

الباب الثاني

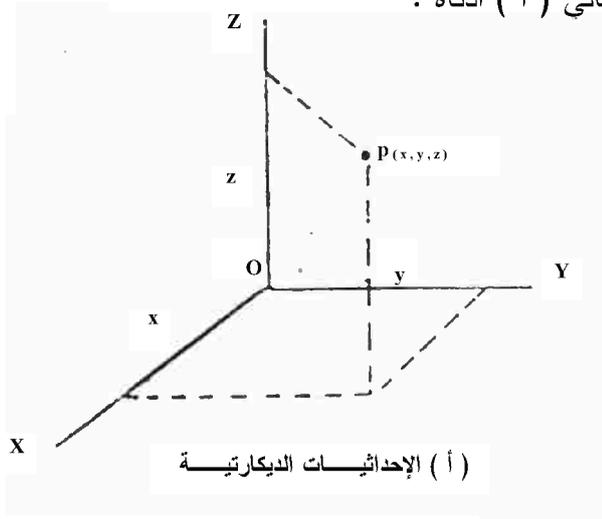
مبادئ رياضية في كيمياء الكم

مبادئ رياضية : Mathematical Preliminaries :

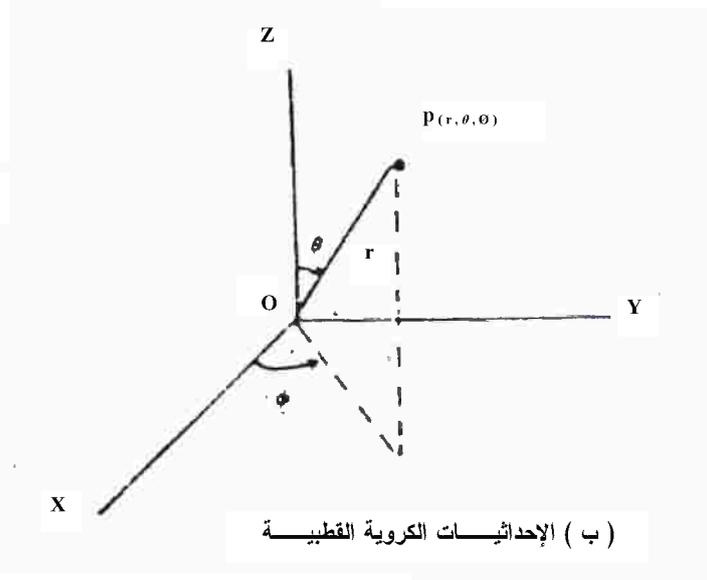
في هذا الجزء سنركز اهتمامنا على بعض الأسس الرياضية التي نحتاجها في توضيح مواد هذا الموضوع المهم وهو كيمياء الكم . لذا يجب التأكد من أنك قد فهمتها جيدًا .

١- الأنظمة الإحداثية : Coordinate Systems :

ونذكر هنا نظامين إحداثيين هما النظام الإحداثي الديكارتي **Coordinates Cartesian** ونظام الإحداثيات القطبية الكروية **Polar Coordinates Spherical** ففي النظام الأول وهو الأكثر شيوعًا يمكن تمثيل نقطة **P** في الفراغ بواسطة مسافات **x, y, z** على طول ثلاثة محاور **X, Y, Z** على التوالي . وكما هو مبين في الشكل التالي (أ) أدناه :



وفي الإحداثيات القطبية الكروية يمكن تمثيل النقطة P في الفراغ بواسطة مسافة (r) وزاويتين (θ , ϕ) كما هو مبين في الشكل التالي (ب) .



