الباب الثالث

مؤثر كمية الحركة الزاوية الكلية

Total Angular Momentum Operator

مؤثر كمية الحركة الزاوية الكلية
Total Angular Momentum Operator

<u>تعريف</u> : يعرف المؤثر الإتجاهي لكمية الحركة الزاوية الكلية بأنه مجموع مـؤثري كمية الحركة الزاوية المدارية وكمية الحركة الزاوية اللفية ، أي :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

وتحدد حالة النظام حينئذ بالمؤثر J^2, J_z ، مربع كمية الحركة الزاوية الكلية ، مركبة $\vec{J}$ في إتجاه معين (محـور z) حيـث $\vec{J} = \hat{i} J_x + \hat{j} J_y + \hat{k} J_z$

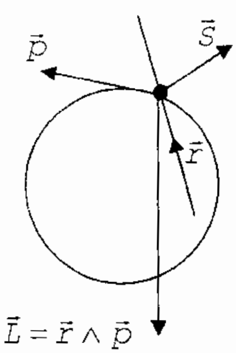
ويمكن إثبات العلاقات الآتية :

(i) $\quad [J_x, J_y] = i\hbar J_z \, , [J_y, J_z] = i\hbar J_x \, , [J_z, J_x] = i\hbar J_y$

(ii) $\quad [J^2, J_x] = [J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0$

<u>إيجاد القيم الذاتية والدوال الذاتية لمؤثر كمية الحركة الزاوية الكلية :</u>

حيث أن $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ، وحيث أن : $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ (الجزء الأول)



أيضاً نفرض أن :

العلاقة : $J^2 = j(j+1)\hbar^2$

تناظر العلاقة : $L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2$

والعلاقة : $J_z = \alpha\hbar$

تناظر العلاقة : $L_z = m\hbar$

<u>نوجد أولاً</u> : **<u>القيم الذاتية والدوال الذاتية للمركبة</u>** J_z :

$$J_z = L_z + S_z = L_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_z = m\hbar + \frac{\hbar}{2}(\pm 1) = (m \pm \frac{1}{2})\hbar$$

أيضاً نفرض الدالة الموجية :

$$\phi_s = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \text{ حيث } \Psi_{\ell,m,s} = \psi_{\ell,m}\,\phi_s$$

$$\therefore J_z\,\Psi_{\ell,m,s} = (m \pm \frac{1}{2})\hbar\,\Psi_{\ell,m,s}$$

وبضرب الطرفين في $\Psi^*_{\ell',m',s'}$ والتكامل نحصل على :

$$\int \Psi^*_{\ell',m',s'}\,J_z\,\Psi_{\ell,m,s}\,d\tau = (m \pm \frac{1}{2})\hbar \int \Psi^*_{\ell',m',s'}\Psi_{\ell,m,s}\,d\tau$$

$$\therefore (J_z)_{\ell,m,s\,;\,\ell',m',s'} = (m \pm \frac{1}{2})\,\hbar\,\delta_{\ell\ell'}\cdot\delta_{mm'}\cdot\delta_{ss'}$$

وهذا يعني أن المصفوفة المصاحبة للمؤثر J_z هي مصفوفة قطرية .

والآن : **لإيجاد القيم الذاتية والدوال للمؤثر** J^2 :

حيث أن $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ فإن :

$$J^2 = \vec{J}\cdot\vec{J} = (\vec{L}+\vec{S})\cdot(\vec{L}+\vec{S}) = (\vec{L}+\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma})\cdot(\vec{L}+\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma})$$

$$= L^2 + \frac{\hbar^2}{4}\sigma^2 + \hbar\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{L})$$

بإعتبار أن $\vec{\sigma}\cdot\vec{L} = \vec{L}\cdot\vec{\sigma}$

نفرض الدالة الموجية $\Psi_{\ell,m,s} = \psi_{\ell,m}\,\phi_s$

حيث $\psi_{\ell,m}$ هي دوال آنية لكل من L^2, L_z أي :

$$L^2\,\psi_{\ell,m} = \hbar^2\ \ell(\ell+1)\psi_{\ell,m}\ ,\ L_z\,\psi_{\ell,m} = m\,\hbar\ \psi_{\ell,m}$$

$$\therefore J^2(\psi_{\ell,m}\,\phi_s) = \phi_s\,L^2\,\psi_{\ell,m} + \psi_{\ell,m}\frac{\hbar^2}{4}\sigma^2\,\phi_s + \hbar(\vec{\sigma}\cdot\vec{L})\,\psi_{\ell,m}\,\phi_s$$

