CH. 2 : Elementary Properties of Quantum Mechanics

الفصل الثاني: الصفات الأولية للميكانيك الكمي:

* يحاول الميكانيك الكمي حل التناقض الظاهر بين الازدواجية المادية والموجية التي مرت بنا في الفصل الاول ، وذلك بأستحداث صيغ جديدة لقوانين الطبيعة تظهر فيها الصفات المادية والموجية مكملة احداها للأخرى بحيث تدخل هذه الصفات في النظرية بوزن واحد وترتبط مع بعضها البعض بواسطة ثابت بلانك h .

* عند وضع قيمة $h=0$ في قوانين الميكانيك الكمي (مبدأ التقابل) سوف نحصل بصورة عامة على نتائج الفيزياء الكلاسيكية . فمثلاً اذا كانت المسألة تتعلق بالألكترون فأن اهمال h يحولها الى دراسة الصفة المادية لجسيم الألكترون .
بينما اذا كانت تتعلق بالضوء فأن ذلك سيحولها الى دراسة الصفة الموجية للضوء .

* اذا كانت المنظومة كبيرة بما فيه الكفاية ولم تكن حاجتنا للقياسات المضبوطة كبيرة جداً فأن الميكانيك الكلاسيكي قادر على تزويدنا بتقريب جيد للحركة .

* بالنسبة للذرة ودراستها فأن التعامل دائماً مع كميات بقدر ثابت بلانك h (تقريباً) ، لذا فأن القوانين الكمية تعطي نتائج تتفاوت كثيراً في مقاديرها عن نتائج الفيزياء الكلاسيكية .

* يتم وصف الميكانيك الكمي بواسطة ثلاث طرق :-

الطريقة الأولى : طريقة شرودنكر : وهي استخدام دالة حالة state function لوصف الحالة الفيزيائية للنظام .

الطريقة الثانية : طريقة هايزنبرك : وهي استخدام المصفوفات التي تحتوي وصف الحالة الفيزيائية للنظام .

الطريقة الاولى والطريقة الثانية اعطتا نتائج متطابقة ،

الطريقة الثالثة: طريقة ديراك : هي استخدام متجه حالة state vector لوصف حالة النظام ، بحيث يتم التعامل معه كمتجه طبيعي يخضع لجبر المتجهات .

* في منهج المرحلة الرابعة ، فان الطريقة المتبعة لوصف الميكانيك الكمي هي طريقة شرودنكر ، أي ، تمثيل النظام بدالة موجة wave function .

① دالة الموجة وتفسيرها . The Wave Function and its Interpretation

* معادلة الموجة في الفيزياء تعتبر الاساس في موضوع دالة الموجة في الميكانيك الكمي . وقد طورت هذه المعادلة من قبل شرودنكر ١٩٢٦ ، وقد قسمت الميكانيك الكمي الى قسمين :-

أ- الميكانيك الكمي غير النسبي : ويقتصر في بحثه على الظواهر البعيدة عن التأثيرات النسبية ، ويصح للأنظمة ذات الطاقات الواطئة (سرعة الاجسام واطئة) اقل من سرعة الضوء

سرعة الجسم $v < c$ سرعة الضوء

ب- الميكانيك الكمي النسبي : هنا تكون الطاقات عالية حيث ان قيمة سرعة الجسم مقاربة الى سرعة الضوء $v \simeq c$.

* مادة المرحلة الرابعة تتعامل مع الميكانيك الكمي غير النسبي $(v<c)$.

* مثلاً ، ان الالكترون لا يتحرك بعيداً عن مجال تأثير النواة ويكون مقيداً بحركته في الحيز الذي يبعد $10^{-9}m$ عن النواة ، لذا يمكن التعبير عن ارتباطه بمجال المادة بدالة الموجات الواقعة التي تكون موجودة في هذا الحيز بسعة تتغير من نقطة الى اخرى ضمن هذا الحيز وتكون صفراً خارجه ،

بمعنى آخر ، ان مجال المادة يصف حركة الجسيم . فيطلق على سعة المجال بـ الدالة الموجية wave function ويرمز لها عادةً بـ ψ .

ان شدة مجال المادة تعطى بالعلاقة $|\psi|^2$.

* لنفرض الآن ان الدالة الموجية هي دالة للموقع والزمن ، $\psi(x,t)$ ، دالة موجية في الموقع x والزمن t ، وعليه سوف يبرز لنا سؤالان ، هما :-

السؤال الأول : ما هو التفسير الفيزيائي للدالة $\psi(x,t)$ ؟

السؤال الثاني : ما هي معادلة الموجة التي تحققها الدالة $\psi(x,t)$ ؟

ج س١ / العالم بور Max Born في عام ١٩٢٦ اعطى تعريفاً للدالة الموجية بالشكل :-

$$\boxed{|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x)} \quad \text{------}(*)$$

العلاقة اعلاه كثافة الاحتمالية Density of Probability لحالة الجسيم التي تمثلها الدالة ψ .

وان ψ^* تمثل الدالة العقدية المرافقة للدالة ψ .

فاذا كان لدينا جسيم يتحرك على امتداد محور x ، فان احتمالية وجود الجسيم في الحيز المحصور بين x و $x+dx$ هي :-

$$\psi^*(x)\,\psi(x)\,dx$$

اما اذا اردنا احتمالية وجود الجسيم على محور x بأكمله ، فيجري التكامل الآتي :-

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1} \quad \text{------}(**)$$

ان قيمة التكامل اعلاه يجب ان تساوي واحد وذلك لأننا فرضنا وجود الجسيم على محور x . لذا فان ، التفسير الفيزيائي للدالة الموجية ψ هو أنها تعطي وصفاً كاملاً لحالة الجسيم ولا تمثل الاحتمالية ، لأن الاحتمالية تتراوح بين الصفر والواحد. إذ أن الصفر يعني استحالة وجود الجسيم في مجال المادة التي تمثله ψ . ومن هنا جاءت فرضية التقييس (Normalization) للدالة الموجية ψ .