ويلاحظ أن الإحداثي r يمثل الخط الواصل بين النقطة P ونقطة الأصل 0 . أما الزاوية θ فتدعى بالزاوية القطبية في حين تدعى ϕ بالزاوية السميتية azimuthal angle . أما العلاقة بين النظامين الإحداثيين المذكورين أعلاه فيمكن التعبير عنها بالمعادلات التالية :

$$x = r \sin\theta \cos \phi$$

$$y = r \sin\theta \sin \phi$$

$$z = r \cos\theta$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad \text{وأيضاً يمكنك إثبات أن :}$$

أما حدوث الإحداثيات فهي :

$$0 \leq r < \infty , 0 \leq \theta \leq \pi , 0 \leq \phi \leq 2\pi$$

٢- المحددات : Determinants :

ولنأخذ المحددة ذات الرتبة n (رتبة المحددة هي عدد الصفوف rows أو الأعمدة columns فيه) .

$$|M| = \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & \dots & M_{1n} \\ M_{12} & M_{22} & M_{23} & \dots & M_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ M_{n1} & M_{n2} & M_{n3} & \dots & M_{nn} \end{vmatrix}$$

ونعرف هنا المصغر minor للعنصر M_{rc} على أساس أنه المحددة المتبقية بعد حذف الصف r والعمود c الحاويان على الصفر M_{rc} . أما الإشارة التي تسبق المصغر فنحصل عليها بواسطة $(-1)^{r+c}$ والتي تسمى بالعامل المرافق cofactor للعنصر .

ومن أجل تعيين قيمة المحددة نستخدم طريقة لابلاز وهي

تتوضح بالمثال التالي :

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} \equiv a \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$$

$$= a (ei - fh) - b (di - fg) + c (dh - eg)$$

$$= aei - afh - bdi + bfg + cdh - ceg$$

٣- المتجهات : Vectors :

تسمى الكميات التي تمتلك مقداراً واتجاهاً بالكميات الاتجاهية vector quantities مثل القوة أو المجال الكهربائي والتعجيل . أما تلك التي تمتلك فقط

مقداراً فتدعى بالكميات الاتجاهية **scalar quantities** مثل $x^2 + x + 1, 15$.

ويوضع عادة فوق الرموز التي تستخدم لتمثيل المتجهات علاقة سهم (\rightarrow) وذلك لتمييزها عن الرموز الأخرى . ومن الملائم العمل مع المتجهات بدلالة مركباتها وهذا يتم بتحديد ثلاثة متجهات وحدة .

وهذه المتجهات الثلاث هي متجهة واحدة **unit vector** هو المتجه الذي يكون طوله وحدة واحدة) متعامدة على بعضها البعض يرمز لها \vec{i} ، \vec{j} ، \vec{k} وهي تمتد على طول المحاور X, Y, Z على التوالي . وهكذا يمكن كتابة المتجه \vec{A} بالشكل التالي .

$$\vec{A} = A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k}$$

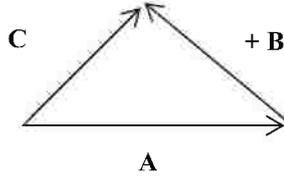
ونكتب متجه \vec{r} في الشكل السابق (ب) كما يلي :

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

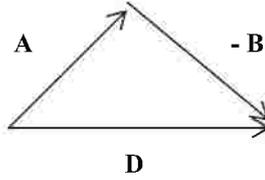
والآن نتطرق بإيجاز لبعض القواعد في المتجهات .

٤- جمع وطرح المتجهات :

إن عملية جمع المتجهات مثل $\vec{A} + \vec{B} = \vec{C}$ يمكن إنجازها بطريقة بيانية أو بطريقة تحليلية . فبيانياً ، توضع مؤخرة المتجه \vec{B} عند رأس المتجه \vec{A} أما حاصل الجمع الاتجاهي \vec{C} فهو يبدأ عند مؤخرة \vec{A} وينتهي عند رأس \vec{B} كما هو مبين في الشكل التالي (أ) أدناه :



