الباب السابع

موضوعات مختارة في ميكانيكا الكم

موضوعات مختارة في ميكانيكا الكم

في هذا الباب سنقوم بدراسة بعض الموضوعات المختارة في ميكانيكا الكم وهي :

١ ــ النص الدقيق لمبدأ عدم التحديد .

٢ ــ تحويلات فورييه وتمثيل كمية الحركة .

٣ – دالة دلتا لديراك وتطبيقها في ميكانيكا الكم .

٤ ــ رموز ديراك ومتجهات الحالة .

[١] النص الدقيق لمبدأ عدم التحديد لهزينبرج

(Exact Statement of uncertainty principle)

سوف نعطي هنا برهاناً رياضياً لمبدأ عدم التحديد لهيزنبرج الذي ينص علي إنه :

"من المستحيل القياس الدقيق لكل من الموضع وكمية الحركة لجسيم في آن واحد "

ويكتب ذلك رياضيا بالصورة $\Delta x.\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ حيث $\Delta x, \Delta p_x$ يمثلان الشك أو الخطأ أو عدم الدقة (uncertainty) في قياس كل من x,p .

يعرف النص $\Delta x.\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ بالنص الدقيق (Exact statement) لمبدأ عدم التحديد لهيزنبرج .

البرهان :

نعطي أولا التعريف الدقيق لكل من $\Delta x, \Delta p_x$ والذي يعطي بالعلاقات الآتية:

$$\Delta x = \left[< (x - < x >)^2 > \right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_} (1)$$

$$\Delta p_x = \left[< (p_x - < p_x >)^2 > \right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_} (2)$$

ولكن :

$$<(x-<x>)^2> = \int \psi^* (x-<x>)^2 \psi\, dx$$

$$= \int \psi^* x^2 \psi\, dx - 2<x> \int \psi^* x \psi\, dx + (<x>)^2 \underbrace{\int \psi^* \psi\, dx}$$

$$= <x^2> - 2(<x>)^2 + (<x>)^2 = <x^2> - (<x>)^2 = <x^2> - <x>^2$$

وبالمثل فإن : $<(p_x - <p_x>)^2> = <p_x{}^2> - <p_x>^2$

بالتعويض في (2) ، (1) :

$$\Delta x = \left[<x^2> - <x>^2\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (3)$$

$$\Delta p_x = \left[<p_x^2> - <p_x>^2\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (4)$$

وبوجه عام :

$$\Delta A = \left[<(A-<A>)^2>\right]^{\frac{1}{2}} = \left[<A^2> - <A>^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

حيث $<A^2>$ هو متوسط مربع A ، $<A>^2$ هو مربع متوسط A .

والآن : باختيار نظام للإحداثيات بحيث يكون متوسط x, P_x يساوي صفراً (للتبسيط) بمعنى أن : $<x> = 0, <P_X> = 0$

$$\therefore \Delta x = \left[<x^2>\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (5)$$

$$\Delta P_x = \left[<P_x{}^2>\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (6)$$

<u>**ولإيجاد العلاقة بين**</u> $\Delta x, \Delta p_x$:

نعتبر التكامل الأتي :

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 dx$$

ويشكل هذا التكامل دالة محددة(finite) موجبة للبارامتر α بمعنى أن

$$I(\alpha) \geq 0$$

ويمكن كتابته بالصورة :

$$I(\alpha)=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\alpha x\psi^{*}+\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\right)\left(\alpha x\psi+\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\alpha^{2}\left(\psi^{*}x^{2}\psi\right)+\alpha\left(x\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial\psi}+\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}x\psi\right)+\left(\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]dx$$

$$=A\alpha^{2}-B\alpha+C\geq 0$$

ومن شرط أن $I(\alpha)\geq 0$ وباستخدام القواعد المعروفة عن جـذور معـادلات الدرجة الثانية فإن :

$$4AC\geq B^{2} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_}(7)$$

$$A=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}x^{2}\psi\,dx=<x^{2}> \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_}(8)$$

$$B=-\int_{-\infty}^{\infty}\left(x\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial X}+\frac{\partial\psi^{*}}{\partial X}x\psi\right)dx=-\int_{-\infty}^{\infty}x\left(\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\psi\right)dx$$

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

$$=-\left[x\left(\psi*\psi\right)\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\psi dx\right]$$

الحد الأول يساوي صفراً من الشروط الحدية ، ولآن الدالة ψ معايرة .

$$\therefore B=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\psi dx=1 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_}(9)$$

$$C=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi}{\partial x}d\psi^{*}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi' d\psi^{*} \quad\Bigg|\quad d\psi^{*}=\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}dx$$

$$=\left[\psi'\psi^{*}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}d\psi'\right]=-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}d\psi'$$

[الحد الأول يساوي صفراً من الشروط الحدية]

$$\therefore C = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi'}{\partial x} dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx \qquad \left| \; d\psi' = \frac{\partial \psi'}{\partial x} dx \right.$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi \, dx = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p_x^2 \psi \, dx \qquad \left| \; p_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right.$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} < p_x^2 > \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (10)$$

بالتعويض عن A,B,C في المعادلة (7) :

$$4AC \geq B^2$$

$$4.(< x^2 >)\left(\frac{1}{\hbar^2} < p_x^2 > \right) \geq 1$$

$$\therefore < x^2 >< p_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

بأخذ الجذر التربيعي للطرفين:

$$[< x^2 >]^{\frac{1}{2}} . [< p_x^2 >]^{\frac{1}{2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

وباستخدام (5), (6) :

$$\Delta x . \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (11)$$

وهي علاقة عدم التحديد لهيزنبرج في صورتها الدقيقة وقد سبق دراستها بالصورة التقريبية :- $\Delta x . \Delta p_x \geq \hbar$ [أنظر الباب الأول] .

ملحوظة (١) :

عندما $\Delta x . \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$ فإن ذلك يناظر الحالة ذات الأقل طاقة ممكنه والتي تسمي بالحالة الأرضية للطاقة (Ground state) .

ملحوظة (٢) : تعريف آخر لكل من $\Delta x, \Delta p_x$

حيث أن $\Delta x = \left[< x^2 > - < x >^2\right]^{\frac{1}{2}}$

$$\therefore (\Delta x)^2 = < x^2 > - < x >^2$$

وإذا اعتبرنا أن متوسط مربع الخطأ = مربع الخطأ نفسه

$$< (\Delta x)^2 > = (\Delta x)^2$$

$$\therefore < (\Delta x)^2 > = < x^2 > - < x >^2 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (1)}$$

ولكن :

$$< x^2 > - < x >^2 = < x^2 > - 2 < x >^2 + < x >^2$$
$$= \int \psi^* x^2 \psi \, dx - 2 < x > \int \psi^* x \psi \, dx + < x >^2 \int \psi^* \psi \, dx$$
$$= \int \psi^* \left(x^2 - 2x < x > + < x >^2\right) \psi \, dx$$
$$= \int \psi^* (x - < x >)^2 \psi \, dx$$
$$= < (x - < x >)^2 > \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

ومن (1), (2):

$$< (\Delta x)^2 > = < (x - < x >)^2 >$$
$$\therefore (\Delta x)^2 = (x - < x >)^2$$
$$\therefore \Delta x = x - < x > \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (3)}$$

وبالمثل يمكن إثبات أن:

$$\Delta p_x = p_x - < p_x > \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (4)}$$

المعادلتان (4),(3) تعطيان تعريفان آخران للشك أو الخطأ أو عدم الدقة في قياس كل من x, p_x .

ملاحظة (٣) :

سبق أن أثبتنا أن متوسط مربع الخطأ (mean square error)

$$< (\Delta x)^2 > = < x^2 > - < x >^2 \qquad [\text{المعادلة } (1)]$$

والآن نثبت أن الخطأ المتوسط أو متوسط الخطأ (mean error) في قياس الموضع هو : $<\Delta x> = 0$

<u>الإثبات</u> : من التعريف (3) :

$$\Delta x = x - <x>$$

القيمة المتوسطه لـ Δx:

$$<\Delta x> = \int \psi^* (x - <x>) \psi \, dx = \underbrace{\int \psi^* x \psi \, dx} - \int \psi^* \underbrace{<x>} \psi \, dx$$

$$= <x> - <x> \int \psi^* \psi \, dx = <x> - <x> = 0$$

$$\therefore \; <\Delta x> = 0$$

وهو المطلوب .

<u>أمثلة محلولة :</u>

<u>مثال (١):</u> إذا كان الخطأ أو الشك في قياس x, p_x يعطي بالعلاقتين :

$$\Delta x = \left[<x^2> - <x>^2 \right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (1)$$

$$\Delta p_x = \left[<p_x^2> - <p_x>^2 \right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (2)$$

وكانت الدالة الموجية للحالة الأرضية للمتذبذب التوافقي البسيط هي :

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} . e^{-\frac{1}{2} \alpha x^2}$$

حيث α ثابت . فأثبت أن قاعدة الشك أو عدم التحديد لهيزنبرج تكون محققة لهذا الدالة.

<u>الحــل</u> : للحالة الأرضية فان قاعدة الشك تأخذ الصورة :

$$\Delta x . \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

ولإثبات أن هذه القاعدة تكون محققة للدالة المعطاه، نستخدم التعريف المعطـي لكل من $\Delta x, \Delta p_x$ ويكون المطلوب هو إيجاد $<x>,<x^2>,<p_x>,<p_x^2>$

للدالة $\psi = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$

$$<x> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi \, dx = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx$$

الدالة المكاملة دالة فردية في x فيكون تكاملها من $-\infty$ إلى $+\infty$ مساوياً للصفر :

$$\therefore <x> = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (3)$$

وبالمثل يمكن إثبات أن :

$$<p_x> = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (4)$$

وتؤول العلاقتان $(1),(2)$ إلى :-

$$\Delta x = \left[<x^2>\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (5)$$

$$\Delta p_x = \left[<p_x^2>\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (6)$$

والآن :

$$<x^2> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi \, dx = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx}_{\text{دالة زوجية}}$$

$$= 2\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \underbrace{\int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx}$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4\alpha}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= 2 \cdot \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{1}{4\alpha}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}\right] = \frac{1}{2\alpha} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (7)$$

أيضاً :

$$< p_x^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x^2 \psi \, \psi x = -\hbar^2 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}\right) dx$$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot 2(-\alpha) \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \left[e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} - \alpha x^2 e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right] dx$$

$$= 2\alpha\hbar^2 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} \left[e^{-\alpha x^2} - \alpha x^2 e^{-\alpha x^2} \right] dx \qquad \Bigg| \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= 2\alpha\hbar^2 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}} - \alpha \cdot \underbrace{\frac{1}{4\alpha}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}} \right]$$

$$= 2\alpha\hbar^2 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{4}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \right] = \frac{1}{2}\alpha\hbar^2 \qquad \text{———} (8)$$

بالتعويض من (8) ، (7) ، في (6) ، (5) نحصل على :

$$\Delta x = \left[\frac{1}{2\alpha}\right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \qquad , \qquad \Delta p_x = \left[\frac{1}{2}\alpha\hbar^2\right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\ \hbar$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\ \hbar = \sqrt{\frac{1}{4}}\,\hbar = \frac{1}{2}\hbar$$

أي أن قاعدة عدم التحديد أو الشك لهيزنبرج تكون محققة للحالة الأرضية للمتذبذب التوافقي البسيط ، وهو المطلوب .