* التكامل المعرف بالعلاقة (**) اعلاه هو شرط معايرة الدالة ، والدالة التي تحقق هذا الشرط تسمى بالدالة المعيارية Normalized function .

* اذا كانت الدالة ψ غير معروفة معيارية أم لا ، فيمكن معايرتها بضربها بثابت يسمى ثابت المعايرة ، وعليه يمكن كتابة شرط المعايرة بشكل عام كالآتي :-

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx = 1 \quad \text{------} (*)$$

<u>Ex:</u> A particle has the wave function $\psi(r) = N e^{-\alpha r}$, where N is a normalization constant and α is a known real parameter. Find the constant N for a spherical differential volume $d\tau$.

use: $\int_0^{\infty} r^2 e^{-2\alpha r} \, dr = \frac{1}{4\alpha^3}$.

<u>Sol.</u> A spherical differential volume $d\tau = 4\pi r^2 dr$.

Apply the normalization condition. $\int_{\tau} |\psi|^2 d\tau = 1$

$$\int_0^{\infty} N e^{-\alpha r} \cdot N e^{-\alpha r} \cdot 4\pi r^2 \, dr = 1$$

لأن r يمثل نصف القطر للكرة ويأخذ قيم $0 \rightarrow \infty$

$$4\pi N^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2\alpha r} \, dr = 1$$

$$4\pi N^2 \cdot \frac{1}{4\alpha^3} = 1 \Rightarrow N^2 = \frac{\alpha^3}{\pi} \Rightarrow N = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}$$

$$\therefore \psi(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} \, e^{-\alpha r} \quad \text{normalized function}$$

ج ش / كما افترضنا سابقاً ، أنه اذا كانت حزمة الالكترونات ذات الطاقات المتساوية والأشعة المنتظمة ، تمثل بموجة مستوية فأن التمثيل الرياضي لها يكون بدالة عقدية وليس بدالة جيب أو جيب تمام ، كما يلي :

$$\boxed{\psi(x,t) = A e^{i\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t\right)}} \quad \text{------} (1)$$

* حزمة تتحرك بأتجاه محور x ، A سعة الموجة وهي مقدار ثابت ، الدالة عقدية ومنطلق الدالة هو exp وليس له وحدات ، ω التردد الزاوي و λ الطول الموجي .

* الكثافة العددية للالكترونات في هذه الدالة الموجية هي :

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi^*\psi = A^* e^{-i(\cdots)} \cdot A e^{+i(\cdots)}$$

$$= A^* A = |A|^2$$

* التردد الزاوي للموجة ω يرتبط بطاقة الالكترون E كما يلي :

$$E = h\nu = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \quad \Rightarrow \underbrace{\omega t}_{\text{بدون وحدات}} = \underbrace{\frac{E}{\hbar} t}_{\text{بدون وحدات}}$$

كذلك ،

$$\frac{2\pi}{\lambda} x = \frac{2\pi x}{\frac{h}{P_x}} = \frac{x P_x}{\frac{h}{2\pi}} = \underbrace{\frac{x P_x}{\hbar}}_{\text{بدون وحدات}}$$

تعوض في المعادلة رقم ① :

$$\psi(x,t) = A e^{i\left(\frac{xP_x}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}$$

$$\boxed{\psi(x,t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(xP_x - Et)}} \quad \text{-----} (2)$$

* المعادلة رقم (2) هي الدالة الموجية للحالات المستقرة (غير متحللة)
Steady state (nondegenerate)

<u>ملاحظات</u>: نلاحظ الدالة الموجية المعرفة بـ العلاقة رقم (2) اعلاه ، تحتوي على متغيرين هما x و t .

الجزء المعتمد على الزمن t : $e^{-iEt/\hbar}$

الجزء المعتمد على الموقع x : $e^{+ixP_x/\hbar}$

٢ اشتقاق معادلة شرودنكر Schrodinger's Equation

الحالة الأولى : عندما تتحرك الجسيمات في مجال قوة لا تتولد عنه طاقة كامنة
(الجسيمات حرة وغير معرضة الى اي مجال للقوة ⇐ انها تتحرك
بانطلاق ثابت وباتجاه ثابت) ، أي أن : $V(x) = const.$

or $= zero$

* نشتق معادلة الموجة (رقم (2)) بالنسبة الى x :-

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} P_x A e^{\frac{i}{\hbar}(xP_x - Et)} \qquad \times -i\hbar$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = P_x \psi(x,t)} \quad \text{———} (3)$$

* نشتق مرة اخرى بالنسبة لـ x [اشتقاق للمعادلة رقم (3)] :-

$$-i\hbar \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar} P_x P_x \psi \qquad \times -i\hbar$$

$$\boxed{-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = P_x^2 \psi} \quad \text{------} (4)$$

* نشتق المعادلة (2) بالنسبة للزمن t :-

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(x,t) \qquad \times i\hbar$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi} \quad \text{———} (5)$$

* الطاقة الكلية :-

$$E = \underbrace{T}_{\text{حركية}} + \cancel{\underbrace{V}_{\text{كامنة}}}^{\,0} = \frac{P_x^2}{2m}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} P_x^2 \psi \quad \text{———} (6)$$

من المعادلتين (4) و (6) :-

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar\, 2m \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}} \quad ——(7)$$

هذه المعادلة تمثل معادلة شرودنكر في بعد واحد في مجال لاتتولد عنه طاقة كامنة. وهي تمثل معادلة الموجة في الميكانيك الكمي ، وتعتبر صيغتها غريبة من وجهة نظر الفيزياء النظرية بسبب وجود الكمية الخيالية i ، حيث ان المعادلة الكلاسيكية المعروفة :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{C^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

وهذه تختلف عن المعادلة (7) بسبب وجود i في معادلة (7) ولايوجد في هذه المعادلة . وايضا انها تحتوي المشتقة الجزئية الثانية نسبة للزمن بينما في (7) فقط المشتقة الاولى .

* طالما ان الكمية i في المعادلة (7) ، فلابد ان يحتوي الحل على الكمية الخيالية i .