(أ) الجمع الاتجاهي بالطريقة التحليلية



(ب) الطرح الاتجاهي بالطريقة التحليلية

وإذا استطعنا كتابة المتجهين \vec{A} ، \vec{B} بدلالة مركباتهما . عندئذ يمكن إنجاز عملية الجمع الاتجاهي بطريقة تحليلية وكما يلي :

$$\vec{A} = A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k}$$

$$\vec{B} = B_x \vec{i} + B_y \vec{j} + B_z \vec{k}$$

ويكون الجمع الاتجاهي :

$$\vec{C} = (A_x + B_x) \vec{i} + (A_y + B_y) \vec{j} + (A_z + B_z) \vec{k}$$

وكما هو الحال مع عملية الجمع الاتجاهي يمكننا معالجة عملية الطرح الاتجاهي $\vec{A} - \vec{B} = \vec{D}$ بطريقة بيانية انظر الشكل السابق وبطريقة تحليلية :

$$\vec{D} = (A_x - B_x) \vec{i} + (A_y - B_y) \vec{j} + (A_z - B_z) \vec{k}$$

المقدار **Magnitude** أي أن المقدار لأي متجه يعطى بـ:

$$\|\mathbf{A}\| = (\mathbf{A}_x^2 + \mathbf{A}_y^2 + \mathbf{A}_z^2)^{1/2}$$

٥- حاصل ضرب المتجهات :

هناك نوعان من حاصل ضرب المتجهات :

(أ) حاصل ضرب لا اتجاهي لمتجهين يعطي عددًا ويعرف كالاتي :

$$\overline{\mathbf{A}} \cdot \overline{\mathbf{B}} = AB \cos \theta$$

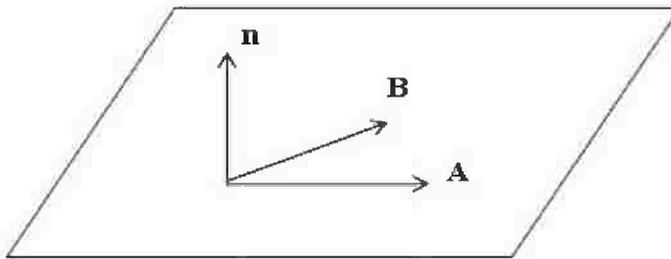
حيث $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ هما مقدارا المتجهين $\overline{\mathbf{A}}$ ، $\overline{\mathbf{B}}$ ، أما θ فهي الزاوية بينهما . وثمة حالة مهمة تبرز لهذا النوع هي : $\overline{\mathbf{A}} \cdot \overline{\mathbf{B}} = 0$ ولمثل هذه التجربة يقال عن المتجهين بأنهما متعامدان .

(ب) حاصل ضرب اتجاهي المتجهين يعطي متجهًا جديدًا عموديًا على المتجهين **Orthogonal** الأصليين . ويعرف كالاتي :

$$\overline{\mathbf{A}} \times \overline{\mathbf{B}} = \overline{\mathbf{n}} \quad AB \sin \theta$$

حيث $\overline{\mathbf{n}}$ هو متجه وحدة عمودي على كل من $\overline{\mathbf{A}}$ ، $\overline{\mathbf{B}}$.

أما اتجاه $\overline{\mathbf{n}}$ فيحدد بواسطة (قاعدة اليد اليمنى) وتتلخص بأن نضع الحافة السفلى للكف الأيمن على طول المتجه $\overline{\mathbf{A}}$ ونلوي الأصابع على طول المتجه $\overline{\mathbf{B}}$ وعندئذ يمتد الإبهام باتجاه $\overline{\mathbf{n}}$ كما هو مبين في الشكل التالي . ونتيجة لهذه القاعدة يتضح أن الضرب الاتجاهي لا يكون تبادلياً أي أن :



استخدام قاعدة اليد اليمنى لتعيين اتجاه المتجه $\overline{\mathbf{A}} \times \overline{\mathbf{B}}$

$$\vec{A} \times \vec{B} \neq \vec{B} \times \vec{A}$$

وبدلالة مركبات المتجهات يمكن كتابة الضرب الاتجاهي

بصيغة محددة كالآتي :

$$\begin{aligned} \vec{B} \times \vec{A} &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} \\ &= \vec{i} \begin{vmatrix} A_y & A_z \\ B_y & B_z \end{vmatrix} - \vec{j} \begin{vmatrix} A_x & A_z \\ B_x & B_z \end{vmatrix} + \vec{k} \begin{vmatrix} A_x & A_y \\ B_x & B_y \end{vmatrix} \\ &= (A_y B_z - A_z B_y) \vec{i} - (A_x B_z - A_z B_x) \vec{j} + (A_x B_y - A_y B_x) \vec{k} \end{aligned}$$

٦- الأعداد المعقدة : Complex Numbers

تتضمن الأعداد المعقدة جزأين : جزء حقيقي real part وجزء

خيالي imaginary part . ويكتبان كالتالي :

$$D = E + iF$$

حيث D, E, F هي أعداد ، وإن $i = \sqrt{-1}$.