والآن : حيث أن

$$\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 1 + 1 + 1 = 3$$

$$\therefore \sigma^2 \phi_s = 3\phi_s$$

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{L} = \sigma_x L_x + \sigma_y L_y + \sigma_z L_z$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} L_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} L_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} L_z$$

$$= \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix}$$

$$\therefore J^2 \psi_{\ell,m} \phi_s = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi_{\ell,m} \phi_s + \frac{3}{4} \hbar^2 \psi_{\ell,m} \phi_s$$

$$+ \hbar \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix} \psi_{\ell,m} \phi_s$$

$$= \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) + \frac{3}{4} \right] \psi_{\ell,m} \phi_s$$

$$+ \hbar \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix} \psi_{\ell,m} \phi_s \quad \text{—(1)}$$

والآن نعتبر الحل العام الآتي :

$$\Psi_{\ell,m,s} = C_1 \psi_{\ell,m'} \phi_1 + C_2 \psi_{\ell,m''} \phi_2 = \begin{pmatrix} C_1 \psi_{\ell,m'} \\ C_2 \psi_{\ell,m''} \end{pmatrix}$$

حيث C_1 , C_2 يمثلان إحتمال أن الإلكترون ذو اللف (Spining electron) يكون له الدالة الموجية ϕ_1 , ϕ_2 على الترتيب .

وبإستخدام (1) وإعتبار أن £ هو القيمة الذاتية للمؤثر J^2 فإن :

$$£\begin{pmatrix} C_1\psi_{\ell,m'} \\ C_2\psi_{\ell,m''} \end{pmatrix} = \hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}\right]\begin{pmatrix} C_1\psi_{\ell,m'} \\ C_2\psi_{\ell,m''} \end{pmatrix}$$

$$+\hbar\begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1\psi_{\ell,m'} \\ C_2\psi_{\ell,m''} \end{pmatrix}$$

وهذا يؤدي إلى العلاقتين :

$$\left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}\right]-£\right\} C_1\psi_{\ell,m'} +$$

$$+\hbar\left\{L_z C_1\psi_{\ell,m'} + (L_x - iL_y)\ C_2\psi_{\ell,m''}\right\} = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_}(2)$$

$$\left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}\right]-£\right\} C_2\psi_{\ell,m''} +$$

$$+\hbar\left\{(L_x + iL_y)\ C_1\psi_{\ell,m'} - L_z C_2\psi_{\ell,m''}\right\} = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_}(3)$$

من (2) :

$$\therefore \left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}\right]-£\right\} C_1\psi_{\ell,m'} + \hbar^2 m' C_1\psi_{\ell,m'} +$$

$$+C_2\hbar^2\sqrt{(\ell+m'')(\ell-m''+1)}\,\psi_{\ell,m''-1} = 0$$

$$\therefore \left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}+m'\right]-£\right\} C_1\psi_{\ell,m'} +$$

$$+C_2\hbar^2\sqrt{(\ell+m'')(\ell-m''+1)}\,\psi_{\ell,m''-1} = 0 \qquad \text{\_\_\_\_}(4)$$

أيضاً من (3) فإن :

$$\left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}-m''\right]-£\right\} C_2\psi_{\ell,m'}+$$

$$+C_1\hbar^2\sqrt{(\ell-m')(\ell+m'+1)}\,\psi_{\ell,m'+1}=0 \quad \text{\_\_(5)}$$

[أستخدمنا هنا العلاقة :

$$[\ (L_x \mp iL_y)\psi_{\ell,m}=\hbar\sqrt{(\ell\pm m)(\ell\mp m+1)}\,\psi_{\ell,m\mp1}$$

والآن : لكي تتحقق العلاقتان (5) ، (4) ، فإن : $m'=m''-1$

$$\therefore \left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}+m'\right]-£\right\} C_1+C_2\hbar^2\sqrt{(\ell+m'+1)(\ell-m')}=0$$

$$،\ \left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}-m'-1\right]-£\right\} C_2+C_1\hbar^2\sqrt{(\ell-m')(\ell+m'+1)}=0$$