* في حالة الموجة المنتقلة بالفضاء :-

$$\vec{P} = \vec{i}\, P_x + \vec{j}\, P_y + \vec{k}\, P_z \longrightarrow P = \sqrt{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}$$

$$\vec{r} = \vec{i}\, x + \vec{j}\, y + \vec{k}\, z \longrightarrow r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

لذلك فان الدالة الموجية في المعادلة رقم (2) ستكون بالشكل التالي :-

$$\boxed{\psi(\vec{r},t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\cdot\vec{r} - Et)}} \quad ----(8)$$

حيث ان :-

$$\vec{P}\cdot\vec{r} = \vec{r}\cdot\vec{P} = xP_x + yP_y + zP_z$$

* بأستخدام العلاقة (8) يمكن الحصول على معادلات مشابهة للمعادلة رقم (3) وذلك للاتجاهين Y و Z .

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\vec r,t)}{\partial x} = P_x \psi(\vec r,t) \quad \text{------}(3)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\vec r,t)}{\partial y} = P_y \psi(\vec r,t) \quad \text{------}(9)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\vec r,t)}{\partial z} = P_z \psi(\vec r,t) \quad \text{------}(10)$$

* عند جمع المعادلات (3) و(9) و(10) جمعاً اتجاهياً نحصل على :-

$$-i\hbar\left(\vec i \frac{\partial \psi}{\partial x} + \vec j \frac{\partial \psi}{\partial y} + \vec k \frac{\partial \psi}{\partial z}\right) = \vec i P_x \psi + \vec j P_y \psi + \vec k P_z \psi$$

$$-i\hbar\underbrace{\left(\vec i \frac{\partial}{\partial x} + \vec j \frac{\partial}{\partial y} + \vec k \frac{\partial}{\partial z}\right)}\psi = \left(\vec i P_x + \vec j P_y + \vec k P_z\right)\psi$$

$$\boxed{-i\hbar \vec\nabla \psi(\vec r,t) = \vec P \psi(\vec r,t)} \quad \text{------}(11)$$

* كذلك يمكن اعادة كتابة المعادلة رقم (5) لموجة منتقلة في الفضاء بالصيغة :-

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\vec r,t)}{\partial t} = E \psi(\vec r,t)} \quad \text{------}(12)$$

* ملاحظة اضافية :

$$E = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right) = \frac{P^2}{2m}$$

$$\rightarrow P^2 = 2mE \qquad \rightarrow P = \sqrt{2mE}$$

* نأخذ الضرب العددي لطرفي المعادلة (11) من جهة اليسار بـ $\vec\nabla\cdot$ فنحصل على :-

$$-i\hbar \vec\nabla\cdot\vec\nabla \psi(\vec r,t) = \vec\nabla\cdot\vec P \psi(\vec r,t)$$

$$-i\hbar \nabla^2 \psi(\vec r,t) = \vec P\cdot\underbrace{\vec\nabla \psi(\vec r,t)}$$

الضرب العددي تبادلي .

ومن المعادلة يمكن التعويض عن $\vec\nabla\psi$ كما يلي :-

$$\vec\nabla\psi = \frac{}{-i\hbar}\vec P \psi \Big\}$$

$$-i\hbar\,\nabla^2\psi(\vec{r},t)=\vec{P}\cdot\frac{\vec{P}\psi(\vec{r},t)}{-i\hbar}$$

$$-\hbar^2\nabla^2\psi = P^2\psi \qquad \div 2m$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi} \quad \text{-----} \quad (13)$$

* من المعادلتين (12) و(13) نجد أن :-

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)} \quad \text{-----} \quad (14)$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

* المعادلة (14) تمثل معادلة الحركة لجسيم يتحرك في الفضاء (x, y, z) في مجال قوة لا تتولد عنه طاقة كامنة $(V=0)$.

* المعادلة (14) مشابهة تماماً بل هي تعميم للمعادلة (7) .

الحالة الثانية : عندما تتحرك الجسيمات في مجال للقوة تتولد عنه طاقة كامنة V .

* نفترض صلاحية الدالة الموجية المعطاة في العلاقة رقم (1) .

* الطاقة الكلية ستكتب بالشكل :-

$$E=\frac{P^2}{2m}+V(\vec{r}) \quad \text{-------} \quad (15)$$

* العلاقة (14) يمكن كتابتها بالشكل التالي :-

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi} \quad \text{------} \quad (16)$$

* المعادلة (16) تمثل معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن :

Time dependent Schrodinger Equation

* المعادلة (16) هي معادلة شرودنكر والتي تمثل معادلة الحركة في الميكانيك الكمي . حيث من خلالها يمكن معرفة الدالة الموجية ⟸ الحصول على اكبر قدر من المعلومات حول النظام المدروس .

٣ المؤثرات ومسألة القيم الذاتية Operators and Eigenvalues

* **المؤثر** : هو عبارة عن عملية رياضية يعمل على اي دالة فيغيرها الى دالة جديدة .

* في الميكانيك الكمي نتعامل مع متغيرات ديناميكية يمكن قياسها تجريبياً مثل الموضع والزخم والطاقة (كميات ديناميكية قابلة للقياس ≡ الكميات الملاحظة) والتي يمكن تمثيلها بواسطة مؤثرات خاصة .

* يرمز للمؤثر Operator بشكل عام بالرمز $\hat{A}$ وللكمية المقاسة المقابلة لهذا المؤثر بـ A .