وإذا تم استبدال i بـ $-i$ فسيستنتج معقد مرادف D^*

له يكون $E - iF = DD^*$ وإن $E^2 + F^2$ ستساوي $E^2 - i^2 F^2 = E^2 + F^2$ (لأن

$$E^2 - (-1) F^2 = E^2 + F^2 = DD^* \text{ أما قيمة } D \text{ magnitude فهو :}$$

$$\| D \| = (DD^*)^{1/2}$$

وفي عملية جمع وطرح الأعداد المعقدة تستخدم الأجزاء الحقيقية

والخيالية بصور منفصلة .

٧- المؤثرات : Operators :

المؤثر هو عبارة عن رمز symbol يشير إلى إنجاز عمل ما

على أي شيء يتبعه فمثلاً في التعبير $\frac{d}{dx} f(x)$ يكون المؤثر هنا هو $\frac{d}{dx}$ وهو يأمرنا بعمل التفاضل نسبة إلى x لما يتبعه وهو الدالة $f(x)$ وعادة نميز المؤثرات عن بقية الرموز وذلك بوضع علامة رأس سهم (\wedge) فوقها مثل \hat{Q} , \hat{P} .

ويقال عن المؤثرين \hat{Q} , \hat{P} بأنهما متبادلان إذا كان $\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P}$ ولنفترض على سبيل المثال بأن :

$$\hat{P} = \frac{d}{dx}, \hat{Q} = x$$

وأيضاً نفترض أنه عندنا دالة $f(x) = x^2$ والآن في هذه الحالة هل سيكون $\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P}$ ؟ لنرى :

$$\hat{P}\hat{Q}f(x) = \frac{d}{dx}(x)(x^2) = \frac{d}{dx}x^3 = 3x^2$$

ملاحظة عندما نتعامل مع المؤثرات يجب أن نكون حذرين في ترتيب عمل هذه المؤثرات والمعتاد عليه أن نبدأ الكائن على جهة اليمين ونعمل باتجاه اليسار .

$$\hat{P}\hat{Q}f(x) = (x) \frac{d}{dx}(x^2) = x(2x) = 2x^2$$

وهكذا فإن $\hat{P}\hat{Q} \neq \hat{Q}\hat{P}$ ونقول هنا أن \hat{P} , \hat{Q} غير متبادلين .

وفي ميكانيك الكم تستخدم المؤثرات الخطية **linear operators** فقط ، ويكون المؤثر خطياً إذا كان ما يلي صحيحاً :

$$\hat{P} (af + bg) = a\hat{P}f + bPg$$

حيث **a** , **b** هي ثوابت وإن **f** , **g** هما دالتين .

ويعد $\frac{d}{dx}$ مؤثراً خطياً ولكن المؤثر ليس مؤثراً خطياً فمثلاً :

$$\sqrt{3 + 4} \neq \sqrt{3} + \sqrt{4}$$

ومن المؤثرات التي يكثر استخدامه في ميكانيك الكم هو مؤثر لابلاز **Laplacian operator** ∇^2 وهو يعرف بدلالة الإحداثيات الديكارتية كالآتي :

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

وبدلالة الإحداثيات القطبية الكروية يكتب كالتالي :

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

٨- معادلات القيمة الذاتية (قيمة إيجن) : **Eigenvalue Equations** :

إن المعادلة من نوع : $\hat{P}f = cf$.