<u>مثال (٢) :</u> إذا كان الخطأ في قياس الكميتين x, p_x يعطي بالعلاقتين :

$$\Delta x = \left[< x^2 > - < x >^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\Delta p_x = \left[< p_x^2 > - < p_x >^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

وكانت الدالة الموجية لجسيم يتحرك في مجال جهد ينحصر في المنطقة $0 \le x \le a$ هي $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ ، أحسب القيمة المضبوطة (الدقيقة) لكل من $\Delta x, \Delta p_x$ وكذلك حاصل الضرب $\Delta x \cdot \Delta p_x$ ، وأثبت أن حاصل الضرب هذا يتفق مع مبدأ عدم التحديد $\Delta x \cdot \Delta p_x \ge \frac{\hbar}{2}$ للحالة المعرفة بالعدد الكمي n = 1 .

<u>الحـل :</u>

سبق أن أوجدنا القيم المتوقعة للكميات x, p_x, x^2, p_x^2 لهذه المسألة ، وكانت النتائج كالتالي [أنظر الباب الرابع] :

$$< x >= \frac{a}{2} \qquad , \qquad < p_x > 0$$

$$< x^2 >= a^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right] \qquad , < p_x^2 >= \frac{\pi^2\hbar^2}{a^2} n^2$$

<u>للحالة المعرفة بالعدد الكمي n =1 (الحالة المثارة الأولى)</u>

<u>(First Excited state)</u>

$$<x^2>= a^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right]$$

$$< p_x^2 >= \frac{\pi^2\hbar^2}{a}$$

ويكون الخطأ في قياس الكميتين x, p_x هو :

$$\Delta x = \left[<x^2> - < x >^2\right]^{\frac{1}{2}} = \left[a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right) - \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left[a^2\left(\frac{4\pi^2 - 6}{12\pi^2}\right) - \frac{a^2}{4}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{a^2}{\underbrace{4\pi^2}}\left(\frac{4\pi^2 - 6}{3} - \pi^2\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{a}{2\pi}\left[\frac{4\pi^2}{3} - 2 - \pi^2\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{a}{2\pi}\left[\frac{\pi^2}{3} - 2\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{———} (1)$$

$$\Delta p_x = \left[<p_x^2> - <p_x>^2\right]^{\frac{1}{2}} = \left[<p_x^2>\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{\pi\hbar}{a} \qquad \text{———} (2)$$

ويكون حاصل الضرب $\Delta x . \Delta p_x$ هو :

$$\Delta x . \Delta p_x = \frac{a}{2\pi}\left[\frac{\pi^2}{3} - 2\right]^{\frac{1}{2}} . \frac{\pi\hbar}{\alpha} = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\left[\frac{\pi^2}{3} - 2\right]^{\frac{1}{2}}}$$

ولكن :

$$\left[\frac{\pi^2}{3} - 2\right]^{\frac{1}{2}} = 1.136 > 1$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x > \frac{\hbar}{2}$$

أي أن مبدأ عدم التحديد يكون محققاً في هذه الحالة .

<u>مثال (٣)</u> :

إذا كانت الدالة الموجبة المعايرة للمتذبذب التوافقي البسيط في حالتـه المثـارة الأولى (حيث n=1)

$$k = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} . (2\alpha)^{\frac{1}{2}} \text{ ، } \alpha = \frac{mw}{\hbar} \qquad \text{حيث} \qquad \psi_1 = k\, x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

أحسب الخطأ (أو الشك) في قياس كل من x, p_x ثم تحقق من صحة علاقة عدم التحديد لهيزنبرج بالصورة : $\Delta x . \Delta p_x > \frac{\hbar}{2}$ في هذا الحالة .

<u>الحـل:</u> حيث أن

$$\Delta x = \left[<x^2> - <x>^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\Delta p_x = \left[<p_x^2> - <p_x>^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

فيجب أن نحسب كل من :

$$< x >, < p_x >, < x^2 >, < p_x^2 >$$

$$(i) < x > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* x \psi_1 \, dx = k^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-\alpha x^2}} = 0 \quad \text{\_\_\_\_\_\_\_} (1)$$

حيث أن الدالة المكاملة هي دالة فردية فقيمتها من $(-\infty)$ إلى $(+\infty)$ تساوي صفراً .

$$(ii) < p_x > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_1 \, dx = \frac{\hbar}{i} k^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} \left(1 - \alpha x^2\right) dx$$

$$= \frac{\hbar}{i} k^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx - \alpha \int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-\alpha x^2} dx \right] = 0 \quad \text{\_\_\_\_} (2)$$

حيث أن الدالتين المكاملتين هما دالتان فرديتان .

$$(iii) < x^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* x^2 \psi_1 \, dx = k^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx}_{\text{دالة زوجية}} = 2k^2 \underbrace{\int_{0}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx}$$

$$= 2k^2 \left[\frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}} \right] = 2k^2 \left[\frac{3}{8\alpha^2} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \qquad \left| \int_0^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}} \right.$$

$$= 2 \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot (2\alpha) \cdot \frac{3}{8\alpha^2} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \qquad \left| k = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} (2\alpha)^{\frac{1}{2}} \right.$$

$$= \frac{3}{2} \left(\frac{1}{\alpha} \right) \quad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (3)$$

$$(iv) < p_x^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* (-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}) \psi_1 \, dx$$

$$= -\hbar^2 k^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \frac{d^2}{dx^2} \left(x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right) dx$$

$$= \frac{3}{2} \alpha \hbar^2 \quad \text{\_\_\_\_\_\_\_} (4)$$

$$\therefore \Delta x = \left[< x^2 > - < x >^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \left[< x^2 > \right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{1}{\alpha}\right)} \qquad \_\_\_\_(5)$$

$$\Delta p_x = \left[< p_x^2 > - < p_x >^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \left[< p_x^2 > \right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{3}{2}\alpha \hbar^2} = \sqrt{\frac{3}{2}\alpha}\ \hbar \ \_\_\_(6)$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x = \sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{1}{\alpha}\right)} \cdot \sqrt{\frac{3\alpha}{2}}\ \hbar = \frac{3}{2}\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

أي أن مبدأ عدم التحديد لهيزنبرج بالصورة $\Delta x \cdot \Delta p_x > \frac{\hbar}{2}$ يتحقق للحالة المثارة الأولى للمتذبذب التوافقي البسيط . وهو المطلوب .

<u>مسألة :</u> أحسب $< p_x^2 >$ في المثال (3) بالتفصيل :

$$< p_x^2 > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_1 dx = -\hbar^2 k^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \frac{d^2}{dx^2} \left(x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right) dx$$

$$= -\hbar^2 k^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \frac{d}{dx} \left[-\alpha x^2 e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} + e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right] dx$$

$$= -\hbar^2 k^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \left[-\alpha \left(-\alpha x^3 e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} + 2x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right) - \alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right] dx$$

$$= \hbar^2 k^2 \alpha \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \left[e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \left(-\alpha x^2 + 2 \right) + e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right] dx$$

$$= \hbar^2 k^2 \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \left[x^2 e^{-\alpha x^2} \left(-\alpha x^2 + 2 \right) + x^2 e^{-\alpha x^2} \right] dx$$

$$= \hbar^2 k^2 \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\alpha x^4 e^{-\alpha x^2} + 3x^2 e^{-\alpha x^2} \right] dx$$

$$= 2\hbar^2 k^2 \alpha \int_{0}^{\infty} \left[-\alpha x^4 e^{-\alpha x^2} + 3x^2 e^{-\alpha x^2} \right] dx$$

$$= 2\hbar^2 k^2 \alpha \left[-\alpha \cdot \frac{3}{8\alpha^2} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} + 3 \cdot \frac{1}{4\alpha} \cdot \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$$

حيث :

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4\alpha}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\int_0^\infty x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3}{8\alpha^2}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$< p_x^2 >= 2\hbar^2 \cdot \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (2\alpha)\cdot \alpha \cdot \left[-\frac{3}{8\alpha}+\frac{3}{4\alpha}\right]\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= 4\alpha\hbar^2\left[\frac{3}{8}\right] = \frac{3}{2}\alpha\,\hbar^2$$

وهي العلاقة رقم (4) .

مثال (٤) : إذا كان مؤثر هاملتون لنظام كمي هو $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2}+x^2$

(أ) أثبت أن الدالة $\psi(x) = Ae^{-\frac{1}{2}x^2}$ التي تميز الحالة الأرضية للنظام هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{H}$ ، وأوجد القيمة الذاتية المناظرة .

(ب) عاير الدالة ψ ،ومن ذلك أوجد ثابت المعايرة A .

(ج) أوجد القيمة المتوقعة (أو المتوسطة) لكل من x, p_x .

(د) هل يكون مبدأ عدم التحديد لهيزنبرج محققاً لهذا النظام أم لا .

الحـل :

(أ) نحقق معادلة القيمة الذاتية بالصورة $\hat{H}\psi = \lambda\psi$

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{d^2}{dx^2}+x^2\right)\left(Ae^{-\frac{1}{2}x^2}\right)$$

$$= -\frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{-\frac{1}{2}x^2}\right)+x^2Ae^{-\frac{1}{2}x^2} \qquad \_\_\_(1)$$

ولكن :

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{-\frac{1}{2}x^2}\right)=A\frac{d}{dx}\left[e^{-\frac{1}{2}x^2}\left(-\frac{1}{2}\right)(2x)\right]$$

$$=-A\frac{d}{dx}\left[xe^{-\frac{1}{2}x^2}\right]=-A\left[x\cdot e^{-\frac{1}{2}x^2}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)(2x)+e^{-\frac{1}{2}x^2}\right]$$

$$=-Ae^{-\frac{x^2}{2}}\left(1-x^2\right)$$

بالتعويض في (1) :

$$\hat{H}\psi=Ae^{-\frac{x^2}{2}}\left(1-x^2\right)+x^2Ae^{-\frac{x^2}{2}}=Ae^{-\frac{x^2}{2}}=\psi=1\cdot\psi=\lambda\psi$$

حيث $\lambda=1$ ، وهذا يعني أن الدالة $\psi=Ae^{-\frac{x^2}{2}}$ هي دالة ذاتية لمؤثر هاملتون بقيمة ذاتية مناظرة تساوي 1 .

(ب) لمعايرة الدالة ψ :

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,dx=A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}dx=2A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}dx=2A^2\cdot\left[\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\right]$$

حيث $\int_0^{\infty}e^{-x^2}dx=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$

$$\therefore A^2\frac{1}{\sqrt{\pi}}\qquad\therefore A=\left(\frac{1}{\pi}\right)\frac{1}{4}$$

وتصبح الدالة المعايرة :

$$\psi=\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-x^2}$$

(ج) لإيجاد $<x>,<p_x>$:

$$<x>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*x\psi\,dx=A^2\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-x^2}dx$$

والدالة المكاملة دالة فردية فيكون تكاملها مساوياً للصفر :

$$<x>=0$$

$$< p_x > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx = A^2 \left(\frac{\hbar}{i}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} \frac{d}{dx}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}\right) dx$$

$$= A^2 \left(\frac{\hbar}{i}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)(2x) \right] dx = -A^2 \left(\frac{\hbar}{i}\right) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2} dx}_{\text{دالة فردية}} = 0$$

(د) للتحقق من صحة علاقة هيزنبرج للحالة الأرضية الموصوفة بالدالة المعطاه ، يجب أن نحقق العلاقة $\Delta x \cdot p_x = \frac{\hbar}{2}$

حيث :

$$\Delta x = \left[< x^2 > \right]^{\frac{1}{2}} \quad , \quad \Delta p_x = \left[< p_x^2 > \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore < x^2 > = \int \psi^* x^2 \psi \, dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = 2A^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx$$

$$= 2A^2 \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{4}\right) = A^2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right) \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{1}{2}$$

أيضاً :

$$< \hat{p}_x^2 > = \int \psi^* \hat{p}_x^2 \psi \, dx = A^2 \left(-\hbar^2\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot \frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}\right) dx$$

ولكن :

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}\right) = \frac{d}{dx}\left[e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)(2x) \right] = -\frac{d}{dx}\left[x e^{-\frac{x^2}{2}} \right]$$

$$= -\left[x \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)(2x) + e^{-\frac{x^2}{2}} \right] = x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} - e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$\therefore < p_x^2 > = -\hbar^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} - e^{-\frac{x^2}{2}} \right] dx$$

$$= -\hbar^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left[x^2 e^{-x^2} - e^{-x^2} \right] dx$$

$$= -\hbar^2 A^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \quad \right] dx$$

$$= -2\hbar^2 A^2 \left[\int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx - \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \quad \right] = -2\hbar^2 A^2 \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right]$$

$$= -2\hbar^2 A^2 \left[-\frac{\sqrt{\pi}}{4} \right] = \frac{1}{2}\hbar^2 \sqrt{\pi} \cdot A^2 = \frac{1}{2}\hbar^2 \cdot \sqrt{\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2}\hbar^2$$

$$\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x = \left[< x^2 > \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[< p_x^2 > \right]^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{1}{2}\hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{4}\hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\hbar$$

أي أن الدالة المعطاه تحقق معادلة هيزنبرج لعدم التحديد (أو الشك) .