اولاً : مؤثر الزخم الخطي : Linear momentum operator

من العلاقة (11) :-

$$\vec{p}\,\psi = -i\hbar\,\vec{\nabla}\psi$$

يمكن اعادة كتابة المعادلة اعلاه باستخدام صيغة المؤثر :-

$$\hat{\vec{p}}\,\psi = -i\hbar\,\vec{\nabla}\psi$$

حيث ان $\hat{\vec{p}}$ هو مؤثر تفاضلي وهو كمية اتجاهية ويساوي :-

$$\boxed{\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}} \quad \ldots\ldots(17)$$

ومركبات هذا المؤثر الاتجاهي يمكن كتابتها كما يلي :-

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad , \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad , \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \quad \ldots\ldots(18)$$

* مؤشر مربع الزخم :-

$$\hat{P}^2 = \hat{\vec{P}} \cdot \hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla} \cdot -i\hbar\vec{\nabla}$$

$$\boxed{\hat{P}^2 = -\hbar^2\nabla^2} \quad \text{------} (19)$$

ثانياً : مؤشر الموضع : هذا المؤشر يمثل متجه الموضع نفسه بدون أي إجراء رياضي ، أي أن :-

$$\boxed{\hat{\vec{r}} = \vec{r} \quad ; \quad \hat{x} = x \quad , \quad \hat{y} = y \quad , \quad \hat{z} = z} \quad \text{------} (20)$$

ثالثاً : مؤشر الطاقة : Energy operator

من العلاقة (5) لبعد واحد أو العلاقة (12) للأبعاد الثلاث :-

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = E\Psi(\vec{r},t)$$

وبصيغة المؤشرات تكتب :-

$$\hat{E}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \quad \text{------} (21)$$

رابعاً : مؤشر الطاقة الكامنة : Potential Energy Operator

الطاقة الكامنة هي دالة تعتمد على الموضع فقط ⟸ تعامل كما تعاملنا مع متجه الموضع ، أي أن

$$\boxed{\hat{V}(\vec{r}) = V(r)}$$

خامساً: المؤثر الهاملتوني : Hamiltonian Operator

* من المعادلة الكلاسيكية لحفظ الطاقة لهاملتون :-

$$E = T + V$$
$$= \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \Rightarrow E - \frac{p^2}{2m} - V(\vec{r}) = 0$$

لو أستبدلنا الكميات الملاحظة الكلاسيكية بالمؤثرات المقابلة لها سنحصل :-

$$\hat{E} - \frac{\hat{p}^2}{2m} - \hat{V}(\vec{r}) = 0$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2) - V(\vec{r}) = 0$$

نضرب المعادلة اعلاه ب الدالة Ψ متجهة لليمين :-

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2) - V(\vec{r})\right]\Psi = 0$$

or $$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(r)\Psi \quad \text{------} (22)$$

العلاقة (22) هي نفسها العلاقة رقم (16) والتي تمثل معادلة الحركة في الميكانيك الكمي .

* في الميكانيك الكلاسيكي ، عندما نكتب الطاقة الكلية بدلالة مربع الزخم فأنها تسمى بدالة هاملتون .

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad \text{---} (23)$$

وبأستبدال الكميات الملاحظة بالمؤثرات المقابلة لها سوف نحصل على صيغة المؤثر الهاملتوني :-

$$\boxed{\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})} \quad \text{------} (24)$$

سادساً : مؤثر الزخم الزاوي : Angular momentum Operator

الزخم الزاوي هو $\vec{L}$:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

و $\vec{L}$ متجه عمودي على المستوى الذي يضم $\vec{r}$ و $\vec{p}$.

$$\vec{L} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ P_x & P_y & P_z \end{vmatrix} = \vec{i}\,(yP_z - zP_y) + \vec{j}\,(zP_x - xP_z) + \vec{k}\,(xP_y - yP_x)$$

$$\Rightarrow \vec{L} = \vec{i}\,L_x + \vec{j}\,L_y + \vec{k}\,L_z$$

وبصيغة المؤثرات يمكن كتابة المؤثرات لمركبات الزخم الزاوي وكما يلي :-

$$\left.\begin{aligned}
\hat{L}_x &= y\hat{P}_z - z\hat{P}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\
\hat{L}_y &= z\hat{P}_x - x\hat{P}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\
\hat{L}_z &= x\hat{P}_y - y\hat{P}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned}\right\} \cdots\cdots (25)$$

مسألة القيمة الذاتية (معادلة القيمة الذاتية):

Eigen Value Problem (Eigen Value Equation)

تكتب معادلة القيمة الذاتية بالشكل الآتي :-

$$\boxed{\hat{A}\varphi = A\varphi} \quad \text{------}(26)$$

* اذا ظهرت الدالة φ في الطرف الأيمن بعد تأثير المؤثر $\hat{A}$ ، فتسمى بالدالة المسموحة للمؤثر $\hat{A}$.

* اذا كانت قيمة A في الطرف الأيمن كمية ثابتة ، فتسمى بالقيمة الذاتية والدالة φ ستكون الدالة الذاتية . ((A قيمة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$)).

EX: Examine the following functions, are available / eigen or not for thier operators.

① $\hat{A} = \frac{d}{dx}$, $\varphi = x^3$

② $\hat{A} = \frac{d}{dx}$, $\varphi = e^{mx}$, m is constant.

Sol: ① $\hat{A}\varphi = ?$

$$\frac{d}{dx}(x^3) = 3x^2$$

بما أن الدالة $\varphi = x^3$ لم تظهر في الطرف الآخر بعد تأثير المؤثر $\frac{d}{dx}$ $\Leftarrow$ الدالة غير مسموحة للمؤثر .

② $$\frac{d}{dx}(e^{mx}) = m e^{mx}$$
$$= m\varphi$$

$\therefore$ الدالة φ مسموحة للمؤثر (دالة ذاتية)
، القيمة الذاتية للمؤثر $= m$.

H.W./ Prove that ($\varphi(x) = A\, e^{-\alpha x}$) is an eigen function of the following operator: $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$.

What is the eigen value of that operator ?