والحل غير الصفري لهاتين العلاقتين يعطي :

$$\begin{vmatrix} \hbar\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}+m'\right]-£ & \hbar^2\sqrt{(\ell+m'+1)(\ell-m')} \\ \hbar^2\sqrt{(\ell-m')(\ell+m'+1)} & \hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}-m'-1\right]-£ \end{vmatrix}=0$$

$$\therefore \left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}+m'\right]-£\right\}\left\{\hbar^2\left[\ell(\ell+1)-\frac{1}{4}-m'\right]-£\right\}=$$

$$=\hbar^4\sqrt{(\ell+m'+1)(\ell-m')(\ell-m')(\ell+m'+1)}$$

$$=\hbar^4\ (\ell+m'+1)(\ell-m')$$

$$\therefore £^2-2\hbar^2 £\left[\ell(\ell+1)+\frac{1}{4}\right]+\hbar^4\left\{\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}\right]\ \left[\ell(\ell+1)-\frac{1}{4}\right]-\right.$$

$$\left.-\ell\ (\ell+1)\right\}=0$$

$$\therefore\ \pounds^2 - 2\hbar^2 \pounds\left[\ell(\ell+1)+\tfrac{1}{4}\right] + \hbar^4\left\{\left[\ell^2(\ell+1)^2 - \frac{1}{2}\ell(\ell+1) - \frac{3}{16}\right]\right. = 0$$

$$\therefore\ \left[\pounds - \hbar^2(\ell^2 + 2\ell + \tfrac{3}{4})\right]\left[\pounds - \hbar^2(\ell^2 - \tfrac{1}{4})\right]$$

$$\therefore\left[\pounds - \hbar^2(\ell+\tfrac{1}{2})(\ell+\tfrac{3}{2})\right]\left[\pounds - \hbar^2(\ell-\tfrac{1}{2})(\ell+\tfrac{1}{2})\right] = 0$$

$$\therefore\ \pounds = \hbar^2(\ell+\tfrac{1}{2})(\ell+\tfrac{3}{2}) \quad ، \quad \pounds = \hbar^2(\ell-\tfrac{1}{2})(\ell+\tfrac{1}{2})$$

$\downarrow$ $\qquad\qquad$ $\downarrow$

باخذ $j = \ell + \frac{1}{2}$ $\qquad\qquad$ باخذ $j = \ell - \frac{1}{2}$

$$\therefore\ \boxed{\pounds = \hbar^2 j(j+1)} \qquad\qquad \therefore\ \boxed{\pounds = \hbar^2 j(j+1)}$$

وبذلك فإن القيم الذاتية للمؤثر J^2 هو $\pounds = \hbar^2 j(j+1)$ حيث $j = \ell \pm \frac{1}{2}$.

وهو المطلوب .

أمثلة محلولة :

<u>مثال (١)</u> : أثبت العلاقة الآتية :

$$\left[J_x^2, J_y^2\right] = \left[J_y^2, J_z^2\right] = \left[J_z^2, J_x^2\right]$$

<u>الحل</u> :

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad \therefore\ J_y^2 = J^2 - J_x^2 - J_z^2$$

$$\therefore\left[J_x^2, J_y^2\right] = \left[J_x^2, J^2 - J_x^2 - J_z^2\right] = \left[J_x^2, J^2\right] - \left[J_x^2, J_x^2\right] - \left[J_x^2, J_z^2\right]$$

ولكن J_x يتبادل مع J^2, J_x أي أن

$$\left[J_x^2, J_x^2\right] = \left[J_x^2, J^2\right] = 0$$

$$\therefore\ \left[J_x^2, J_y^2\right] = \left[J_x^2, J_z^2\right] = \left[J_z^2, J_x^2\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_(1)}$$

وبالمثل وبإستخدام الحقيقة أن J_y يتبادل مع J^2, J_y أي أن

$$\left[J_y^2, J_y^2\right] = \left[J_y^2, J^2\right] = 0$$

يمكن إثبات أن

$$\left[J_y^2, J_z^2\right] = \left[J_x^2, J_y^2\right] \qquad \_\_\_\_(2)$$

من (2) ، (1) نحصل على :

$$\left[J_x^2\ , J_y^2\right] = \left[J_y^2\ , J_z^2\right] = \left[J_z^2\ , J_x^2\right]$$

وهو المطلوب .

__مثال (٢)__ : إذا كان المؤثر $S_r = \frac{\vec{S}\cdot\vec{r}}{r}$ يمثل مركبة لف الإلكترون في إتجـاه $\vec{r}$ وهو مؤثر قياسي ، أثبت أنه يكون متبادلاً مع مؤثر كمية الحركة الزاوية الكلي $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ، أي أن $\left[\vec{J}, S_r\right]$ وذلك بحساب المبدولين $\left[\vec{L}, S_r\right], \left[\vec{S}, S_r\right]$ مستخدماً العلاقات التبادلية لكل من $\vec{L}, r$.