تسمى بمعادلة القيمة الذاتية ، وذلك أن \hat{P} هو المؤثر الذي يؤثر على الدالة **f** وتكون النتيجة ظهور نفس الدالة مضروبة بمقدار ثابت **c** وفي مثل هذه الحالة تدعى الدالة **f** بالدالة الذاتية **eigenfunction** والثابت **c** بالقيمة الذاتية **eigenvalue** ولنأخذ بعض الأمثلة :

الملاحظات	نتيجة تأثير المؤثر على الدالة	الدالة	المؤثر
لا تكون x^2 دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} x^2 = 2x$	x^2	$\frac{d}{dx}$
تكون e^{cx} دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} e^{cx} = ce^{cx}$	e^{cx}	$\frac{d}{dx}$
لا تكون $\cos x$ دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} \cos x = \sin x$	$\cos x$	$\frac{d}{dx}$
تكون هنا $\cos x$ دالة ذاتية	$\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \cos x \right) = \frac{d}{dx} (- \sin x)$ $= - \cos x$	$\cos x$	$\frac{d^2}{dx^2}$

دالتي لاجرنج وهاملتون :

Functions of Lagrange & Hamilton:

تعرف أولاً السرعة والتعجيل بدلالة الإحداثيات الديكارتية وفي

اتجاه x بالشكل التالي :

$$x = \frac{dx}{dt} \quad (\text{السرعة}) \quad \dots (19)$$

$$x = \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{dx}{dt} \quad \dots (20)$$

أما قانون نيوتن الثاني في الحركة الذي يربط القوة

(على المحور x نرسم لها F_x) المسطرة على جسيم مع تعجيل (x) وكتلة

(m) ذلك الجسيم فيكتب كالاتي :

$$F_x = mx \quad \dots (21)$$

ونفس الشيء مع الاتجاهين الآخرين فنكتب :

$$F_y = my \quad \dots (22)$$

$$F_z = mz \quad \dots (23)$$

وكذلك يمكن اشتقاق القوى لنظام محافظ (وهو النظام الذي فيه يكون مجموع طاقتي الجهد والحركية يساوي كمية ثابتة) من الجهد V (إن V هو دالة للإحداثيات أي أن $V = V(x, y, z)$) وبالشكل التالي :

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad \dots (24)$$

$$F_y = -\frac{\partial V}{\partial y} \quad \dots (25)$$

$$F_z = -\frac{\partial V}{\partial z} \quad \dots (26)$$

ولنظام يتكون من n من الجسيمات فإن الطاقة الحركية الكلية T (نذكر بأن طاقة الحركية لجسيم واحد وفي اتجاه واحد هي $(\frac{1}{2} m u_x^2)$) ستكون :

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} m_1 (x_1^2 + y_1^2 + z_1^2) + \frac{1}{2} m_2 (x_2^2 + y_2^2 + z_2^2) \\ &= \frac{1}{2} \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) \quad \dots (27) \end{aligned}$$

ويربط المعادلات (21) , (24) , (27) فإن معادلة نيوتن في الحركة يمكن كتابتها بالصيغة التالية :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} + \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0 \quad \dots (28)$$

وبصورة مشابهة نكتب :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{y}_i} + \frac{\partial V}{\partial y_i} = 0 \quad \dots (29)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{z}_i} + \frac{\partial V}{\partial z_i} = 0 \quad \dots (30)$$

وقد أدخل لاكرانج الدالة L التي تساوي الفرق بين طاقتي
الحركية والجهد ، أي :

$$L = T - V \quad \dots (31)$$

وعلى هذا الأساس يمكن إعادة كتابة المعادلات (28) , (29) , (30)
بالشكل التالي :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_i} + \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad \dots (32)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}_i} + \frac{\partial L}{\partial y_i} = 0 \quad \dots (33)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{Z}_i} + \frac{\partial L}{\partial Z_i} = 0 \quad \dots (34)$$

حيث إن $\frac{\partial V}{\partial X_i} = \frac{\partial V}{\partial y_i} = \frac{\partial V}{\partial Z_i}$ وكذلك :

$$\frac{dT}{dx_i} = \frac{\partial T}{\partial y_i} + \frac{\partial T}{\partial Z_i} = 0$$

وهذه المعادلة تدعى بمعادلات لاكرانج في الحركة .