---

4 القيم الذاتية والدوال الذاتية لـ $\hat{x}$ و $\hat{P}_x$:

* معادلة القيم الذاتية لـ x :

$$\hat{x}\,\psi(x,y,z) = x_0\,\psi(x,y,z)$$

$$x\,\psi(x,y,z) = x_0\,\psi(x,y,z) \longrightarrow (x - x_0)\,\psi(x,y,z) = 0 \quad \ldots\ldots (27)$$

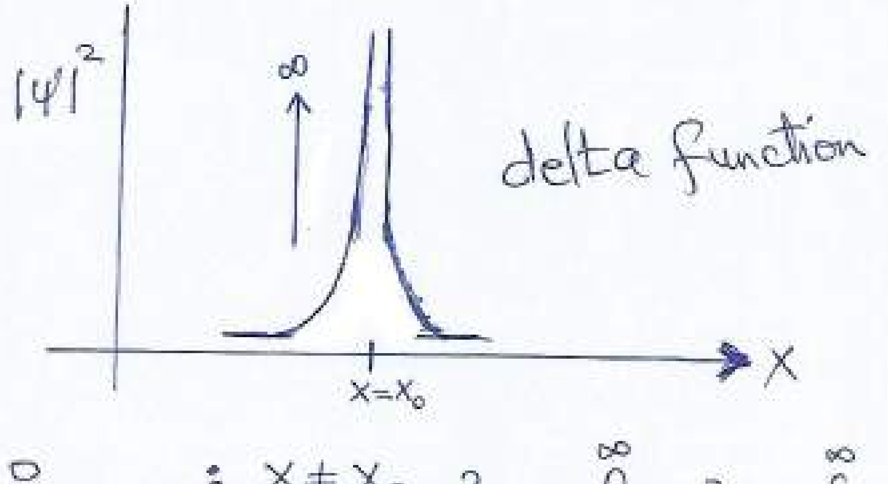
يوجد احتمالان لتفسير المعادلة (27) . هما :

① $x \neq x_0 \Rightarrow \psi = 0 \Rightarrow |\psi|^2 = 0 \Rightarrow$ عدم وجود اي جسم في مدى الدالة ψ .

② $x = x_0 \Rightarrow \psi = \infty \Rightarrow \int \psi^* \psi\, d\tau = 1$ يتحقق شرط المعايرة

و الدالة ستكون شاذة .

ولكن ψ ممكن ان تملك اي قيمة وبما ان النظرية الكمية تمثل الغاية التي تقترب نحوها القياس الحقيقي $\Leftarrow$ الدالة ψ هي دالة ذاتية .



$$\left.\begin{aligned} \delta(x - x_0) &= 0 \quad &: x \neq x_0 \\ &= \infty \quad &: x = x_0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\, dx = 1 \quad \ldots (28)$$

معادلة القيم الذاتية لمركبة الزخم الخطي P_x :

نكتب معادلة القيمة الذاتية للمؤثر P_x :-

$$\hat{P}_x \psi = P_0 \psi$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = P_0 \psi \Longrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}P_0 \psi$$

$$\frac{d\psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar}P_0\, dx$$

تكامل الطرفين :-

$$\ln \psi = \frac{iP_0}{\hbar}x + \text{(مقدار ثابت)}\, f(y,z)$$

بأخذ e للطرفين :-

$$\psi = e^{\frac{iP_0x}{\hbar}}\, \underbrace{e^{f(y,z)}}_{=f(y,z)}$$

$$\psi = f(y,z)\, e^{iP_0x/\hbar} \quad \text{------} (29)$$

من المعادلة اعلاه :-

① أي قيمة من قيم P_0 هي قيمة ذاتية محتملة للمؤثر $\hat{P}_x$ ، على ان تكون P_0 احادية القيمة Single Value .

② الدالة الذاتية المقابلة تكون دالة جيبية لـ x وبطول موجة $\lambda = \frac{h}{P_0}$.

$$\psi(x,y,z) = f(y,z)\left[\cos\left(\frac{P_0x}{\hbar}\right) + i\sin\left(\underbrace{\frac{P_0x}{\hbar}}_{\text{بدون وحدات}}\right)\right]$$

$$\frac{P_0x}{\hbar} = \frac{P_0x}{\frac{h}{2\pi}} = \frac{2\pi x}{\frac{h}{P_0}} = \frac{2\pi}{\lambda}x$$

وبنفس الطريقة نوجد الدوال الذاتية المقابلة لمؤثرات الزخم الخطي $\hat{P}_y$ ، $\hat{P}_z$.

⑤ القيم المتوقعة Expectation Value

* تتعين حركة الجسيم في الميكانيك الكلاسيكي اذا عرفنا متجه الموضع $\vec{r}$ كدالة للزمن ، أي أن $\vec{r}=\vec{r}(t)$.
ويجري هذا التعيين بالاستعانة بمعادلات الحركة وتعيين شروط الحدود .
واذا كان $\vec{r}=\vec{r}_1$ في الزمن t_1 فأن معادلات الحركة تزودنا بمتجه الموضع $\vec{r}=\vec{r}_2$ في زمن لاحق t_2 .
اي ان الموضع في الزمن t_1 يعين بشكل فريد (exact) الموضع الآخر في الزمن t_2 .

* في الميكانيك الكمي فأن حركة الجسيم تصفها دالة الموجة $\psi(\vec{r},t)$ والتي يتم تعيينها من معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن .
حتى لو تعرفنا على موضع الجسيم ومن ثم الدالة الموجية $\psi(\vec{r},t)$ في الزمن t_1 فأن معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن تستطيع تزويدنا فقط بدالة موجة تختلف عن الصفر ولكل قيم $\vec{r}$ في زمن لاحق t_2 .
هذا يعني ان الجسيم يمكن ان يكون في اي مكان وبالتالي معرفتنا بموضع الجسيم في زمن معين لا تكون بشكل مضبوط وفريد (not exact) كما هو الحال في الميكانيك الكلاسيكي .
للتغلب على هذه الصعوبة ، نفرض ان قياسة اجري على الاحداثي x للجسيم وأعيد مرات عديدة في تجارب اخرى على جسيمات مماثلة . ولما كانت احتمالية الحصول على الجسيم في الحجم $d\tau$ حول $\vec{r}$ هي $|\psi(\vec{r},t)|^2 d\tau$ أو $\psi\psi^* d\tau$ ، فأن عدد كبير من هذه التجارب على قياس x سوف يعطي قيمة متوسطة لـ x وتساوي :-

$$\int_{\tau} x\,\psi^{*}\psi\,d\tau$$

هذا المعدل يسمى بالقيمة المتوقعة لـ x ويرمز له بالرمز $\langle x \rangle$:

$$\boxed{\langle x \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, x\, \psi\, d\tau} \quad \text{------} \quad (30)$$