وهو المطلوب .

[٢] تحويل فورييه وتمثيل كمية الحركة:

Fourier Transform and Momentum Representation

(١) تعريف تحويل فورييه :

يعرف تحويل فورييه لأي دالة جبرية $\psi(x)$ بالعلاقة :

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\alpha(k)\psi(k)dk \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(1)}$$

حيث المعاملات $a(k)$ تعرف بمركبات فورييه للدالة $\psi(x)$ ، أو بدالة السعة Amplitude function

وتعطي بالعلاقة :

$$a(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\psi^{*}(k)dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(2)}$$

وبإعتبار الدالة $\psi(k)$ لها الصورة :

$$\psi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

والتي تمثل دالة موجبة لجسيم حر يتحرك في بعد واحد (x) وتصاحبه حزمة موجية عددها الموجي k

$$\psi^{*}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}$$

$$\therefore a(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\infty}^{\infty}\psi(x)e^{ikx}dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(3)}$$

أيضاً :العلاقة (1) تصبح :

$$\psi(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\infty}^{\infty}\alpha(k)e^{ikx}dk \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(4)}$$

وبالتعويض من (3) في (4) :

$$\psi(x)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)\int_{\infty}^{\infty}\left[\int_{\infty}^{\infty}\psi(x')e^{-ikx'}dx'\right]e^{ikx}dk$$

حيث استبدلنا المتغير x بالمتغير x' في علاقة $a(k)$.

$$\psi(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int\psi(x')\,e^{ik(x-x')}dx'dk \qquad (5)$$

التكامل (5) يعرف بتكامل فورييه (Fourier Integral)

وباستخدام تعريف دالة دلتا لديراك (Dirac delta Function) [أنظر البند القادم في هذا الباب] :

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\delta(x-x')dx' \qquad (6)$$

بمقارنة $(6),(5)$ نجد أن :

$$\delta(x-x')=\frac{1}{2\pi}\int_{\infty}^{\infty}e^{ik(x-x')}dk \qquad (7)$$

وبأخذ $x-x'=a$:

$$\delta(a)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ika}dk \qquad (8)$$

أمثلة محلولة :

مثال (١) : أثبت علاقة بارسيفال (Parseval's Formula) بين $|a(k)|^2$, $|\psi(x)|^2$ بالصورة :

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}|a(k)|^2\,dk$$

الحل: حيث أن :

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int a(k)e^{ikx}dk$$

$$\because \psi^*(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int a^*(k)e^{-ikx}dk$$

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

$$= \int \left[\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int a^*(k) e^{-ikx} dk \right\} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int a(k') e^{ik'x} dk' \right\} \right] dk$$

$$= \int a^*(k) dk \cdot \int a(k') dk' \cdot \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int e^{i(k'-k)x} dx}$$

$$= \int a^*(k) dk \cdot \int a(k') dk' \cdot \underbrace{\delta(k'-k)}$$

ولكن [من تعريف دالتا لديراك] :

$$a(k) = \int a(k') \delta(k'-k) dk'$$

$$\int_{\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int a^*(k) dk \cdot a(k) = \int |a(k)|^2 dk$$

مثال (٢): أحسب دالة السعة (أو مركبات فورييه)a(k) لدالة جاوس (Gaussian Function) التي صورتها :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma \pi^{\frac{1}{2}}}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

حيث σ تمثل أتساع (width) الحزمة الموجبة التي تمثلها هذا الدالة

الحل : دالة السعة أو مركبات فورييه للدالة $\psi(x)$ هي:

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$

بالتعويض عن $\psi(x)$ المعطاه :

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\sigma \pi^{\frac{1}{2}}}} e^{-\frac{x2}{2\sigma^2}} e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma \pi^{\frac{1}{2}}}} \int_{\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x^2 + 2ik\sigma^2 x)}{2\sigma^2}} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma\pi^{\frac{1}{2}}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\left(x^2 - k^2\sigma^4 + 2ik\sigma^4 x + k^2\sigma^4\right)}{2\sigma^2}} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-\frac{k^2 6^2}{2}}}{\sqrt{\sigma\pi^{\frac{1}{2}}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\left(x + ik\sigma^2\right)^2}{2\sigma^2}} dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} (1)$$

ولإيجاد هذا التكامل :

نضع

$$\frac{\left(x + ik\sigma^2\right)^2}{2\sigma^2} = u^2$$

$$u = \frac{\left(x + ik6^2\right)}{\sqrt{2}\ \ \sigma} \quad \rightarrow \quad du = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma} dx$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\left(x + ik\sigma^2\right)^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2}\,\sigma \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du$$

ولكن :

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x + ik\sigma)^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2} \cdot \sigma\left(\sqrt{\pi}\right) = \sigma\sqrt{2\pi}$$

وتصبح (1) :

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}}}{\sqrt{\sigma \cdot \pi^{\frac{1}{2}}}} \left[\sigma\sqrt{2\pi}\right] = \frac{\sigma}{\sqrt{\sigma\,\pi^{\frac{1}{2}}}} e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}} = \sqrt{\frac{\sigma}{\pi^{\frac{1}{2}}}}\ e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}}$$

وهو المطلوب .

(٢) تمثيل كمية الحركة **(Momentum representation)**

الدالة الموجية لجسيم حر هي : $\psi = Ae^{ikx}$ حيث k العدد الموجي الذي يـرتبط بكمية الحركة p بعلاقة دي برولي :

$$k = \frac{p}{\hbar n} \leftarrow p = k\hbar$$

وبالتحويل من العدد الموجي k إلى كمية الحركةp :

$$\therefore \psi(x) \rightarrow \psi(p) = Ae^{\frac{ip}{\hbar}x} = Ae^{i\eta p} \qquad \Bigg| \; \frac{x}{\hbar} = \eta$$

تعرف الصورة Ae^{ikx} بصورة لدالة الموجية في تمثيل الإحداثيات .

بينما تعرف الصورة $Ae^{i\eta p}$ بصورة الدالة الموجية في تمثيل كمية الحركة.

ملحوظة : دالة ديراك في تمثيل الإحداثيات :

في بعد واحد :

$$\delta(x' - x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\psi^*(x)dk$$

في ثلاثة أبعاد:

$$\delta(\vec{r}' - \vec{r}) = \iiint \psi(\vec{r}')\psi^*(\vec{r})d^3k$$

حيث : $d^3k = dk_x dk_y dk_z$

دالة ديراك في تمثيل الحركة : في بعد واحد :

$$\delta(p' - p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p')\psi^*(p)dx$$

في ثلاثة أبعاد :

$$\delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \iiint \psi(\vec{p}')\psi^*(\vec{p})d^3r$$

حيث :

$$d^3r = dx\,dy\,dz$$

أمثلة محلولة :

مثال (١) : ــ استخدم دالة دلتا ديراك في إيجاد ثابت المعايرة للدالة

$$\psi(p) = Ae^{i\eta p}$$

حيث $\eta = \dfrac{x}{\hbar}$

الحـل :

$$\psi(p) = Ae^{i\eta p} \rightarrow \psi(p') = Ae^{i\eta p'}, \psi^*(p) = A^* e^{-i\eta p}$$

ومن تعريف دالة دلتا لديراك :

$$\int_{-\infty} \psi^*(p)\psi(p')dx = \delta(p'-p) \qquad \text{(1)}$$

$$\therefore AA^*\hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\eta(p'-p)} d\eta$$

$$= |A|^2 \hbar \cdot 2\pi \left[\frac{1}{2\pi} \int e^{i\eta(p'-p)} d\eta\right]$$

$$\delta(p'-p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(p)\psi(p')dx$$

$$\eta = \frac{x}{\hbar} \rightarrow x = \hbar\eta,\ dx = \hbar\, d\eta$$

$$= |A|^2 \cdot 2\pi\hbar[\delta(p'-p)] = \delta(p'-p)$$ (من (1))

$$\therefore |A|^2 . 2\pi\hbar = 1 \qquad \rightarrow \qquad |A|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$$

$$\therefore A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

وتصبح الدالة الموجية المعايرة في تمثيل كمية الحركة بالصورة :

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \qquad \text{(I)}$$

ملحوظة : في الثلاثة أبعاد فإن (I) تأخذ الصورة الآتية .

$$\psi(\vec{p})=\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^{3}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_y y+p_z z)}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

وهي الصورة العامة للدالة الموجبة في تمثيل كمية الحركة .

مثال (٢) :

إذا كانت ذرة الهيدروجين في أقل مستويات طاقاتها (المستوي الأرضي)

تتميز بالدالة الموجية $\psi(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$ حيث a_0 ثابت

وذلك في تمثيل الإحداثيات ، أحسب دالة السعه (أو معاملات فوريه) $a(\vec{p})$

في تمثيل كمية الحركة .