مثال (٥) :

اكتب معادلات نيوتن لحركة جسيم منفرد كتلته m واقع في مجال
الجذب الأرضي المعروف $V = mgz$ حيث z هو الارتفاع و g تمثل ثابت
العجلة الأرضية ثم استخدم معادلات لاكرانج في الحركة لإثبات معادلات
نيوتن التي نحصل عليها في هذا المجال .

الحل :

$$F_x = m \ddot{x} = - \frac{\partial V}{\partial X} = - \frac{\partial (mgz)}{\partial x} = 0$$

$$F_y = m \ddot{y} = - \frac{\partial V}{\partial y} = - \frac{\partial (mgz)}{\partial y} = 0$$

$$F_x = m \ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z} = -\frac{\partial (mgz)}{\partial z} = mg$$

ومن هذا يتضح أن القوة والتعجيل الوحيد هما اللذان يقعان في اتجاه z كما متوقع . والآن نكتب دالة لاجرنج كالتالي :

$$L = T - V = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - mgz$$

ونطبق معادلات لاجرنج في الحركة (واحدة بعد الأخرى) وكما يلي :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt} (m \dot{x}) - 0 = 0$$

ومنها نحصل على :

$$m \ddot{x} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial L}{\partial y} = \frac{d}{dt} (m \dot{y}) - 0 = 0$$

$$m \ddot{y} = 0 \quad \text{عندئذ يكون :}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} - \frac{\partial L}{\partial z} = \frac{d}{dt} (m \dot{z}) - mg = 0 \quad \text{وأخيراً :}$$

$$m \ddot{z} = mg \quad \text{ومنها نحصل على :}$$

وهذه النتائج متشابهة في الحالتين .

والآن نرجع إلى معادلات لاجرنج في الحركة :

وبدلاً من كتابتها بدلالة x, y, z (أو r, θ, ϕ) يكون من المناسب استخدام إحداثيات عامة يمكنها أن تأخذ دور أي متغير للموقع في الفراغ .

هذه الإحداثيات تعرف بشكل q_i أما السرعة المقابلة لها فهي $q_i = dq_i / dt$ ولنظام يحوي N من الجسيمات يوجد $3N$ من

هذه الإحداثيات و $3N$ من السرعة المقابلة لها . وهكذا فإن معادلات لاجرانج للحركة تكتب بالصيغة التالية :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad \dots (35)$$

ولجسيم كتلته m نكتب العزم p_i بدلالة الإحداثيات العامة كالآتي :

$$P_i = m\dot{q}_i \quad \dots (36)$$

ونكتب أيضاً دالة لاجرانج L لنظام محافظ بدلالة الإحداثيات العامة بالشكل التالي :

$$L = T - V \\ = \sum_i \left[\frac{1}{2} m\dot{q}_i^2 - V(q_i) \right] \quad \dots (37)$$

وإذا أجرينا تفاضلاً لهذه المعادلة نسبة إلى السرعة \dot{q}_i فإننا سنحصل على :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i = P_i \quad \dots (38)$$

الآن نعرف دالة هاملتون H (من دون الدخول في اشتقاقات رياضية) بالشكل التالي :

$$H = \sum_i^{3N} p_i \dot{q}_i - L \quad \dots (39)$$

إن الدالة الهاملتونية لنظام محافظ تمتلك ميزة مهمة من أنها تمثل الطاقة الكلية للنظام . ولإثبات ذلك نتبع ما يلي :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \text{ — } P_i \text{ وعن } T - V \text{ — } L \text{ عن (39) معادلة في معادلة}$$

كما في معادلة (38) لنحصل على :

$$H = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - T + V \quad \dots (40)$$

وبما أن الحد $\frac{\partial L}{\partial q_i}$ يساوي $\frac{\partial T}{\partial q_i}$ (لأن V هي دالة للإحداثيات فقط

وأن تفاضلها نسبة إلى السرعة يساوي صفراً) عندئذ تصبح معادلة (40) بالشكل التالي :

$$H = \sum_i q_i \frac{\partial T}{\partial q_i} - T + V \quad \dots (41)$$

ونجد أن الحد الأول في جهة اليمين من المعادلة أعلاه يساوي $2T$ وثبت ذلك كما يلي :