كذلك :

$$\langle y \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, y\, \psi\, d\tau$$

$$\langle z \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, z\, \psi\, d\tau$$

$$\boxed{\langle \vec{r} \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, \vec{r}\, \psi\, d\tau}$$

* القيمة المتوقعة لمتجه (مؤثر) الزخم :

$$\langle \vec{P} \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, \hat{P}\, \psi\, d\tau$$

$$\boxed{\langle \vec{P} \rangle = \int_{\tau} \psi^{*} \left(-i\hbar \vec{\nabla}\right) \psi\, d\tau}$$

* القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة :

$$\langle V(\vec{r}) \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, \hat{V}(\vec{r})\, \psi\, d\tau$$

$$\boxed{\langle V(\vec{r}) \rangle = \int_{\tau} \psi^{*}\, V(\vec{r})\, \psi\, d\tau}$$

* القيمة المتوقعة للطاقة الحركية :

$$\langle T \rangle = \int_{\tau} \psi^* \hat{T} \psi \, d\tau$$

$$= \int_{\tau} \psi^* \frac{\hat{P}^2}{2m} \psi \, d\tau = \int_{\tau} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi \, d\tau$$

$$\boxed{\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \psi^* \nabla^2 \psi \, d\tau}$$

* القيمة المتوقعة للطاقة الكلية :

$$\langle E \rangle = \int_{\tau} \psi^* \hat{E} \psi \, d\tau$$

$$\boxed{\langle E \rangle = \int_{\tau} \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi \, d\tau}$$

* بشكل عام ، القيمة المتوقعة لأي كمية ديناميكية ، مثل Q ، هي :

$$\boxed{\langle Q \rangle = \int_{\tau} \psi^* \hat{Q} \psi \, d\tau}$$

Example: The Solution of time dependent Schrodinger equation for a particle moves in the direction $-\infty \leq x \leq \infty$ for certain potential energy is:

$$\psi(x,t) = x \, e^{-\beta \left(x^2 + \frac{3i\hbar t}{m} \right)}$$

β is constant, ψ is normalized function. Prove that:

$$\langle x \rangle = \langle P_x \rangle = 0$$

Then find the expectation value of the potential energy from the energy conservation Law.

Solution:

$$\psi(x,t) = x\, e^{-\beta x^2}\, e^{-3i\hbar\beta t/m}$$

$$\psi^*(x,t) = x\, e^{-\beta x^2}\, e^{+3i\hbar\beta t/m}$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x\, \psi\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-\beta x^2} e^{+3i\hbar\beta t/m} \cdot x \cdot x\, e^{-\beta x^2} e^{-3i\hbar\beta t/m} \cdot dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x^3}_{\text{دالة فردية}}\ \underbrace{e^{-2\beta x^2}}_{\text{دالة زوجية}}\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\text{دالة فردية})\, dx = 0$$

تحت التكامل دالة فردية

$$\therefore \quad \langle x \rangle = 0$$

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x\, \psi\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-\beta x^2} e^{+3i\hbar t\beta/m} \cdot \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \cdot x\, e^{-\beta x^2} e^{-3i\hbar t\beta/m} \cdot dx$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-\beta x^2} \cdot \frac{d}{dx}\left[x\, e^{-\beta x^2}\right] dx \quad \text{......} (a)$$

$$\frac{d}{dx}\left[x\, e^{-\beta x^2}\right] = x\, e^{-\beta x^2}(-2\beta x) + e^{-\beta x^2}$$

$$= e^{-\beta x^2} - 2\beta x^2 e^{-\beta x^2} \quad \text{......} \quad (b)$$

نعوض (b) في (a) :-

$$\langle P_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta x^2}\left(e^{-\beta x^2} - 2\beta x^2 e^{-\beta x^2}\right) dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(x e^{-2\beta x^2} - 2\beta x^3 e^{-2\beta x^2}\right) dx$$

$$= -i\hbar \left[\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x}_{\text{فردية}} \underbrace{e^{-2\beta x^2}}_{\text{زوجية}} dx - 2\beta \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x^3}_{\text{فردية}} \underbrace{e^{-2\beta x^2}}_{\text{زوجية}} dx \right] = 0$$

$\therefore \langle P_x \rangle = 0$

* صيغة $V(x)$ غير معطاة في السؤال ⟸ من قانون الطاقة $E = T + V$ ⟸

$$V(x) = E - T \implies \langle V(x) \rangle = \langle E \rangle - \langle T \rangle$$

∴ لإيجاد القيمة المتوقعة في هذا السؤال للطاقة الكامنة يجب علينا أولاً إيجاد القيم المتوقعة لكل من الطاقة الكلية و الطاقة الحركية .

مراجعة

* من الدوال المفيدة في حل التكاملات ، هي دالة كاما . وتعرف كما يلي :-

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-a x^2} dx = \frac{1}{2a^{\frac{n+1}{2}}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$$

فإذا كان المقدار $\left(\frac{n+1}{2}\right)$ = عدد صحيح (integer) فإن :-

$$\Gamma(\text{integer}) = (\text{integer} - 1)!$$

وإذا كان المقدار $\left(\frac{n+1}{2}\right)$ = كسر (Fractional) فإن :-

$$\Gamma(\text{Fraction}) = (\text{Fraction} - 1)\Gamma(\text{Fraction} - 1)$$

ص

* أمثلة على دالة Γ :

الأعداد الصحيحة:

$\Gamma(3) = ?$

$$\Gamma(3) = \underbrace{\Gamma(2+1)}^{\text{توزيع}} = (3-1)! = 2! = 2\times 1 = 2$$

$$\Gamma(5) = (5-1)! = (4)! = 4\times 3\times 2\times 1 = 24$$

الأعداد الكسرية:

$\Gamma(\frac{3}{2}) = ?$

$$\Gamma(\tfrac{3}{2}) = \underbrace{\Gamma(\tfrac{1}{2}+1)}_{\text{توزيع}} = \tfrac{1}{2}\Gamma(\tfrac{1}{2}) = \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi} \quad , \quad \Gamma(\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(\tfrac{5}{2}) = (\tfrac{5}{2}-1)\,\Gamma(\tfrac{5}{2}-1)$$

$$= \tfrac{3}{2}\,\Gamma(\tfrac{3}{2}) = \tfrac{3}{2}\cdot(\tfrac{3}{2}-1)\,\Gamma(\tfrac{3}{2}-1)$$

$$= \tfrac{3}{2}\cdot\tfrac{1}{2}\,\Gamma(\tfrac{1}{2})$$

$$\therefore\ \Gamma(\tfrac{5}{2}) = \tfrac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

انتهت الداخلة

* تكملة الحل .