الحـل :

معاملات فوريه في تمثيل كمية الحركه هي :

$$a(\vec{p})=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(\vec{r})\psi^{*}(\vec{p})d^{3}r \qquad \text{(1)}$$

حيث $\psi^{*}(\vec{p})$ هي مرافق الدالة الموجبة $\psi(\vec{p})$ في تمثيل كمية الحركة

$$\therefore \psi^{*}(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})}$$ (مثال (1))

وحيث : $d^{3}r=r^{2}dr\sin\theta\, d\theta\, d\phi$

بالتعويض في (1) :

$$a(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\iiint e^{-r/a_0}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})}r^{2}dr\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\int_{0}^{\infty}e^{-r/a_0}\, r^{2}dr\cdot\int_{0}^{\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta\, d\theta\cdot\int_{0}^{2\pi}d\phi$$

ولكن :

$$\int_0^{\pi} e^{-\frac{i}{\hbar} pr\cos\theta} \sin\theta\, d\theta = \int_0^{\pi} e^{-ikr\cos\theta} \sin\theta\, d\theta = 2\frac{\sin kr}{kr} = \frac{2}{pr/\hbar}\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

$$\therefore a(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \frac{4\pi\hbar}{p} \int_0^{\infty} e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \cdot r dr$$

ولإيجاد هذا التكامل :

$$\int_0^{\infty} e^{-r/a_0} \cdot \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) r dr = \mathrm{Im}\left[\int_0^{\infty} e^{-r/a_0} \cdot e^{ipr/\hbar} \cdot r dr\right] = \mathrm{Im}\left[\int_0^{\infty} r \cdot e^{-r\left(\frac{1}{a_0} - \frac{ip}{\hbar}\right)} dr\right]$$

$$= \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} - \frac{ip}{\hbar}\right)^2}\right]$$

$$\int_0^{\infty} r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$A + iB = C$$

$$\mathrm{Im}\, C = B$$

$$= \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\frac{1}{a_0^2} - \frac{2ip}{a_0\hbar} - \frac{p^2}{\hbar^2}}\right] = \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right) - \frac{2ip}{a_0\hbar}}\right]$$

بالضرب بسطاً ومقاماً في مرافق المقام :

$$= \mathrm{Im}\left[\frac{\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right) + \frac{2ip}{a_0\hbar}}{\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{4p^2}{a_0^2\hbar^2}}\right]$$

$$= \operatorname{Im}\left[\frac{\left(\frac{1}{a_0^2}-\frac{p^2}{\hbar^2}\right)+\frac{2ip}{a_0\hbar}}{\left(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2}\right]=\frac{\frac{2p}{a_0\hbar}}{\left(\frac{1}{a_o^2}+\frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2}=\frac{2pa_0^3\hbar^3}{\left(\hbar^2+p^2a_0^2\right)^2}$$

ويصبح $\alpha\ (\bar{p})$ بالصورة :

$$a(\bar{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi a_o^2}}\cdot\frac{4\pi\hbar}{p}\cdot\frac{2pa_0^3k^3}{\left(\hbar^2+p^2a_o^2\right)^2}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{\hbar^4}{\left(\hbar^2+p^2a_0^2\right)^2}$$

وهو المطلوب .

مثال (٣) : أوجد مفكوك فورييه للدالة الموجية الاختيارية $\psi(\bar{r})$ بدلالة الدوال الذاتية لمؤثر كمية الحركة والتي صورتها :

$$\psi(\bar{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r})}$$

أحسب أيضا معاملات (أو مركبات) فورييه $a(\bar{p})$ والتي تمثل الدوال الموجية المناظرة للدالة $\psi(\bar{r})$ في تمثيل كمية الحركة :

الحل :

حيث أن :

$$\psi(\bar{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r})}$$

فإن مفكوك فورييه لأي داله موجية اختيارية $\psi(\bar{r})$ بدلالة تلك الدوال هو :

$$\psi(\bar{r})=\int_{-\infty}^{\infty}\alpha(\bar{p})\psi(\bar{p})d^3p$$

حيث : $d^3p=dp_x dp_y dp_z$ هو عنصر الحجم في فراغ كمية الحركة .

$$\therefore\ \psi(\bar{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\alpha(\bar{p})e^{\frac{i}{\hbar}\bar{p}\cdot\bar{r}}d^3p \qquad \text{———} \quad (1)$$

وتعطي المعاملات $a(\vec{p})$ في مفكوك فورييه (1) بالعلاقة :

$$a(\vec{p})=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(\vec{r})\psi^{*}(\vec{p})d^{3}r$$

حيث : $d^{3}r=dx\,dy\,dz$ هو عنصر الحجم في فراغ الإحداثيات .

$$\therefore a(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})}d^{3}r \qquad \text{———} \quad (2)$$

المعاملات $\alpha(\vec{p})$ والتي تمثل دالة في $\vec{p}$ يمكن اعتبارها الدالة الموجية في تمثيل كمية الحركة .

كما تعطي المعادلتين(2) ، (1) العلاقة بين الدوال الموجية في تمثيلي الإحداثيات وكمية الحركة .

<u>مثال (٤)</u> :

إذا كانت $\psi(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$ هي الدالة الموجية في تمثيل كمية الحركة

، وكانت الدالة الموجية المناظرة في تمثيل الإحداثيات هي :

$$\psi(\vec{r})=\int\alpha(\vec{p})\psi(\vec{p})d^{3}p$$

حيث :

$$\alpha(\vec{p})=Ne^{-\frac{\alpha}{\hbar}|\vec{p}|}$$

<u>المطلوب</u> : (١) معايرة $\alpha(\vec{p})$ لإيجاد ثابت المعايرة N بالصورة :

$$N=\sqrt{\frac{\alpha 3}{\pi\hbar^{3}}}$$

(٢) إيجاد الدالة الموجيه في تمثيل الاحداثيات بالصورة .

$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{\pi}(2\alpha)^{3/2}\frac{\alpha}{(r^{2}+\alpha^{2})^{2}}$$

الحــل :

أولاً : معايرة $\alpha(\vec{p})$ لإيجاد ثابت المعايرة N :

حيث أن :
$$\alpha(\vec{p}) = Ne^{-\frac{\alpha}{\hbar}|\vec{p}|}$$

فبتطبيق شرط المعايرة :
$$1 = \int a(\vec{p})a^*(\vec{p})d^3p$$

وباستخدام الإحداثيات القطبية الكروية :

$$d^3p = p^2 dp \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$\therefore 1 = \iiint |a(\vec{p})|^2 \cdot p^2 dp \sin\theta \, d\theta \, d\phi \quad = \int_0^\infty |a(\vec{p})|^2 \cdot p^2 dp \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= 4\pi|N|^2 \int_0^\infty p^2 e^{-\frac{2\alpha}{\hbar}p} dp \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (1)$$

ولإيجاد التكامل في (1) :

نضع $b = \frac{2\alpha}{\hbar}$ ونستخدم التكامل القياسي :

$$\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$$

$$\therefore \int_0^\infty p^2 e^{-bp} dp = \frac{2!}{\left(\frac{2\alpha}{\hbar}\right)^3} = \frac{2}{\left(\frac{2\alpha}{\hbar}\right)^3}$$

بالتعويض في (1) :

$$1 = 4\pi . |N|^2 . \left[\frac{2}{\left(\frac{2\alpha}{\hbar}\right)^3}\right] = \frac{8\pi}{\left(\frac{2\alpha}{\hbar}\right)^3}|N|^2$$

$$\therefore |N|^2 = \frac{1}{8\pi}\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^3 = \frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3} \rightarrow N = \sqrt{\frac{\alpha 3}{\pi\hbar^3}}$$

وتصبح معاملات فورييه بالصورة :

$$a(\vec{p})=\left[\frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha}{\hbar}|\vec{p}|}$$

ثانياً :- إيجاد الدالة الموجية المناظرة في تمثيل الإحداثيات :

هذه الدالة تعطي من العلاقة

$$\psi(\vec{r})=\int a(\vec{p})\psi(\vec{p})d^3p$$

حيث الدالة $\psi(\vec{p})$ تعطي من :

$$\psi(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

وبأخذ الزاوية θ بين $\vec{p},\vec{r}$ فإن $\bar{p}\cdot\bar{r}=pr\cos\theta$

وباعتبار أن :

$$d^3p=p^2dp\sin\theta d\theta d\phi$$

$$\therefore \psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^\infty a(\vec{p})\cdot p^2dp\int_0^\pi e^{\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi}d\phi$$

وباستخدام نتيجة التكامل :

$$\int_0^\pi e^{ikr\cos\theta}\sin\theta d\theta=\frac{2}{kr}\sin kr \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

وحيث أن $\frac{p}{kr}=k$

$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^\infty \alpha(\vec{p})p^2dp\cdot\left[\frac{2}{kr}\sin kr\right](2\pi)$$

$$=\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^\infty \alpha(\vec{p})p^2dp\frac{\sin {pr}/{\hbar}}{{pr}/{\hbar}}$$

$$=\frac{4\pi\hbar}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{1}{r}\left(\frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty p.e^{-\frac{\alpha p}{\hbar}}\sin\left({pr}/{\hbar}\right)dp \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_ (3)}$$

ولإيجاد التكامل $\int_0^\infty p \cdot e^{-\frac{\alpha p}{\hbar}} \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) dp$:

كما سبق في المثال (2) الخاص بذرة الهيدروجين يمكن إيجـاد هـذا التكامـل بسهوله والنتيجة هي : $\leftarrow$ $\mathrm{I} = \frac{2\alpha r\hbar^2}{\left(\alpha^2 + r^2\right)^2}$

وبالتعويض في (3) :

$$\therefore \psi(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \frac{1}{r} \cdot \left(\frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{2\alpha r\hbar^2}{\left(\alpha^2 + r^2\right)^2} = \frac{1}{\pi}(2\alpha)^{3/2} \cdot \frac{\alpha}{\left(\alpha^2 + r^2\right)^2}$$

وهو المطلوب.

ملحوظة (١) : إيجاد التكامل في (3) :

$$\int_0^\infty e^{-\frac{\alpha p}{\hbar}} \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) p\,dp = \mathrm{Im}\left[\int_0^\infty e^{-\frac{\alpha p}{\hbar}} \cdot e^{\frac{ipr}{\hbar}} p\,dp\right]$$

$$= \mathrm{Im}\left[\int_0^\infty p e^{-p\left(\frac{\alpha}{\hbar} - \frac{ir}{\hbar}\right)} dp\right] \qquad \Bigg| \qquad \int x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$$

$$= \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\left(\frac{\alpha}{\hbar} - \frac{ir}{\hbar}\right)^2}\right] = \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} - \frac{2i\alpha r}{\hbar^2} - \frac{r^2}{\hbar^2}}\right]$$

$$= \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\frac{\alpha^2 - r^2}{\hbar^2} - \frac{2i\alpha r}{\hbar^2}}\right] = \mathrm{Im}\left[\frac{\frac{\alpha^2 - r^2}{\hbar^2} + \frac{2i\alpha r}{\hbar^2}}{\left(\frac{\alpha^2 - r^2}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{4\alpha^2 r^2}{\hbar^4}}\right]$$

$$= \mathrm{Im}\left[\frac{\frac{\alpha^2 - r^2}{\hbar^2} + \frac{2i\alpha r}{\hbar^2}}{\left(\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{r^2}{\hbar^2}\right)^2}\right] = \frac{2\frac{\alpha r}{\hbar^2}}{\left(\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{r^2}{\hbar^2}\right)^2} = \frac{2\alpha r\hbar^2}{\left(\alpha^2 + r^2\right)^2}$$

وبالتعويض في (3) :

$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{4\pi\hbar}{r}\left(\frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\frac{2\alpha r\hbar^2}{\left(\alpha^2+r^2\right)^2}\quad=\frac{1}{\pi}(2\alpha)^{3/2}\frac{\alpha}{\left(\alpha^2+r^2\right)^2}$$

وهو المطلوب .

<u>ملحوظة (٢)</u> إيجاد التكامل في (2):

بالتحول إلي المتغير x حيث $x=\cos\theta$ فعندما $\theta=0$ فإن $x=1$

وعندما $\theta=\pi$ فإن $x=-1$.

$$\therefore\int_0^{\pi}e^{ikr\cos\theta}\sin\theta\,d\theta=-\int_0^{\pi}e^{ikr\cos\theta}\,d(\cos\theta)=-\int_1^{-1}e^{ikrx}dx$$

$$=\int_{-1}^{1}e^{ikrx}dx=\left[\frac{e^{ikrx}}{ikr}\right]_{-1}^{1}$$

$$=\frac{1}{irk}\left(e^{irk}-e^{-irk}\right)=\frac{2}{kr}\left[\frac{1}{2i}\left(e^{ikr}-e^{-irk}\right)\right]=\frac{2}{kr}\sin kr$$

[٣] دالة دلتا ديراك (Dirac delta function)

تعتبر دالة دلتا لديراك من أهم الأدوات الرياضية التي تستخدم في كثير من فروع الفيزياء الرياضية وكذلك في ميكانيكا الكم .