نأخذ جسماً مجزأ على الحركة باتجاه واحد ونكتب الطاقة

$$T = \frac{1}{2} m q_i^2 \quad \text{الحركية له :}$$

$$\frac{\partial T}{\partial q} = m q_i \quad \text{وتفاضلها نسبة إلى السرعة } q_i \text{ يعطي :}$$

وبضرب الطرفين في q_i ينتج لنا :

$$q_i \frac{\partial T}{\partial q_i} = m q_i^2 = 2 \left(\frac{1}{2} m q_i^2 \right) = 2T$$

$$\sum_i q_i \frac{\partial T}{\partial q_i} = 2T \quad \text{وهكذا يكون :}$$

وبالتالي تصبح معادلة (41) كالآتي :

$$H = 2T - T + V = T + V \quad \dots (42)$$

وهكذا نرى أن H تكافئ الطاقة الكلية للنظام .

والآن نرجع إلى معادلة (39) لإيجاد معادلات هاملتون

في الحركة وكما يلي :

$$\frac{\partial H}{\partial P_i} = q_i \quad \dots (43)$$

(لأن L هي دالة للإحداثيات والسرعة وبذا فإن تفاضلها نسبة إلى الزخم يساوي صفراً) وكذلك نحصل على :

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = - \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad \dots (44)$$

وإذا عوضنا عن $\frac{\partial L}{\partial C_i}$ من معادلة (38) في معادلة (35) سينتج

لنا :

$$\frac{d}{dq_i} P_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad \dots (45)$$

وعندئذ نكتب معادلة (44) بالشكل التالي :

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = - \frac{d}{dt} P_i \equiv P_i \quad \dots (46)$$

$$\cdot \left(P_i = \frac{dP_i}{dt} \right)$$

وتدعى معادلتنا (43) ، (46) بمعادلات هاملتون في الحركة .

مثال (٦) :

ما هي دالة هاملتون ومعادلات الحركة لجسيم في مجال الجذب الأرضي الذي ورد في المثال السابق ؟
الحل :

نكتب دالة لاجرنج (كما هو الحال في المثال السابق) الآتي :

$$\begin{aligned} L &= T - V \\ &= \frac{1}{2} m (x^2 + y^2 + z^2) - mgz \end{aligned}$$

وإذا جعلنا $z = q_3$, $y = q_2$, $x = q_1$ فإن المعادلة أعلاه بدلالة

الإحداثيات العامة تصبح كالتالي :

$$L = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^3 \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 m g q_i$$

$$= \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^3 q_i^2 + mg q_3$$

وهذه المعادلة يمكن كتابتها بدلالة الزخوم ($P_i = mq_i$) كالآتي :

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \sum_i (mq_i)^2 + mg q_3 \\ &= \frac{1}{2m} \sum_i P_i^2 + mg q_3 \end{aligned}$$

والآن نطبق معادلات هاملتون (43) ، (46) في الحركة وكما يلي :

$$\begin{aligned} \frac{\ell H}{\ell P_i} &= \frac{\ell}{\ell P_i} \left(\frac{1}{2m} P_i^2 + mg q_3 \right) \\ &= \frac{P_i}{m} = \frac{mq_i}{m} = q_i \end{aligned}$$

وكذلك :

$$= \frac{\ell H}{2\ell q_i} = \frac{\ell}{\ell P_i} \left(\frac{1}{2m} \sum_i P_i^2 + mg q_3 \right)$$

وطالما أن $i = 1, 2, 3$ لذا يمكننا أن نكتب (انظر معادلة (46)) الآتي :

$$\begin{aligned} \frac{\ell H}{\ell q_1} &= - P_1 = 0 & \text{or } mq_1 &= 0 \quad (m \ddot{x} = 0) \\ \frac{\ell H}{\ell q_2} &= - P_2 = 0 & \text{or } mq_2 &= 0 \quad (m \ddot{y} = 0) \\ \frac{\ell H}{\ell q_3} &= - P_3 = mg & \text{or } m\ddot{q}_3 &= mg \quad (m \ddot{z} = mg) \end{aligned}$$

وهذه نفس النتائج التي حصلنا عليها سابقاً .