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi\, dx$$

$$= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta x^2} e^{+3i\hbar\beta t/m}\ \frac{\partial}{\partial t}\, x e^{-\beta x^2} e^{-3i\hbar\beta t/m}\, dx$$

$$= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta x^2}\, \underbrace{e^{3i\hbar\beta t/m}} \cdot x e^{-\beta x^2}\left(\frac{-3i\hbar\beta}{m}\right)\underbrace{e^{-3i\hbar\beta t/m}}\, dx$$

$$= \frac{3\hbar^2\beta}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x^2}_{\text{زوجية}}\ \underbrace{e^{-2\beta x^2}}_{\text{زوجية}}\, dx$$

$$= \frac{6\hbar^2\beta}{m}\underbrace{\int_{0}^{\infty} x^2\, e^{-2\beta x^2}\, dx}_{1}$$

بإستخدام تكامل دالة الگاما في تعويض نضع $n=2$ و $a=2\beta$

$$\langle E\rangle = \frac{6\hbar^2\beta}{m}\,\frac{1}{2(2\beta)^{\frac{3}{2}}}\,\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) = \frac{6\hbar^2\beta}{m}\,\frac{1}{2(2\beta)^{3/2}}\,\tfrac{1}{2}\Gamma\left(\tfrac{1}{2}\right)$$

$$= \frac{6\hbar^2\beta}{m}\,\frac{1}{2(2\beta)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$\langle E\rangle = \frac{3}{4}\,\frac{\hbar^2}{m}\,\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}$$

والقيمة المتوقعة للطاقة الحركية :-

$$\langle T\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x\,e^{-\beta x^2}\,\cancel{e^{+3\frac{i\hbar\beta t}{m}}}\cdot\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\cdot x\,e^{-\beta x^2}\,\cancel{e^{-\frac{3i\hbar\beta t}{m}}}\,dx$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} x\,e^{-\beta x^2}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\left[x\,e^{-\beta x^2}\right]dx \quad \text{-----} \quad (C)$$

$$\frac{d^2}{dx}\left(x\,e^{-\beta x^2}\right) = \frac{d}{dx}\left[\frac{d}{dx}\left(x\,e^{-\beta x^2}\right)\right] = \frac{d}{dx}\left[e^{-\beta x^2} - 2\beta x^2 e^{-\beta x^2}\right]$$

$$= \text{------ H.W. ------} = \left[-6\beta x\,e^{-\beta x^2} + 4\beta^2 x^3 e^{-\beta x^2}\right] \text{---} (d)$$

نعوض المعادلة (d) في المعادلة (C) :-

$$\langle T\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} x\,e^{-\beta x^2}\left[-6\beta x\,e^{-\beta x^2} + 4\beta^2 x^3 e^{-\beta x^2}\right]dx$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[-6\beta\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\beta x^2}dx + 4\beta^2\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-2\beta x^2}dx\right]$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[-12\beta\int_0^{\infty} x^2 e^{-2\beta x^2}dx + 8\beta^2\int_0^{\infty} x^4 e^{-2\beta x^2}dx\right]$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[-12\beta\cdot\frac{1}{2(2\beta)^{\frac{3}{2}}}\,\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) + 8\beta^2\cdot\frac{1}{2(2\beta)^{5/2}}\,\Gamma\left(\tfrac{5}{2}\right)\right]$$

H.W

$$\therefore \langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}$$

$$\therefore \langle V(x) \rangle = \langle E \rangle - \langle T \rangle$$

$$= \frac{3}{4}\,\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} - \frac{3}{4}\,\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}$$

$$\therefore \langle V(x) \rangle = \frac{3}{8}\,\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}$$

---

* التفاوت Variance :

يعرف التفاوت لكمية ديناميكية F (أي رمز ممكن كتابة مثلاً Q أو A)
والتي تقابل المؤثر $\hat{F}$ كما يلي:

التفاوت $\boxed{(\Delta F)^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}$ ......(31)

التقلل $\boxed{\Delta F = \sqrt{(\Delta F)^2}}$

$$\langle F \rangle^2 = \left[\int_\tau \psi^* \hat{F} \psi \, d\tau\right]^2$$

$$\langle F^2 \rangle = \int_\tau \psi^* \hat{F}^2 \psi \, d\tau$$

القيمة المتوقعة لـ F ومربعها

H.W. EX.①: The wave function for a particle moves in certain potential is given by:

$$\psi(x,t) = A\, e^{i(\alpha x - \beta t)}$$

Find the expectation values of the particle's energy and momentum. Consider the wave function to be normalized.

EX.②: Suppose that a particle moves in x direction in a box $(0 \leqslant x \leqslant 2)$, if the probability density is given by:

$$|\psi(x)|^2 = \frac{15}{16}\left(x^2 - \frac{1}{4}x^4\right).$$

Find the expectation value of the particle's position, and the degeneracy/uncertaintely of position (Δx).