وهي لا تشكل دالة بالمعنى المصطلح عليه ، ونذكر فيما يلي تعريفها وأهم خصائصها .

تعرف دالة ديراك بالعلاقة التكاملية الآتية :

$$\delta(x'-x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x'-x)}\,dk \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (1)}$$

حيث k يمثل العدد الموجي لموجة معادلتها e^{ikx} .

وفي ثلاثة أبعاد فإن :

$$\delta(\vec{r}'-\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\int_{-\infty}^{\infty}\int e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}'-\vec{r})}\,d^3k \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

حيث : $d^3k=dk_x\,dk_y\,dk_z$

$\vec{k}$ تمثل المتجه الموجي لموجة معادلتها $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

أيضاً فإنه يمكننا إستخدام التعريف الآتي :

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x')\,\delta(x'-x)\,dx' \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (3)}$$

وفي ثلاثة أبعاد :

$$f(\vec{r})=\int\int_{-\infty}^{\infty}\int f(\vec{r}')\,\delta(\vec{r}'-\vec{r})\,d^3r' \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (4)}$$

حيث :

$$\delta(\vec{r}'-\vec{r})=\delta(x'-x)\,\delta(y'-y)\,\delta(z'-z) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (5)}$$

وحيث : عنصر الحجم في فراغ الإحداثيات الكرتيزية

$$d^3r'=dx'\,dy'\,dz'$$

كما يمكن تعريف دالة دلتا ديراك كالآتي :

$$\left.\begin{array}{ll}\delta(x)=0 & (x\neq 0)\\ \delta(x)=\infty & (x=0)\end{array}\right\} \qquad \text{\_\_\_\_\_(6)}$$

بحيث أن :

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx=1 \qquad \text{\_\_\_\_\_(7)}$$

بمعنى أن $\delta(x)$ تساوي صفراً في كل مكان ما عدا عند $x=0$ حيث تساوي ∞ بشرط أن :

$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx=1$ [حدود التكامل تشمل الصفر أيضاً]

أيضاً من (1) :

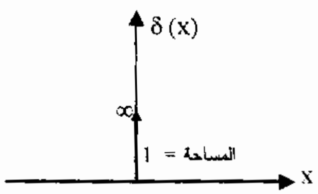
$$\delta(x-x')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x-x')}\,dk$$

فبأخذ $x'=0$:

$$\therefore\ \delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ikx}\,dk$$

<u>المعنى الطبيعي لدالة دلتا</u> :

تعرف الكثافة بأنها الكتلة لوحدة الحجوم ويرمز لها $\rho_m(\vec{r})$ وهي دالة متصلة في الموضع ، ولكنها مع دالة دلتا تمثل كتلاً نقطية (point masses) حيث تعرف الكتلة النقطية بأنها كمية محدودة من الكتلة مركزه داخل نقطة مفردة في الفراغ ، ولذلك فإن الكثافة تكون لا نهائية عند تلك النقطة وصفراً في أي مكان آخر



من (6) يمكن تمثيل دالة دلتا بيانياً كما في الرسم المقابل حيث المساحة تحت التكامل تساوي الوحدة .

<u>تعريف آخر لدالة دلتا</u> : يمكن تعريف دالة دلتا بالعلاقة :

$$\int_{x_-}^{x_+} \delta(x) f(x)\, dx = f(0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(8) \qquad (x_- < 0 < x_+)$$

ومن (3) بوضع $x = 0$ وإعتبار أن $\delta(x) = \delta(-x)$

$$\therefore\ f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x')\delta(x')\, dx'$$

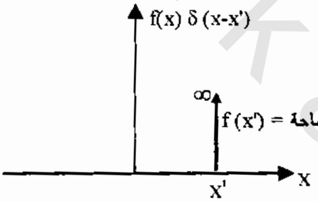
أو بوجه عام :

$$f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\, dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(9)$$

العلاقتان (9) ، (8) متكافئتان حيث $x_+ \to \infty \quad , \quad x_- \to -\infty$

الرسم المبين يوضح العلاقة :

$$f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x')\, dx$$



<u>خواص دالة دلتا ديراك</u> :

(1) $\delta(x) = \delta(-x)$

أي أن $\delta(x)$ تسلك سلوك دالة زوجية ، ومن تلك العلاقة نجد أن :

$$\boxed{\delta(x - x') = \delta(x' - x)}$$

(2) $\delta'(x) = -\delta'(-x)$

أي أن $\delta'(x)$ تسلك سلوك دالة فردية ، حيث $\delta'(x) = \dfrac{d\,\delta(x)}{dx}$

(3) $x\,\delta(x) = 0$

(4) $\delta(ax) = \dfrac{1}{a}\delta(x) \qquad , \qquad a >$

(5) $x\,\delta'(x) = -\delta(x)$

(6) $\int \delta(a-x)\,\delta(x-b)\,dx=\delta(a-b)$

(7) $\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2a}\left[\delta(x-a)+\delta\, x+a)\right] \quad , \quad a>0$

(8) $f(x)\,\delta(x-a)=f(a)\,\delta(x-a)$

ومنها : $\boxed{x\,\delta(x-x')=x'\,\delta(x-x')}$

<u>إثبات خواص دالة دلتا ديراك :</u>

<u>إثبات (1)</u> : حيث أن دالة $\delta(x)$ تحقق العلاقة :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\,dx=f(0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(1)$$

بوضع $-x=t$

$$\therefore\ x=-t \quad , \quad dx=-dt$$

$$\therefore\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(-x)\,dx=-\int_{\infty}^{-\infty} f(-t)\,\delta(t)\,dt$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty} f(-t)\,\delta(t)\,dt=f(0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(2)$$

بمقارنة (2) ، (1) نجد أن :

$$\boxed{\delta(x)=\delta(-x)}$$

<u>إثبات (2)</u> :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta'(x)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d\,\delta(x)}{dx}dx=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,d\,\delta(x)$$

بإجراء التكامل بالتجزء :

$$\therefore\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta'(x)\,dx=\left[f(x)\delta(x)\right]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,f'(x)\,dx$$

حيث الحد الأول في نتيجة التكامل = صفر (f (x) تتلاشى عند $\pm\infty$)

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta'(x)\,dx = -\int \delta(x)\,f'(x)\,dx = -f'(0) \qquad \_\_\_\_\_(1)$$

أيضاً :

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(-x)\,f(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t)\,f(-t)\,dx = -f'(0) \qquad \_\_\_\_(2)$$

بمقارنة (2) ، (1) نجد أن :

$$\delta'(x) = -\delta'(-x) \quad \rightarrow \quad \boxed{\delta'(x) = -\delta'(-x)}$$

<u>إثبات (3)</u> : نعتبر التعريف :

$$\int_{x_-}^{x_+} \delta(x)\,f(x)\,dx = f(0) \qquad (x_- < 0 < x_+)$$

$$\therefore f(x') = \int_{x_-}^{x_+} \delta(x - x')\,f(x)\,dx$$

$$\therefore \int_{x_-}^{x_+} f(x)\,x\,\delta(x)\,dx = \int_{x_-}^{x_+} f(x)\,x\,\delta(x-0)\,dx$$

$$= \int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} f(x)\,x\,\delta(x-0)\,dx \qquad \_\_\_\_\_(1)$$

وحيث أن f (x) دالة متصلة على المنطقة المتناهية في الصغر فيمكن إعتبارها ثابتة وقيمتها f (0) .

$$\therefore \int_{x_-}^{x_+} f(x)\,x\,\delta(x-0)\,dx = f(0)\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} x\,\delta(x-0)\,dx = f(0)\cdot[0] = 0 \quad \_\_(2)$$

حيث التكامل $\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} x\,\delta(x-0) = 0$ عندما $\varepsilon \rightarrow 0$

من (2) ، (1) يتضح أن :

$$\int_{x_-}^{x_+} f(x)\,x\,\delta(x)\,dx = 0$$

ومنها :

$$\boxed{x\,\delta(x) = 0}$$

حيث f (x) دالة إختيارية فتكون الدالة التي تكاملها تساوي صفراً (نظرية) .

وهو المطلوب .

إثبات (4) :

بوضع : $ax = t$

$$x = \frac{t}{a} \rightarrow dx = \frac{dt}{a}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(ax) f(x)\,dx = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) f(\frac{t}{a})\,dt = \frac{1}{a} f(0) \qquad \text{\_\_\_\_\_ (1)}$$

أيضاً :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{a}\delta(x) f(x)\,dx = \frac{1}{a} f(0) \qquad \text{\_\_\_\_\_ (2)}$$

حيث a ثابت موجب .

من (2) ، (1) فإن :

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$$

نلاحظ أن هذا الإشتقاق بإعتبار a موجبة ويمكن الإثبات بإعتبار a سالبة فنحصل على العلاقة العامة :

$$\boxed{\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x)}$$

كما نلاحظ أن العلاقة (1) يمكن الحصول عليها من هذه العلاقة العامة بوضع a = - 1

$$\therefore\ \delta(-x) = \delta(x)$$

<u>إثبات (5) :</u>

$$\int f(x)\,x\,\delta'(x)\,dx=\int f(x)\,x\frac{d\,\delta(x)}{dx}\,dx=\int x\,f(x)\,d\,\delta(x)$$

$$=\left[x\,f(x)\,\delta(x)\right]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,d\left[x\,f(x)\right]$$

$$=-\int\delta(x)\frac{d\left[x\,f(x)\right]}{dx}dx$$

$$=-\int\delta(x)\left[x\cdot f'(x)+f(x)\cdot 1\right]dx$$

$$=-\int x\,\delta(x)\,f'(x)-\int f(x)\,\delta(x)\,dx$$

$$=-\int f(x)\,\delta(x)\,dx\ \xrightarrow[\text{للطرفين}]{\text{بمقارنة}}\ \boxed{x\,\delta'(x)=-\delta(x)}$$

<u>إثبات (6) :</u>

$$\int\delta(a-x)\,\delta(x-b)\,dx=\delta(a-b)$$

بضرب الطرف الأيسر في $f(a)\,d\,a$ والتكامل :

$$\int\delta(x-b)\left[\int\delta(a-x)\,f(a)\,da\right]\,dx$$

$$=\int\delta(x-b)\,f(x)\,dx=f(b)\qquad\_\_\_\_\_\_(1)$$

أيضاً : بضرب الطرف الأيمن في $f(a)da$ والتكامل :

$$\therefore\ \int\delta(a-b)\,f(a)\,da=f(b)\qquad\_\_\_\_\_(2)$$

من (2) ، (1) نجد أن :

$$\boxed{\int\delta(a-x)\,\delta(x-b)\,dx=\delta(a-b)}$$

وهو المطلوب .

<u>إثبات (7)</u> : نعتبر التكامل :

$$\mathrm{I}=\int_{x_-}^{x_+}f(x)\,\delta(x^2-a^2)\,dx$$

وحيث أن $x^2-a^2=(x+a)\,(x-a)$ فإن تلك الكمية تؤول إلى الصفر عندما $x=-a\;,\;\;x=+a$ ويصبح لدينا دالتان من دوال دلتا ، فإعتبار مدى التكامل يحتوي على الصفر بين $x_-<-a\;,\;x_+>+a$

فإن التكامل يصبح :

$$\mathrm{I}=\int_{-a-\varepsilon}^{-a+\varepsilon} f(x)\delta(x^2-a^2)dx+\int_{+a-\varepsilon}^{+a+\varepsilon} f(x)\delta(x^2-a^2)dx \quad \_\_\_\_(1)$$

والذي يتحقق لأي قيمة $0<\varepsilon<a$

ولما كانت (x^2-a^2) بالقرب من الصفر تساوي تقريباً :

$$(x^2-a^2)=(x+a)(x-a)=\begin{cases}(x+a)(-2a) & (x\to -a)\\ (x-a)\,(2a) & (x\to +a)\end{cases}$$

ويؤول التكامل (1) إلى :

$$\mathrm{I}=\int_{-a-\varepsilon}^{-a+\varepsilon} f(x)\delta[-2a(x+a)]dx+\int_{+a-\varepsilon}^{+a+\varepsilon} f(x)\delta[2a(x-a)]\,dx \_\_(2)$$

وبإستخدام الخاصية $\delta(ax)=\dfrac{1}{|a|}\delta(x)$ ، وإعتبار أن $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)dx=1$

[حدود التكامل تشمل الصفر أيضاً] .

