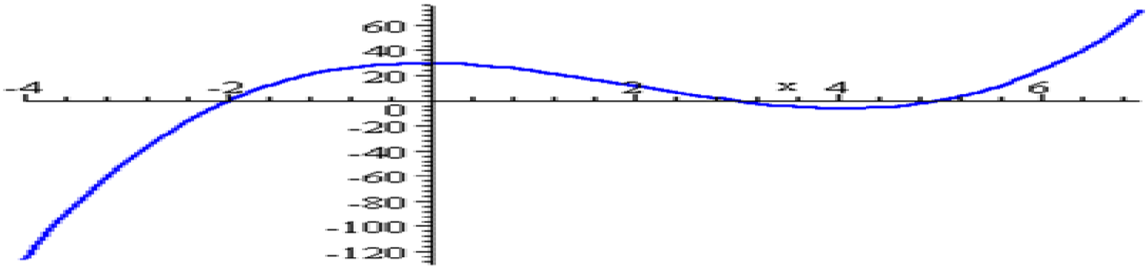
الصياغة العامة لنظرية الكم

في العام 1925 وضع العالم هاينزبرك ميكانيك الكم بشكل مصفوفات اي فسر حركة الالكترونات و الذرات او الحركة المايكروسكوبية على شكل مصفوفات لذلك سمي ميكانيك المصفوفات. في العام 1926 استخدم الفيزيائي النمساوي شرودنكر الميكانيك الموجي لتفسير حركة الاجسام الصغيرة المايكروسكوبية. ان الافكار الاساسية لميكانيك الكم قد وضعت على شكل فرضيات اساسية postulates .

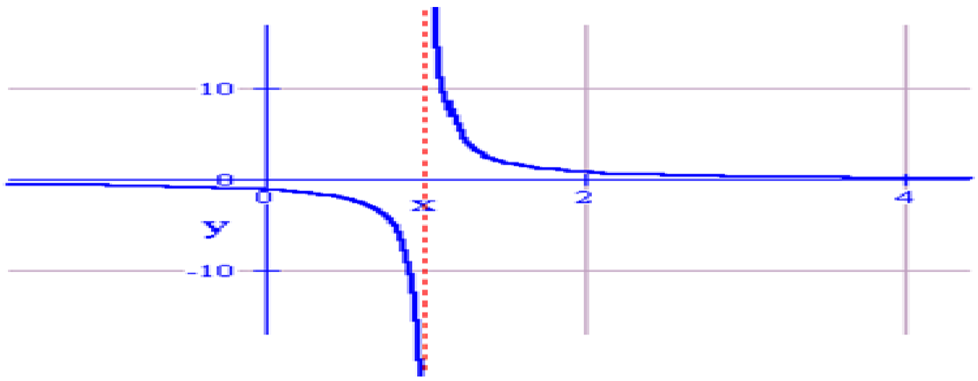
الفرضية الاولى: دالة الحالة الكمية للنظام

الفرضية الاولى: توصف حالة النظام بواسطة دالة للاحداثيات و الزمن تسمى هذه الدالة بدالة حالة النظام $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ و تحتوي هذه الدالة على كافة المعلومات التي يمكن تحصيلها من النظام ومن صفات هذه الدالة ان تكون مقبولة فيزيائيا

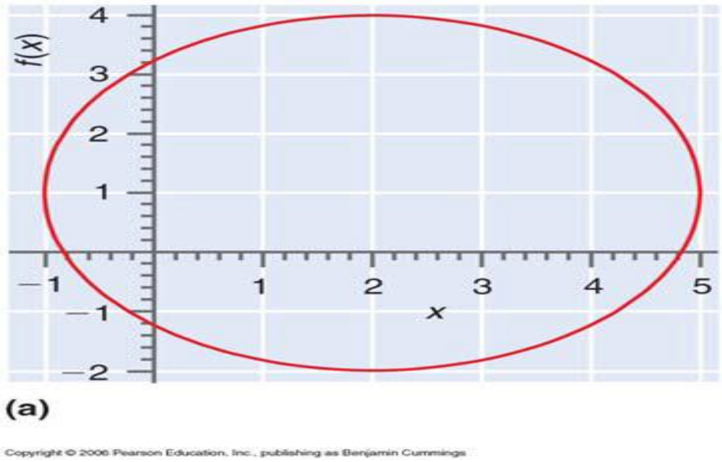
شروط الدالة المقبولة فيزيائيا تكون الدالة مستمرة وكذلك مشتقتها الاولى مستمرة ووحيدة القيمة كما ان مربعها قابل للتكامل و المقصود بكون ان مربع الدالة قابل للتكامل هو $\int |\Psi|^2 d\tau \neq \infty$ حيث ان $d\tau = dxdydz$ و يسمى بعنصر الحجم التفاضلي.