---

6 الدوال الذاتية وثوابت الحركة :

نفرض ان المؤثر $\hat{Q}$ اثر على الدالة ψ فحولها الى عدد Q_0 مضروباً بـ ψ فان :-

$$\underbrace{\hat{Q}}_{\substack{\text{مؤثر} \\ \text{operator}}}\ \underbrace{\psi}_{\substack{\text{دالة} \\ \text{function}}} = \underbrace{Q_0}_{\substack{\text{قيمة ذاتية} \\ \text{eigen value}}}\ \underbrace{\psi}_{\substack{\text{دالة ذاتية} \\ \text{eigen function}}} \longleftarrow$$

معادلة قيمة ذاتية

eigen value equation

لذا فأن القيمة المتوقعة للكمية الديناميكية Q :-

$$\langle Q \rangle = \int_\tau \psi^* \hat{Q} \psi \, d\tau = \int_\tau \psi^* Q_0 \psi \, d\tau = Q_0 \int_\tau \psi^* \psi \, d\tau$$

وإذا كانت الدالة ψ دالة عيارية $\Leftarrow$ $\int_{\tau} \psi^* \psi \, d\tau = 1$

معدل كل القياسات التي اجريت لقياس الكمية المتغيرة Q تعطي نفس النتيجة والتي تساوي القيمة الذاتية Q_0. $\Leftarrow$

$$\Rightarrow \underset{\text{معدل القياسات}}{\langle Q \rangle} = \underset{\text{قيمة ذاتية ثابتة}}{Q_0}$$

$\Leftarrow$ في هذه الحالة تسمى الكمية Q ثابتة الحركة . ونقصد بثابت الحركة هي الكمية الفيزيائية التي لا تتغير مع الزمن .

* الميكانيك الكلاسيكي يتنبأ بقيمة محددة ومعينة لنتيجة قياس مباشر للكمية الفيزيائية .

* الميكانيك الكمي يتنبأ بمعدل عدد كبير من عمليات القياس ($\langle Q \rangle$).

* يمكن القول بأن القيمة المحسوبة كلاسيكياً = القيمة المتوقعة المحسوبة كمياً .

أي أن ، القيم المتوقعة للمتغيرات الفيزيائية المحسوبة من الميكانيك الكمي يجب ان تخضع لنفس القوانين التي تخضع لها نفس المتغيرات هذه في الميكانيك الكلاسيكي. وسنبرهن فيما يلي بهذا الخصوص ثلاث نتائج مهمة وكل واحدة منها تقابل نتيجة اساسية في الميكانيك الكلاسيكي :-

<u>النتيجة الأولى</u>: القيمة المتوقعة للطاقة الكلية = القيمة المتوقعة للطاقة الحركية + القيمة المتوقعة للطاقة الكامنة .

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

<u>البرهان</u>: من معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن

$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}_{\hat{E}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}_{\hat{T}}\psi + \underbrace{V(r)}_{\hat{V}(r)}\psi$$

$$\rightarrow \quad \hat{E}\psi = \hat{T}\psi + \hat{V}(r)\psi$$

نضرب الطرفين من اليسار بالدالة ψ^* ونكامل الطرفين :-

$$\int_\tau \psi^*\hat{E}\psi\, d\tau = \int_\tau \psi^*\hat{T}\psi\, d\tau + \int_\tau \psi^*\hat{V}(r)\psi\, d\tau$$

$$\boxed{\langle E\rangle = \langle T\rangle + \langle V(r)\rangle} \quad \cdots\cdots (32)$$

<u>النتيجة الثانية</u>: تغير القيمة المتوقعة لـ x لوحدة الزمن = القيمة المتوقعة للزخم P_x مقسومة على الكتلة m .

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle P_x\rangle}{m}$$

<u>البرهان</u> :

$$\langle x\rangle = \int_\tau \psi^* x\, \psi\, d\tau$$

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int_\tau \psi^* x\, \psi\, d\tau$$

$$= \int_\tau \left(\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*}{\partial t} x\,\psi\right) d\tau \quad \cdots\cdots (a)$$

من معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن :-

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi$$

and
$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V(r)\psi^* \qquad \text{(معادلة شرودنكر بالصيغة العقدية)}$$

ومن معادلة شرودنگر نفوض عن $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ و $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$ في العلاقة (a) ج:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\int_\tau\left(\psi^* x\left[\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi-\cancel{\frac{i V(r)}{\hbar}\psi}\right]+\left[\frac{-i\hbar}{2m}\nabla^2\psi^*+\cancel{\frac{i}{\hbar}V(r)\psi^*}\right]x\psi\right)d\tau$$

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\int_\tau\left(\psi^* x\nabla^2\psi-\psi x\nabla^2\psi^*\right)d\tau \quad \cdots\cdots(33)$$

وباستخدام نظرية گرين Greens Theorem :

$$\boxed{\int_\tau\left(\psi^*\nabla^2\Phi-\Phi\nabla^2\psi^*\right)d\tau=\int_S\left(\psi^*\vec\nabla\Phi-\Phi\vec\nabla\psi^*\right)\cdot d\vec S}$$

let: $\Phi = x\psi$

$$\Rightarrow\int_\tau\left(\psi^*\nabla^2 x\psi-x\psi\nabla^2\psi^*\right)d\tau=\int_S\left(\psi^*\vec\nabla x\psi-x\psi\vec\nabla\psi^*\right)\cdot d\vec S \quad \cdots\cdots(34)$$

* حيث تم تحويل التكامل الحجمي الى تكامل سطحي .
و S هو السطح المحيط بالحجم τ .

* و لأن شروط الحدود تفرض ان الدالة ومشتقاتها الاولى بالنسبة للبعد عند حدود السطح تساوي صفراً $\Longleftarrow$ الطرف الايمن من المعادلة (34) يساوي صفراً . $\Longleftarrow$

$$\underbrace{\int_\tau \psi x\nabla^2\psi^* d\tau}_{\text{الحد الثاني في المعادلة (33)}}=\int_\tau\psi^*\nabla^2\psi x\, d\tau$$

$$\Rightarrow\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\int_\tau\left(\psi^* x\nabla^2\psi-\psi^*\nabla^2\psi x\right)d\tau$$

But: $\nabla^2 x\psi = x\nabla^2\psi+2\frac{\partial\psi}{\partial x}$ (H.W) واجب