يصبح التكامل (2) بالصورة :

$$\therefore \int_{x_-}^{x_+} f(x)\delta(x^2-a^2)dx=\frac{1}{|-2a|}f(-a)+\frac{1}{|2a|}\,f(+a)$$

$$=\frac{1}{2a}[f(-a)+f(+a)] \qquad \_\_\_\_(3)$$

وبإعتبار الكمية :

$$\frac{1}{2a}[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$$

وبالضرب في $f(x)$ والتكامل على x من x_- إلى x_+ :

$$\therefore \frac{1}{2a}\int_{x_-}^{x_+} f(x)\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]dx$$

$$=\frac{1}{2a}\left\{\int_{x_-}^{x_+} f(x)\delta(x-a)\,dx+\int_{x_-}^{x_+} f(x)\delta(x+a)\,dx\right\}$$

$$=\frac{1}{2a}\left\{\quad f(a)+f(-a)\right\} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(4)}$$

من (4) ، (3) تتحقق الخاصية :

$$\boxed{\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2a}\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]}$$

وهو المطلوب .

مشتقة الدالة $\delta(x)$:

يمكن إثبات العلاقة الآتية المشتملة على مشتقة دالة ديراك $\delta'(x)=\dfrac{d\delta(x)}{x}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta'(x)\,dx=-f'(0)$$

الإثبات :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta'(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d\delta(x)}{dx}dx=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,d\delta(x)$$

$$=\left[f(x)\delta(x)\right]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,d\left[f(x)\right]$$

$$=-\int\delta(x)\frac{d\,f(x)}{dx}dx=-\int\delta(x)f'(x)\,dx=-f'(0)$$

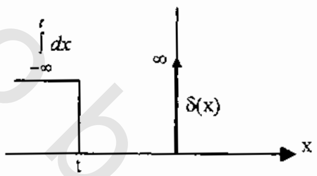
مسألة : أحسب التكامل الآتي : $\int_{-\infty}^{\infty} x^2\,\delta'(x)\,dx$

<u>مثال</u> : تعرف دالة خطوة الوحدة لهيفيسيد Heaviside unit step function $\theta(x)$

بالعلاقة :

$$\theta(x)=\begin{cases}1 & x\geq 0\\ 0 & x<0\end{cases}$$

حيث : $\theta(x)=\int_{-\infty}^{t}\delta(x)dx$



فنعتبر أن $\theta(x)$ هي المساحة تحت $\delta(x)$

في المدى من $x=-\infty$ إلى $x=t$

إذا كانت $t<0$ فإن مدى التكامل لا يشتمل على $x=0$ وتكون :

$$\theta(x)=0$$

وعندما تقترب t من الصفر فإن مدى التكامل يشتمل على $x=0$ وتكون :

$$\theta(x)=1$$

<u>المطلوب</u> : إثبات أن $\boxed{\theta'(x)=\delta(x)}$ حيث $\theta'(x)=\dfrac{d\theta(x)}{dx}$

<u>الإثبات</u> :

تحقق الدالة $\delta(x)$ العلاقة :

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x)dx=f(0)$$

بالتعويض عن $\dfrac{d\theta(x)}{dx}$ بدلاً من $\delta(x)$ وإجراء التكامل بالتجزئ في مدى العددين الموجبين a , b نحصل على :

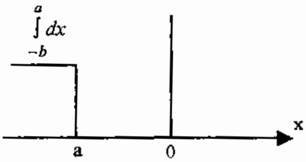
$$\int_{-b}^{a}f(x)\frac{d\theta(x)}{dx}dx=\int_{-b}^{a}f(x)d\theta(x)$$

$$=\left[f(x)\theta(x)\right]_{-b}^{a}-\int_{-b}^{a}f'(x)\theta(x)dx$$

$$=\left[f(a)-0\right]-\left[\int_{-b}^{0}f'(x)\underbrace{\theta(x)}_{\text{صفر}}dx+\int_{0}^{a}f'(x)\underbrace{\theta(x)}_{1}dx\right]$$

$$=f(a)-\int_{0}^{a}f'(x)dx=f(a)-\left[f(a)-f(0)\right]=f(0)\_\_(1)$$

أيضاً بأخذ a , b في المالا نهاية نجد أن :



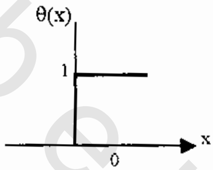
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d\theta(x)}{dx}dx = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx$$

$\theta(x) = 0 \rightarrow (a < 0)$

$\theta(x) = 1 \rightarrow (a \rightarrow 0)$

بمقارنة الطرفين نجد أن :

$$\therefore \frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x) \rightarrow \theta'(x) = \delta(x)$$



وهذا يعني أن دالة دلتا ديراك تساوي مشتقة دالة هڤيسيد .

وهو المطلوب .

<u>الفرق بين دالة دلتا ديراك ودالة دلتا لكرونيكر</u> :

تعتبر دالة دلتا لديراك هي تعميم لدلتا كرونيكر في حالة المتغيرات المتصلة ، حيث تعرف دلتا كرونيكر δ_{ij} للمتغيرات المنفصلة i , j بالعلاقة :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$$

وبصورة أخرى يمكن تعريف δ_{ij} بالعلاقة :

$$f(j) = \sum_{i=j}^{\infty} \delta_{ij} f(i) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(1)}$$

حيث i , j تأخذ القيم المنفصلة ...... , 3 , 2 , 1 .

أما دالة دلتا لديراك فتمثل بخاصية التعويض (أو الإستبدال) التالية :

$$f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x')dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(2)}$$

للدالة المتصلة f(x) . كما أنها تعرف بالعلاقة :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x')dx = 1 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(3)}$$

حيث 'x تنتمي إلى مدى التكامل .

$$\delta(x-x')=0 \qquad \_\_\_\_\_(4) \quad (x \neq x')$$

التكامل في (3) يساوي صفر ما عدا x = x' وبالتالي ففي العلاقة (2) يمكن إستبدال f(x) بـ f(x') وأخذها خارج التكامل المأخوذ على المتغير x

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x')dx = f(x')\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\delta(x-x')dx}_{=1 \text{ من } (3)} = f(x')$$

وإذا وضعنا x' = 0 فإننا نحصل على :

$$f(0)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx \qquad \_\_\_\_\_(5)$$

إذا كانت f(x) دالة فردية في x فإن δ(x) تكون زوجية بمعنى أن :

$$\delta(-x)=\delta(x) \quad , \quad \delta(x-x')=\delta(x'-x)$$

__تطبيق دالة دلتا ديراك في ميكانيكا الكم :__

__مثال (١) : شرط التعامد العياري لمجموعة تامة غير متصلة بإستخدام دالة دلتا لديراك .__

إذا كانت $\{u_n(x)\}=\{u_1(x)\ ,\ u_2(x)\ ,\ \ldots\}$ هي مجموعة تامة من الدوال المتعامدة عيارياً وغير المتصلة فإن :

$$\sum_{n=1}^{\infty} u_x^*(x')u_n(x)=\delta(x-x')$$

حيث $\delta(x-x')$ هي دالة دلتا لديراك .

__الإثبات__ : نفرض أن $\Psi(x)$ دالة إختيارية ، بحيث يمكننا كتابة هذه الدالة بدلالة المجموعة التامة المعطاه بالصورة :

$$\Psi(x)=\sum_n a_n u_n(x) \qquad \_\_\_\_\_(1)$$

حيث a_n معاملات تعطي بالعلاقة :

$$a_n=\int u_n^*(x)\,\Psi(x)dx \qquad \_\_\_\_\_(2)$$

بالتعويض عن a_n من (2) في (1) :

$$\therefore \Psi(x) = \sum_n \left[\int u_n^*(x')\Psi(x')dx'\right] \; u_n(x)$$

[حيث أن متغير التكامل يمكن تغييره إلى أي متغير آخر فقد أخذنا x' بدلاً من x]

$$\therefore \Psi(x) = \int \Psi(x')\left[\sum_n u_n^*(x')u_n(x)\right] \; dx' \qquad \_\_\_\_(3)$$

وبإستخدام الخاصية الإستبدالية لدالة دلتا لديراك :

$$\Psi(x) = \int \Psi(x')\,\delta(x-x')\,dx' \qquad \_\_\_\_\_\_(4)$$

فبمقارنة (4) ، (3) نجد أن :

$$\sum_n u_n^*(x')u_n(x) = \delta(x-x') \qquad \_\_\_\_\_(5)$$

وهو المطلوب .

<u>ملحوظة</u> : مجموعة الدوال هنا غير متصلة (discrete) ، وشرط التمام هنا (Completeness condition) أي شرط أن تكون المجموعة المعطاه مجموعة تامة (complete set) هو :

$$(\Psi(x), \Psi(x)) = \sum_n |a_n|^2$$

<u>مثال (٢)</u> : <u>شرط التعامد العياري لمجموعة تامة ومتصلة من الدوال بإستخدام دالة دلتا لديراك :</u>

إذا كانت الدالة المتصلة $u_{x'}(x)$ لها الصورة : $u_{x'}(x) = \delta(x-x')$ لكل قيم x' الحقيقية ، حيث $\delta(x-x')$ هي دالة دلتا لديراك التي تتميز بالخواص الآتية :

$$\int f(x)\,\delta(x-x')dx = f(x') \qquad \_\_\_\_\_(1)$$

$$\int \delta(x-x')dx = 1 \qquad \_\_\_\_\_(2)$$

$$\int \delta(x-a)\,\delta(x-b)\,dx = \delta(a-b) \qquad \_\_\_\_\_\_(3)$$

أثبت أن :

(i) الدالة $u_{x'}(x)$ تمثل دالة ذاتية للمؤثر x بالقيمة الذاتية x' .

(ii) الدالة $u_{x'}(x)$ تشكل مجموعة تامة ومتعامدة عيارياً .

الإثبات :

أولاً : إثبات أن $u_{x'}(x)$ تمثل دالة ذاتية للمؤثر x بالقيمة الذاتية x' .

نستخدم خواص دالة دلتا ديراك المتمثلة في العلاقتين (2) ، (1) كالأتي :

$$\int x\,u_{x'}(x)\,dx = \int x\,\delta(x-x')\,dx = x' \qquad \_\_\_\_\_\_(4)$$

بإستخدام (1) ، ومن (2) نجد أن :

$$\int x\,u_{x'}(x)\,dx = x'\int \delta(x-x')\,dx$$

$$= \int x'\,\delta(x-x')\,dx = \int x'\,u_{x'}(x)\,dx \qquad \_\_\_\_\_\_(5)$$

بمقارنة طرفي (5) نجد أن :

$$x\,u_{x'}(x) = x'\,u_{x'}(x)$$

وهي معادلة قيمة ذاتية للمؤثر x بالقيمة الذاتية x' . وهو المطلوب أولاً .