__الحل__ :

$$\left[\vec{L}, S_r\right] = \left[\vec{L}, \frac{\vec{S}\cdot\vec{r}}{r}\right] = \frac{1}{r}\left[\hat{i}L_x + \hat{j}L_y + \hat{k}L_z , \vec{S}\cdot\vec{r}\right] \qquad \_\_\_(1)$$

والآن :

$$\left[L_x , \vec{S}\cdot\vec{r}\right] = \left[L_x , S_x\, x + S_y\, y + S_z\, z\right] = \left[L_x , S_y\, y\right] + \left[L_x , S_z\, z\right]$$
$$= S_y\left[L_x , y\right] + S_x\left[L_x , z\right] = i\hbar S_y\, z - i\hbar S_z\, y$$
$$= -i\hbar(\vec{r} \wedge \vec{S})_x$$

وبالمثل :

$$\left[L_y , \vec{S}\cdot\vec{r}\right] = -i\hbar(\vec{r} \wedge \vec{S})_y \ , \left[L_z , \vec{S}\cdot\vec{r}\right] = -i\hbar(\vec{r} \wedge \vec{S})_z$$

وبالتالي فإن معادلة (1) تعطي :

$$\left[\vec{L},S_r\right]=\frac{1}{r}\left\{-i\hbar(\vec{r}\wedge\vec{S})\right\}=-i\hbar\frac{(\vec{r}\wedge\vec{S})}{r} \quad \text{\_\_\_\_\_} (2)$$

وبالمثل يمكن إثبات أن :

$$\left[\vec{S},S_r\right]=i\hbar\frac{(\vec{r}\wedge\vec{S})}{r} \quad \text{\_\_\_\_\_} (3)$$

من (3) ، (2) نجد أن :

$$\left[\vec{S},S_r\right]=-\left[\vec{L},S_r\right]$$

$$\therefore \left[\vec{S},S_r\right]+\left[\vec{L},S_r\right]=0 \qquad \therefore \left[\vec{S}+\vec{L},S_r\right]=0 \quad \therefore \left[\vec{J},S_r\right]=0$$

وهو المطلوب .

__مثال (٣)__ : أثبت أن المؤثر $(\vec{L}\cdot\vec{S})$ الذي يمثل التفاعل بين كمية الحركة الزاوية المدارية $(\vec{L})$ وكمية الحركة الزاوية اللفية $(\vec{S})$ له القيمتان الذاتيتان $\frac{1}{2},-1$ وذلك في الحالة $p-$ للإلكترون [التي تتميز بالعدد الكمي $\ell=1$] وحيث العدد الكمي اللفي للإلكترون $s=\frac{1}{2}$.

أثبت أيضاً العلاقة الآتية :

$$\vec{L}\cdot\vec{S}=\frac{1}{2}(L_+S_-+L_-S_++2L_zS_z)$$

حيث : $L_\pm=L_x\pm iL_y \ , S_\pm=S_x\pm iS_y$

__الحل__ :

الحالة $p-$ $(p-state)$ للإلكترون هي الحالة التي تتميز بالعدد الكمي المداري $\ell=1$ ، ولما كان العدد الكمي اللفي للإلكترون $s=\frac{1}{2}$ فإن العدد الكمي الكلي j [المناظر للمؤثر الكلي $\vec{J}=\vec{L}+\vec{s}$] يأخذ القيم $(\ell\pm\frac{1}{2})$ أي $j=\frac{3}{2},\frac{1}{2}$ ، والآن :

$$J^2 = (\vec{L}+\vec{S})^2 = L^2 + S^2 + 2(\vec{L}\cdot\vec{S})$$

$$\therefore \vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

القيم الذاتية لــ $(\vec{L}\cdot\vec{S})$ يمكن كتابتها بالصورة :

$$\langle \vec{L}\cdot\vec{S}\rangle = \frac{1}{2}\left[\langle J^2\rangle - \langle L^2\rangle - \langle S^2\rangle\right]$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)\right]$$

حيث

$$\langle J^2\rangle = \hbar^2\, j(j+1)\ ,\ \langle L^2\rangle = \hbar^2\ell(\ell+1)\ ,\ \langle S^2\rangle = \hbar^2 s(s+1)$$

