يعطي الدالة نفسها مضروبة بكمية ثابتة هي a_i وتدعى بمعادلة القيمة الذاتية. حيث ان ψ_i هي الدالة الذاتية للعامل $\bar{A}$ و ان a_i تمثل القيمة الذاتية.

الفرضية الخامسة

اذا كان $\psi_1\,,\psi_2$ يمثلان الدالتين الذاتيتين و $a_1\,,a_2$ يمثلان القيمتين الذاتيتين للعامل $\bar{A}$ فيمكن كتابة الدالة ψ التي تمثل حالة النظام العامة بالشكل الاتي:

$$\psi = C_1\,\psi_1 + C_2\,\psi_2$$

حيث $C_1\,,C_2$ عبارة عن ثابتين (المعامل).

ان الدالة ψ تمثل حالة النظام العامة ولكن هذه الحالة ليست الحالة الذاتية. ويمكن البرهنة على ذلك بالشكل الاتي:

$$\bar{A}\,\psi = \bar{A}\,(C_1\,\psi_1 + C_2\,\psi_2)$$

ولكن

$$\bar{A}\,\psi_1 = a_1\,\psi_1\ , \qquad \bar{A}\,\psi_2 = a_2\,\psi_2$$

حسبما جاء في بداية هذه الفرضية ، وعليه تكون

$$\bar{A}\,(C_1\,\psi_1 + C_2\,\psi_2) = C_1\,a_1\,\psi_1 + C_2\,a_2\,\psi_2$$

وهذا يعني انه لا يمكن كتابة هذه المعادلة بالشكل الاتي:

$$\bar{A}\,(C_1\,\psi_1 + C_2\,\psi_2) = a\,(C_1\,\psi_1 + C_2\,\psi_2)$$

لكي تكون الدالة ψ تمثل الدالة الذاتية للعامل $\bar{A}$. ان a في هذه المعادلة تمثل قيمة ثابتة. وبمعنى اخر ان ψ لا تمثل الدالة الذاتية للعامل $\bar{A}$ حسب المعادلة التي قبل الأخيرة. الا اذا كان $a_1 = a_2$ نستطيع كتابة المعادلة الأخيرة بهذه الصيغة. وفي هذه الحالة تكون الدالتين منحلتين بسبب تساوي القيمتين الذاتيتين وهذا يعني ان الجمع الخطي للدالتين المنحلتين يمثل الدالة الذاتية للعامل $\bar{A}$.

<u>الفرضية السادسة</u>

اذا كان النظام ممثلاً بالدالة ψ وان عدة قياسات أجريت للمتغير الديناميكي M ، فأن القيمة المتوقعة $\bar{a}$ *Expectation Value* تكون:

$$\bar{a} = \frac{\int \psi^*\,\bar{A}\,\psi\,d\tau}{\int \psi^*\,\psi\,d\tau}$$

حيث A تمثل العامل المتغير الديناميكي M. واذا افترضنا ان الدالة الموجية ψ هي دالة تناسقية *Normalized* فان قيمة التكامل في المقام يساوي واحداً. وبذلك تكون القيمة المتوقعة $\bar{a}$ تساوي:

$$\bar{a} = \int \psi^*\,\bar{A}\,\psi\,d\tau$$

وفي الحالات الخاصة، اذا كانت الدالة ψ هي الدالة الذاتية الى العامل A وذات قيمة ذاتية a_i نحصل على:

$$\bar{a} = \int \psi^*\,(\bar{A}\,\psi)\,\,d\tau = \int \psi^*\,a_i\,\psi\,d\tau$$

او

$$\bar{a} = a_i \int \psi^* \psi \, d\tau = a_i$$

وهذا يعني ان القيمة المتوقعة $\bar{a}$ تساوي القيمة الذاتية a_i . وبصورة عامة لا تكون الدالة **ψ** تمثل الدالة الذاتية المعامل $\bar{A}$ ولكن بالإمكان التعبير عنها بواسطة عدة دالات ذاتية x_i .

$$\psi = \sum_i C_i X_i$$

$$A X_i = a_i X_i$$

وفي هذه الحالة:

$$\bar{a} = \int \left(\sum_i C_j X_j \right)^* \left(\bar{A} \sum_i C_i X_i \right) d\tau$$

$$\bar{a} = \sum_{i,j} C_j^* C_i \int X_j^* (\bar{A} X_i) \, d\tau$$

$$\bar{a} = \sum_{i,j} C_j^* C_i a_i \int X_j^* X_i \, d\tau$$

واذا كان $i \neq j$ فان قيمة التكامل تساوي صفراً (دالات متعامدة)
واذا كان $i = j$ فان قيمة التكامل تساوي واحداً (دالة تناسقية) وبذلك نحصل على:

$$\bar{a} = \sum_{i,j} C_i^* C_i \, a_i$$

وهذه النتيجة تشير الى اننا قد عرفنا القيمة المتوقعة $\bar{a}$ بطريقة إحصائية. حيث انه عند قياس المتغير الديناميكي M مرة واحدة. فان النظام يجب ان يكون في حالة تمثل بواحدة من القيم الذاتية a_i . ان تربيع المعامل $C_i^* C_i = |C_i|^2$ يعطي احتمالية وجود النظام في كل واحدة من الحالات الذاتية للعامل. وبذلك تكون المعادلة بالشكل الاتي:

$$\bar{a} = \sum_i P_i \, a$$

$$P_i = |C_i|^2$$

والتي تمثل احتمالية وجود النظام في هذه الحالة التي لها قيمة ذاتية a_i. وبذلك تكون القيمة المتوقعة $\bar{a}$ لعدة قياسات عبارة عن مجموع الحالات الذاتية، وكل واحدة تمثل باحتماليتها.