ثانياً : إثبات أن الدالة $u_{x'}(x)$ تمثل مجموعة تامة ومتعامدة عيارياً .

سبق أن أثبتنا أنه إذا كانت $u_x(x)$ دالة غير متصلة فإن :

$$\int u_{x'}(x)\;u_{x''}(x)\,dx = \delta(x'-x'') \qquad \_\_\_\_\_\_(6)$$

وهو شرط التعامد العياري للدوال المتصلة $u_{x'}(x)$.

ومن خواص دالة دلتا لديراك (العلاقة (3)) حيث :

$$\int \delta(x-a)\,\delta(x-b)\,dx = \delta(a-b)$$

$$\therefore\ \int u_{x'}(x)\,u_{x''}(x)\,dx = \int \delta(x-x')\,\delta(x-x'')\,dx = \delta(x'-x'')$$

وهي المعادلة (6) مما يعني أن $u_{x'}(x)$ تمثل مجموعة متعامدة عيارياً .

ولإثبات أنها تمثل مجموعة تامة نتبع الآتي :

حيث أن شرط التمام [شرط أن تكون المجموعة المعطاه مجموعة تامة] في حالة الدوال غير المتصلة هو :

$$\left(\Psi(x) \,,\, \Psi(x) \right) = \sum_n |\, a_n \,|^2$$

$$\therefore \int \Psi^*(x)\, \Psi(x)\, dx = \sum_n |\, a_n \,|^2$$

وفي حالة الدوال المتصلة فإن هذا الشرط يصبح :

$$\int \Psi^*(x)\, \Psi(x)\, dx = \int |\, a_n(x) |^2 \, dx = \int a_n^*(x)\, a_n(x)\, dx$$

ولإثبات هذا الشرط على الدالة المعطاه :

نفرض دالة إختيارية $\Psi(x)$ بحيث أن :

$$\Psi(x) = \int a_n(x')\, u_{x'}(x)\, dx'$$

$$\therefore \int \Psi^*(x)\, \Psi(x)\, dx = \int \left[\int a_n(x')\, u_{x'}(x)\, dx' \right]^* \left[a_n(x'')\, u_{x''}(x)\, dx'' \right] dx$$

$$= \iiint a_n^*(x')\, a_n(x'')\, \delta(x - x')\, \delta(x - x'')\, dx\, dx'\, dx''$$

$$= \iint a_n^*(x')\, a_n(x'')\, \delta(x' - x'')\, dx'\, dx''$$

$$= \int a_n^*(x')\, a_n(x')\, dx'$$

حيث إستخدمنا العلاقتين :

$$\int \delta(x - x')\, \delta(x - x'')\, dx = \delta(x' - x'')$$

$$\int a_n(x'')\, \delta(x' - x'')\, dx'' = a_n(x')$$

وحيث أنه من الممكن تغيير متغير التكامل فإننا نستبدل x' بـ x في الطرف الإيمن .

$$\therefore \int \Psi^*(x)\, \Psi(x)\, dx = \int a_n^*(x)\, a_n(x)\, dx = \int |\, a_n(x) |^2\, dx$$

وهو شرط التمام في هذه الحالة ، وهو المطلوب .

[٤] رموز ديراك ومتجهات الحالة (Dirac Notations and state vectors)

مقدمة :

أدخل ديراك عام ١٩٢٨ بعض الرموز لوصف حالة نظام كمي معين، تعتمد أساساً على الصفة الاتجاهية لحالات الجسيم، وقد وصف ديراك حالة النظام الكمي بواسطة ما يعرف بمتجه الحالة (state vector) ، وهذا المتجه يكتب بالصورة : $|\psi\rangle$ وعبر عنه في صورة مصفوفة عمود :

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

ويسمى بمتجه الكيت (Ket vector) .

ويمكن كتابة الدالة $\psi(x)$ في تمثيل ديراك (أي باستخدام رموز ديراك) كالآتي :

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

والتي تمثل مركبة المتجه $|\psi\rangle$ في إتجاه $|x\rangle$ حيث $|x\rangle$ هي المتجهات الذاتية لموثر الإحداثيات (x).

أما المتجه المرافق لمتجه الكيت $|\psi\rangle$ فيرمز له بالرمز $\langle\psi|$ ، وعبر عنه في صورة مصفوفة صف :

$$\langle\psi| = [a_1^* a_2^* \ldots\ldots\ldots]$$

ويسمى بمتجه البرا (Bra vector) .

ولذلك فإن :

$$\psi^*(x) = \langle\psi|x\rangle$$

والتي تمثل مركبة المتجه $\langle\psi|$ في إتجاه $\langle x|$.

ملخص :

المتجه $|\psi\rangle$ هو متجه كيت (Ket) .

المتجه $\langle\psi|$ هو متجه برا (Bra) .

حالة أي نظام توصف بمتجه كيت $|\psi\rangle$ ، كما أن نفس الحالة يصفها المرافق أو المتجه البرا $\langle\psi|$ ، أي أنه يمكن استخدام أي من المتجهين لوصف حالة النظام .

وفيما يلي نورد بعض العلاقات الهامة في ميكانيكا الكم مكتوبة برموز ديراك :

(١) حاصل الضرب الداخلي لمتجهين :

حاصل ضرب المتجهين

$$|\psi_1\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad , \quad |\psi_2\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

هو :

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum_n a_n^* b_n$$

ويحقق حاصل الضرب هذا الخواص الآتية :

(i) $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ [التساوي فقط عند $|\psi\rangle = 0$]

(ii) $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$

(iii) $|\alpha\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$

$$\langle\alpha\psi| = \alpha^*\langle\psi|$$

(iv) $\langle\psi_1|\alpha\psi_2 + \beta\psi_3\rangle = \alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle$

$$\langle\alpha\psi_2 + \beta\psi_3|\psi_1\rangle = \alpha^*\langle\psi_2|\psi_1\rangle + \beta^*\langle\psi_3|\psi_1\rangle$$

حيث : المتجه $|\alpha\psi\rangle$ هو المتجه الناتج عن حاصل ضرب المتجه $|\psi\rangle$ في الكمية القياسية α .

والمتجه :

$$\alpha\psi_2 + \beta\psi_3 = \alpha|\psi_2\rangle + \beta|\psi_3\rangle$$

ويلاحظ أن مجموع المتجهين $|\psi_1\rangle,\ |\psi_2\rangle$ هو :

$$|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi_1 + \psi_2\rangle$$

(٢) <u>معادلة القيمة الذاتية :</u>

المعادلة $\hat{A}\psi = \lambda\psi$ تكتب باستخدام رموز ديراك بالصورة : $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$.

(٣) <u>الشرط العياري وشرط التعامد</u>

:(Normalization and orthogonal conditions)

الضرب القياس للدالتين ψ_n, ψ_m والتي كل منهما يمثلها متجه حالة

$$\int \psi_n^* \psi_m d\tau = \langle\psi_n|\psi_m\rangle$$

ويلاحظ أن : كل متجه كيت $\lambda|\psi\rangle$ يناظره متجه برا $\langle\psi|\lambda^*$.

المتجهات كيت تكون فراغ هلبرت الإتجاهي Vector Hilbert space حيث المجموعة الكاملة $\{\psi_i\}$ تشكل قاعدة (base) لهذا الفراغ ويعرف بالفراغ الاتجاهي كيت (Ket vector space) .

وبالمثل فإن متجهات برا المناظرة تكون ايضاً فراغاً إتجاهياً هو فراغ برا الاتجاهي (Bra vector space) ويكون مرافقاً للفراغ الاتجاهي كيت .

تكون مجموعة المتجهات كيت الكاملة (Complete set) $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots\ldots, |\psi_n\rangle\}$ عيارية ومتعامدة إذا كان : $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$

وهو شرط التعامد والعيارية (orthonormalization condition) .

<u>شرط العيارية :</u>

$$\int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

في صورته المعتادة ، ويمكن كتابته برموز ديراك كالآتي :

$$\int \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = 1$$

$$\therefore \; \langle \psi | \left[\int |x\rangle \langle x | dx \right] | \psi \rangle = 1$$

$$\langle \psi | 1 | \psi \rangle = 1$$

$$\therefore \boxed{\langle \psi | \psi \rangle = 1}$$

حيث استخدمنا العلاقة :

$$\int |x\rangle \langle x| dx = 1$$

وهي امتداد لعلاقة الإنغلاق (Colsure relation)

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = 1$$

[سوف نثبتها بعد ذلك] .

شرط التعامد :

$$\int \psi^*(x) \phi(x) dx = 0$$

في صورته المعتادة ، ويمكن كتابته برموز ديراك كالآتي :

$$\int \langle \psi | x \rangle \langle x | \phi \rangle dx = 0$$

$$\therefore < \psi | \left[\int |x\rangle \langle x | dx \right] | \phi \rangle = 0$$

$$\therefore \langle \psi | 1 | \phi \rangle = 0$$

$$\therefore \boxed{\langle \psi | \phi \rangle = 0}$$

(٤) شرط المؤثر الهيرميتي :

في الصورة المعتادة ، تكتب الخاصية الهيرميتية بالصورة :

$$\int \psi^* \hat{A} \phi \, d\tau = \int \phi A^* \psi^* d\tau = \int \phi (A \psi)^* d\tau$$

وباستخدام رموز ديراك :

$$\langle \psi | \hat{A} \phi \rangle = \langle A \psi | \phi \rangle$$

وحيث أن :

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$$

وهي الخاصية الهيرميتية للمؤثر $\hat{A}$:

$$\therefore \langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle^*$$

(٥) علاقة الإنغلاق (Closure relation) :

أي متجه كيت $|\psi\rangle$ يمكن التعبير عنه بالصورة :

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i|\psi_i\rangle \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_}(1)$$

حيث :

$$a_i = \langle\psi_i|\psi\rangle \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_}(2)$$

بالتعويض في (1) :

$$\therefore\ |\psi\rangle = \sum_i \langle\psi_i|\psi\rangle|\psi_i\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle = \left(\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right)|\psi\rangle$$

وبالمقارنة نجد أن :

$$\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1$$

وهي علاقة الإنغلاق (أو الأحتواء) .

(٦) مؤثر الإسقاط (Projection operator) :

يعرف مؤثر الإسقاط بالعلاقة :

$$p_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

وبأخذ المجموع للطرفين واستخدام علاقة الإنغلاق ، فإن :

$$\sum_i p_i = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1$$

أيضاً : تأثير المؤثر p_i على المتجه (الدالة) $|\psi\rangle$:

$$p_i|\psi\rangle = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\sum_j a_j|\psi_j\rangle = \sum_j a_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle$$

وحيث أن : $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$ (الخاصية التعامدية العيارية) .

$$\therefore p_i|\psi\rangle = \sum_j a_j \delta_{ij} |\psi_i\rangle = a_i |\psi_i\rangle$$

وهذا يعني أن المؤثر p_i هو مسقط المتجه $|\psi\rangle$ في اتجاه المتجه $|\psi_i\rangle$

حيث :

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle$$

(٧) القيمة المتوقعة (Expectation value) :

إن تأثير المؤثر $\hat{A}$ على المتجه الكيت من اليسار ينتج لنا متجه آخر ، ونكتب ذلك بالصورة :

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$

بينما تأثير المؤثر $\hat{A}$ على المتجه البرا من اليمين يعطي :

$$\langle\psi|\hat{A} = \langle\psi'|$$

ويمكن كتابة القيمة المتوقعة لأي مؤثر $\hat{A}$ في الحالة ψ باستخدام رموز ديراك بالصورة : ـ

$$\langle\hat{A}\rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, d\tau = \int \psi^* \psi' \, d\tau = \langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

(٨) المؤثر المحايد والمؤثر الواحدي (Identity and unitary operator):

إذا عرف المؤثر $\hat{I}$ بالعلاقة :

$$\hat{I} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

حيث $|\psi_i\rangle$ هي المتجهات الذاتية لكمية طبيعية معينة .