وبالتعويض عن قيمة $s=\frac{1}{2}\ ,\ \ell=1$:

$$\langle \vec{L}\cdot\vec{S}\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1) - 1\cdot(1+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1) - 2 - \frac{3}{4}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1) - \frac{11}{4}\right]$$

وعندما $j=\frac{3}{2}$ فإن :

$$\langle \vec{L}\cdot\vec{S}\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\left[\frac{15}{4} - \frac{11}{4}\right] = \frac{1}{2}\hbar^2\left[\frac{4}{4}\right] = \frac{1}{2}\hbar^2$$

وعندما $j=\frac{1}{2}$ فإن :

$$\langle \vec{L}\cdot\vec{S}\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\left[\frac{3}{4} - \frac{11}{4}\right] = \frac{1}{2}\hbar^2[-2] = -\hbar^2$$

أي أن القيم الذاتية لــ $(\vec{L}\cdot\vec{S})$ هي : $\frac{1}{2}\ ,\ -1$ ، وهو المطلوب أولاً .

<u>ولإثبات العلاقة</u> :

$$\vec{L}\cdot\vec{S}=\frac{1}{2}(L_+S_- + L_-S_+ + 2L_zS_z)$$

حيث أن :

$$L_\pm = L_x \pm i L_y \quad , \quad S_\pm = S_x \pm i S_y$$

$$\therefore \quad L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \quad , \quad L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

$$S_x = \frac{1}{2}(s_+ + S_-) \quad , \quad S_y = \frac{1}{2i}(s_+ - S_-)$$

$$\therefore \vec{L}\cdot\vec{S} = L_x s_x + L_y s_y + L_z s_z$$

$$= \frac{1}{2}(L_+ + L_-)\cdot\frac{1}{2}(s_+ + S_-) + \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)\cdot\frac{1}{2i}(s_+ - S_-) + L_z s_z$$

$$= \frac{1}{4}(L_+ s_+ + L_+S_- + L_-S_+ + L_-S_-) - \frac{1}{4}(L_+ s_+ - L_+S_- - L_-S_+$$

$$+ L_-S_-) + L_z s_z$$

$$= \frac{1}{2}(L_+ s_- + L_-S_+ + 2L_zS_z)$$

وهو المطلوب ثانياً .

إضافة مؤثرات كميات الحركة الزاوية

Addition of angular momentum Operators

مقدمه :

القيمة الذاتية للمؤثر J^2 في الحالة المميزة بالعددين j,m والتي يرمز لها بالرمز $|jm\rangle$ يمكن كتابتها بالصورة :

$$\langle J^2\rangle = \langle jm|J^2|jm\rangle$$

وإذا كانت القيمة الذاتية لـ J^2 هي $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ فإن معادلة القيمة الذاتية لـ J^2 تكتب بالصورة $J^2|\lambda m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\lambda m\rangle$ ، وحيث أن λ تعتمد على j فيمكن كتابة $|\lambda m\rangle = |jm\rangle$ وهو متجه كيت لكلاً المؤثرين J^2, J_z ، وبالتالي فإن معادلتي القيمة الذاتية لهذين المؤثرين يمكن كتابتها بالصورة :

$$J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle$$

$$J_z|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$$

معاملات كليبش – جوردان Clebsch – Gordan Coeff :

في حالة إذا كان لدينا مجموعتان من متجهات الحالة :

(1) $|j_1 m_1\rangle \longrightarrow J_1^2, J_{z1}$ تناظر الحالة ذات

(2) $|j_2 m_2\rangle \longrightarrow J_2^2, J_{z2}$ تناظر الحالة ذات

فلإضافة متجهات كمية الحركة الزاوية $(J_1^2, J_{z1}\ ;\ J_2^2, J_{z2})$

نكتب المتجهات الذاتية الآتية للمؤثرات الأربع $J_1^2, J_2^2, J_{z1}, J_{z2}$

كحاصل ضرب مباشر (direct product) بالصورة :

$$|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 j_2\, m_1\, m_2\rangle \qquad \text{\_\_\_\_(1)}$$

ويمكن كتابة المتجهات الذاتية $|jm\rangle$ أو الحالة ψ_{jm} للمؤثرين J^2, J_z كتركيبة خطية للمتجهات الذاتية (1) أي متجهات الحالة $|j_1 m_1\rangle, |j_2\ m_2\rangle$ بالصورة :

$$|jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j_1 j_2 m_1 m_2, jm)|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

حيث معاملات المفكوك تكتب بالصورة :

$$C(j_1 j_2 m_1 m_2, jm) = (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)$$

وتعرف بمعاملات كليبش – جوردان .

$$\therefore |jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$
$$= \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm) \quad \text{\_\_\_\_\_} \quad (\mathrm{I})$$

حيث

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1 \otimes j_2 m_2\rangle$$

تعطي العلاقة (I) المتجهات الذاتية أو الحالات $|jm\rangle$ بدلالة معاملات كليبش –جوردان .