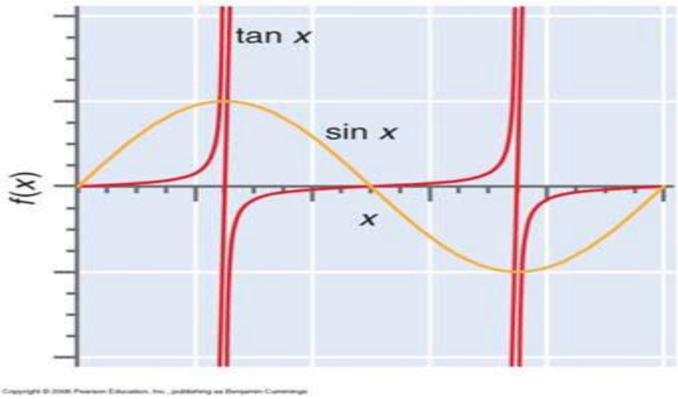
الدالة $f(x) = x^3 - 6x^2 - x + 30$ دالة مستمرة ومقبولة فيزيائيا



الدالة $f(x) = \frac{1}{1-x}$ غير مستمرة عند $x = 1$ وغير مقبولة فيزيائيا



الدالة $(f(x)-1)^2+(x-2)^2=9$ غير مقبولة فيزيائيا لانها غير احادية القيمة



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

ان الحالة القياسية للتكامل اعلاه هو عندما يكون

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1-2)$$

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

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2-2)$$

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

$$\int |\Psi_n \Psi_m| d\tau = \delta_{nm} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3-2)$$

ان الرمز δ_{nm} يلفظ دلتا كرونيكر و ياخذ قيمة 0 عندما $n \neq m$ وتكون قيمته1عندما $n = m$ اما عندما يكون

$$\int |\Psi|^2 d\tau = k \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4-2)$$

حيث ان k عدد حقيقي فتكون Ψ عندها مقبولة فيزيائيا و لكن غير معايرة, و لغرض معايرة الدالة الموجية الغير معايرة نقسم المعادلة على k فينتج

$$\frac{\int |\Psi|^2 d\tau}{k} = 1 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (5-2)$$

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

$$N = \frac{1}{\sqrt{k}} = \frac{1}{\sqrt{\int |\Psi|^2 d\tau}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (6-2)$$

ومن ثم بضرب Ψ مع N نحصل على دالة موجية معايرة $\boldsymbol{\Psi}$

مثال: هل ان الدالة e^{3x} دالة مقبولة فيزيائيا واذا كانت كذلك هل هي دالة معايرة او متعامدة ام غير معايرة ثم اوجد ثابت المعايرة اذا لم تكن معايرة

ج/

$\int |\Psi|^2 d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} (e^{3x})^2 dx$ اخذت حدود التكامل هذه لعدم تحديد حدود في السؤال

$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{6x} dx = \frac{1}{6}\int_{-\infty}^{\infty} e^{6x} * 6dx = \frac{1}{6}[e^{6x}]_{-\infty}^{\infty} = \frac{1}{6}(e^{\infty} - e^{-\infty})$

$\frac{1}{6}(\infty - 0) = \infty$

اذا تكون هذه الدالة غير مقبولة فيزيائيا

و الان اذا غيرنا حدود التكامل (منطقة تواجد الدالة) و فرضنا ان التكامل يقع في المنطقة $1 \geq x \geq 0$ يكون الحل

$$\frac{1}{6}\int_0^1 e^{6x} * 6dx = \frac{1}{6}\,[e^{6x}]_0^1 = \frac{1}{6}(e^6 - e^0) = \frac{1}{6}(e^6 - 1) = 67.1$$

في هذه الحالة تكون هذه الدالة مقبولة فيزيائيا و لكن غير معايرة و لغرض ايجاد ثابت المعايرة نطبق القانون

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_0^1 |\Psi|^2 dx}} = \frac{1}{\sqrt{67.1}} = 0.122$$

و بذلك تكون الدالة الجديدة $\Psi = 0.122 * e^{3x}$ دالة معايرة قيمة المربع المطلق لتكاملها ضمن الفترة $0 \le x \le 1$ مساوي للواحد.

من المعروف ان الدوال التي تتراوح قيمتها بين الصفر و الواحد الصحيح هي دوال تحمل معنى احتمالي لذلك فان التكامل $\int |\Psi|^2 d\tau$ يحمل معنى احتمالية تواجد النظام ضمن حالة معينة مثل احتماية وجود الالكترون في منطقة معينة و التكامل $\int \Psi_n \Psi_m d\tau$ له معنى احتمالية انتقال النظام ضمن الحالتين n و m مثل احتمالية الانتقال الطيفي من الحالة الارضية الى الحالة المثارة و بما ان قيمة التكامل ككل تعطي معنى احتمالي وان $d\tau$ تمثل عنصر الحجم التفاضلي لذلك فان مربع دالة الموجة اي ($|\Psi|^2$ او $\Psi_n \Psi_m$) 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.

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 اشارة 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

$$|ZZ^*| = (a + ib) * (a - ib) = a^2 + iab - iab - i^2 b^2$$

$$|ZZ^*| = a^2 + b^2$$

و بالتالي تتبقى الكميات الحقيقية و التي تعطي معنى فيزيائي.

مثال: هل ان الدالة e^{ix} مقبولة فيزيائيا ضمن المدى $0 \le x \le 1$ و اذا كانت كذلك هل هي معايرة ام متعامدة واذا لم تكن معايرة اوجد ثابت المعايرة و الدالة المعايرة

ج/

$$\int_0^1 \Psi^* \Psi dx = \int_0^1 e^{-ix} e^{ix} dx = \int_0^1 e^0 dx = \int_0^1 dx = [x]_0^1 = (1 - 0) = 1$$

تكون الدالة ix مقبولة فيزيائيا ومعايرة ضمن حدود التكامل.