فإنه لأي متجه $|\psi\rangle$:

$$\therefore \hat{I}\,|\psi\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

[استخدمنا هنا علاقة الإنغلاق : $\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1$]

المؤثر $\hat{I}$ يعرف بالمؤثر المحايد (Identity operator) .

أيضاً : إذا كان $\hat{u}$ هو مؤثر واحدي (unitary operator) يحول من فراغ المتجهات $|\psi\rangle$ إلى فراغ المتجهات $|\phi\rangle$ أي أن : $|\phi\rangle = \hat{u}|\psi\rangle$ فيمكن إثبات أن : $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\phi_1|\phi_2\rangle$ كما يمكن إثبات أن : القاعدة التي تحول المؤثر $\hat{A}_\psi$ الذي يؤثر على المتجهات $|\psi\rangle$ إلى المؤثر $\hat{A}_\phi$ الذي يؤثر على المتجهات $|\phi\rangle$ هي : $\hat{A}_\phi = \hat{u}\,\hat{A}_\psi \hat{u}^+$

أمثلة محلولة :

مثال (١) : ــ إذا كان $|n\rangle, |m\rangle$ هما متجهان إختياريان للحالة ، وكان المتجه $|k\rangle$ يشكل مجموعة تامة (Complete set) ، فأثبت أن :

$$\langle n|m\rangle = \sum_k \langle n|k\rangle\langle k|m\rangle$$

الحـل :

حيث أن المتجه $|k\rangle$ يشكل مجموعة تامة فيكننا كتابة المتجهان الإختياريان $|n\rangle, |m\rangle$ بالصورة :

$$|n\rangle = \sum_k a_k |k\rangle$$

حيث : $a_k = \langle k|n\rangle$

$$|m\rangle = \sum_\ell a_\ell |\ell\rangle$$

حيث : $b_\ell = \langle \ell|m\rangle$

$$\therefore \quad \langle n| = \sum_k \langle k| a_k^* = \sum_k \langle k| \langle n|k\rangle = \sum_k \langle n|k\rangle\langle k|$$

$$|m\rangle = \sum_\ell b_\ell |\ell\rangle = \sum_\ell \langle \ell|m\rangle|\ell\rangle = \sum_\ell |\ell\rangle\langle \ell|m\rangle$$

$$\therefore \langle n|m\rangle = \sum_{k,\ell} \langle n|k\rangle\langle k|\ell\rangle\langle \ell|m\rangle = \sum_{k,\ell} \langle n|k\rangle\langle \ell|m\rangle\langle k|\ell\rangle$$

$$= \sum_{k,\ell} \langle n|k\rangle\,\langle \ell|m\rangle\cdot\delta_{k\ell} = \sum_k \langle n|k\rangle\,\langle k|m\rangle$$

وهو المطلوب .

مثال (٢) : أوجد $\sum_k |\langle n|A|k\rangle|^2$

[مجموع الكميات $|\langle n|A|k\rangle|^2$ على المجموعة التامة $|k\rangle$] ، ثم أحسب القيمة في حالة إذا كان A مؤثر واحدي .

الحل :

$$\sum_k |\langle n|A|k\rangle|^2 = \sum_k \langle n|A|k\rangle\langle n|A|k\rangle^* = \sum_k \langle n|A|k\rangle\langle k|A^+|n\rangle$$

$$= \sum_k \langle n|A \ \underline{(|k\rangle\langle k|)} \ A^+|n\rangle = \sum_k \langle n|AA^+|n\rangle$$

حيث أن $|k\rangle$ تشكل مجموعة تامة فإن : $|k\rangle\langle k|=1$

في حالة إذا كان A مؤثر واحدي ، فإن : $AA^+=1$

$$\therefore \sum_k |\langle n|A|k\rangle|^2 = \langle n|n\rangle = 1$$

مثال (٣) : أثبت الخواص الآتية لمؤثر الإسقاط p_i

$(\mathbf{i})\, p_i^2 = p_i \quad , \quad (\mathbf{ii})\, p_i p_j = p_i \ \ or = p_j$

(iii) p_i هو مؤثر هيرميتي ومحدد موجب (Positive definite) .

(iv) مبدول (Commutator) المؤثر يساوي صفراً أي أن $[p_i, p_j] = 0$.

الحل :

$$(\mathbf{i})\, p_i^2|\psi\rangle = p_i[p_i|\psi\rangle]$$

وحيث أن : $p_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

فبتطبيقها مرتين :

$$\therefore p_i^2|\psi\rangle = p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle = |\psi_i\rangle\underline{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}\langle\psi_i|\psi\rangle = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle$$

حيث : $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$

$$\therefore p_i^2|\psi\rangle = p_i|\psi\rangle$$

ومن ذلك نرى أن : $p_i^2 = p_i$

$$(\text{ii})\, p_i p_j = |\psi_i\rangle \underline{\langle\psi_i|\psi_j\rangle} \langle\psi_j| = |\psi_i\rangle\langle\psi_j| \underline{\delta_{ij}}$$

حيث : $\langle\psi_j|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$

$$\therefore p_i p_j = |\psi_i\rangle\langle\psi_j|\delta_{ij} = |\psi_j\rangle\langle\psi_i|\delta_{ji} = p_i \;\; or \;\; = p_j$$

(iii) لإثبات أن p_i مؤثر هيرميتي :

لأي متجهين كيت إختياريان $|n\rangle, |m\rangle$ فإن :

$$\langle n|p_i|m\rangle = \langle n|i\rangle\langle i|m\rangle = \langle m|i\rangle^* \; \langle i|n\rangle^* = \langle m|p_i|n\rangle^* \qquad \_\_\_\_\,(1)$$

حيث : $\langle m|p_i|n\rangle = \langle m|i\rangle\langle i|n\rangle$

من العلاقة (1) نرى أن p_i هو مؤثر هيرميتي .

أيضاً :

$$\langle n|p_i|n\rangle = \langle n|i\rangle\langle i|n\rangle = |\langle n|i\rangle|^2 \geq 0$$

أي أن p_i هو محدد موجب (Positive definite) .

(iv) حيث أن (1) ______ $p_i p_j = p_i$ أو (2) ______ $p_i p_j = p_j$

ومن خواص مؤثر الإسقاط : يقال أن المؤثر p_i أكبر من أو يساوي مؤثر إسقاط آخر p_j ، إذا كان الفراغ الذي يعرف فيه p_j محتوى في الفراغ المعرف فيه p_i ، أي أن : إذا كان $p_i \geq p_j$ وكان $p_j \geq p_i$ فإن : $p_i = p_j$.

من هذه الخاصية ومن (2) ، (1) فإن:

$$p_i \; p_j = p_j^2 = p_j \qquad \_\_\_\_\_\_\,(3)$$

أيضاً :

$$p_j \; p_i = p_i^2 = p_i \qquad \_\_\_\_\_\_\,(4)$$

ومن (4) ، (3) واعتبار أن $p_i = p_j$

$$\therefore p_i p_j = p_j p_i \qquad \therefore p_i p_j - p_j p_i = 0$$

$$\therefore [p_i, p_j] = 0$$

مثال (٤) :

أثبت أن الشرط اللازم والضروري للمؤثر $\hat{A}$ لكي يكون واحدياً (unitary) هو :

$\langle i|\hat{A}^{+}\hat{A}|i\rangle = \langle i|i\rangle$ لأي متجه حالة $|i\rangle$.

ثم أثبت أن $\hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{I}$ في أي تمثيل [باستخدام قاعدة تحويل المؤثر من فراغ أو تمثيل لآخر] .

الحل:

لإثبات الشرط اللازم (necessary condition) نفرض أن $\hat{A}$ هو مؤثر واحدي ، أي أن $\hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{I}$

$$\therefore \langle i|\hat{A}^{+}\hat{A}|i\rangle = \langle i|\hat{I}|i\rangle = \langle i|i\rangle$$

ولإثبات أن الشرط ضروري أو كاف (sufficient) فإن العلاقة المعطاه :

$$\langle i|\hat{A}^{+}\hat{A}|i\rangle = \langle i|i\rangle$$

تستلزم أن يكون : $\hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{I}$ في التمثيل الموصوف بالحالة $|i\rangle$

وإذا أثبتنا أن $\hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{I}$ في أي تمثيل ، فإن هذا معناه أن $\hat{A}$ هو مؤثر واحدي .

والآن : باستخدام قاعدة تحويل المؤثر من تمثيل إلى آخر باستخدام المؤثر الواحدي $\hat{u}$ ، أي القاعدة :

$$\hat{A}' = \hat{u}^{+}\hat{A}\hat{u}$$

$$\hat{A}'^{+} = \left(\hat{u}^{+}\hat{A}\hat{u}\right)^{+} = \hat{u}^{+}\hat{A}^{+}\hat{u}$$

$$\therefore \hat{A}'^{+}\hat{A}' = \hat{u}^{+}\hat{A}^{+}\underbrace{\hat{u}\,\hat{u}^{+}}\hat{A}\hat{u} = \hat{u}^{+}\hat{A}^{+}\hat{A}\hat{u} = \underbrace{\hat{u}\,\hat{u}^{+}}\hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{I}$$

أي أن $\hat{A}^{+}\hat{A} = \hat{I}$ في أي تحويل .   وهو المطلوب .

[اعتبرنا أن $\hat{u}^{+}\hat{u} = \hat{u}\hat{u}^{+} = 1$] .

مثال (٥) : إذا كان المؤثر الهيرميتي له مجموعة كاملة من الدوال الذاتيـــة $\{\psi_n\}$ ، فأثبت أن مؤثر الوحدة $\hat{I}$ يمكن التعبير عنه بالصورة :

$$\hat{I}=\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

الحل : علاقة التمام للدوال الذاتية $\{\psi_n\}$ للمؤثر الهيرميتي هي :

$$\sum_n \psi_n^*(\vec{r}\,')\,\psi_n(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \qquad \text{\_\_\_\_\_}(1)$$

حيث $\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$ هي دالة دلتا لديراك .

نعتبر حاصل الضرب القياسي للدالتين $\Phi\,,\Psi$ ، حيث :

$$\langle\Phi|\Psi\rangle=\int \Phi^*(\vec{r})\Psi(\vec{r})\,d\vec{r}$$

$$=\iint \Phi^*(\vec{r})\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\Psi(\vec{r}\,')\,d\vec{r}\,d\vec{r}\,' \qquad \text{\_\_\_\_\_}(2)$$

وذلك بإستخدام خاصية الإستبدال لدالة دلتا لديراك :

$$f(\vec{r})=\int f(\vec{r}\,')\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,d\vec{r}\,'$$

وبإستخدام العلاقة (1) فإن (2) تصبح :

$$\langle\Phi|\Psi\rangle=\sum_n \int \Phi^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})\,d\vec{r}\int \psi_n^*(\vec{r}\,')\Psi(\vec{r}\,')\,d\vec{r}\,'$$

$$=\sum_n \langle\Phi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\Psi\rangle \qquad \text{\_\_\_\_\_}(3)$$

وذلك بإستخدام خواص رموز البرا والكيت لديراك .

بمقارنة الطرف الأيسر والأيمن من العلاقة (3) نستنتج أن :

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \hat{I}$$

حيث $\hat{I}$ مؤثر الوحدة (Identity operator) .

وهو المطلوب .