وللتبسيط يمكن كتابة

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \equiv |m_1 m_2\rangle$$

فتكتب العلاقة (I) بالصورة :

$$|jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} |m_1 m_2\rangle (m_1 m_2 | jm)$$

ويلاحظ أن المجموع يتم على القيم الذاتية m_1, m_2 حيث يفترض أن j_1, j_2 لها قيم ثابتة .

وتؤول مسالة إضافة كميات الحركة الزاوية إلى مسألة حساب معاملات التحويل $(j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)$.

أي معاملات كليبش – جوردان ، والتي يمكن كتابتها للتبسيط

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \,|jm) = (m_1 m_2 \,|jm)$$

وتقيس هذه المعاملات مقدار أحتواء الحالة المركبة $|j_1 m_1 \otimes j_2 m_2\rangle$ أو $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ في الحالة $|jm\rangle$.

ويلاحظ أن هناك صور أخرى لمعاملات كليبش – جوردان مثل

$$C(j_1 j_2 j\,; m_1 m_2)$$

أو :

$$(j_1 j_2\, m_1 m_2 \,|j_1 j_2\, jm)$$

ويلاحظ أن قيم هذه المعاملات التي تختلف عن الصفر ، تخضع للشرط :

$$|j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2$$

أي أن j تأخذ القيم من $|j_1 - j_2|$ إلى $(j_1 + j_2)$.

كما أنها تخضع للعلاقة العيارية (normalization condition)

$$\sum_{m_1, m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 \,|jm)\,(j_1 j_2 m_1 m_2 \,|j'm') = \delta_{mm'}\,\delta_{jj'}$$

وللعلاقة

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 \,|jm) = (-1)^{j-j_1-j_2}(j_2 j_1 m_2 m_1 \,|jm)$$

$$= (j_2 j_1, -m_2, -m_1 \,|j, -m)$$

وفي حالة الجسيمات ذات اللف $\frac{1}{2}$ أي الفيرميونات فإن معاملات كليبش – جوردان للقيمة $j_1 = \ell, j_2 = \frac{1}{2}$ يمكن كتابتها بالصورة :

$$\left(\ell \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| \ell \pm \frac{1}{2}, m\right) = \pm\sqrt{\frac{\ell \pm m + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}}$$

$$\left(\ell \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| \ell \pm \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{\ell \mp m + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}}$$

حيث القيم المسموح بها لـ j هي $j = \ell \pm \frac{1}{2}$.

مثال : لنعتبر إلكترونا ذو كمية حركة مدارية ℓ ولف يساوي $\frac{1}{2}$.

وفي وجود تبادل الفعل اللفي – المداري (spin-orbit interaction) فإن القيم المسموح بها لـــ j هي $\ell+\frac{1}{2}, \ell-\frac{1}{2}$. أثبت أن القيم المتوقعة للمركبة S_z في الحالتين $j=\ell\pm\frac{1}{2}$ هما على الترتيب $(\pm\frac{m\hbar}{2\ell+1})$ حيث m هي المركبة z لكمية الحركة الزاوية الكلية j .

الحل :

بأخذ $j_1=\ell\ , j_2=\frac{1}{2}$ فإن j تنحصر بين (j_1+j_2) و $|j_1-j_2|$ أي تساوي $\ell+\frac{1}{2}, \ell-\frac{1}{2}$.

وإذا كانت المركبة z لـــ J لها $(2j+1)$ قيمة (من $-j$ إلى $+j$) ويرمز لها بالرمز m ، فإننا نحصل على مجموعتين من الحالات للإلكترون ، حيث :

$$|\,jm\rangle\equiv\left|\ell+\tfrac{1}{2},m\right\rangle,\ \left|\ell-\tfrac{1}{2},m\right\rangle$$

وتكون معاملات كليبش – جوردان لهذه الحالات هي كما في الجدول الآتي :

	j	$\ell+\frac{1}{2}$	$\ell-\frac{1}{2}$
	m	m	m
m_1	m_2		
$m-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}$	$-\sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}$
$m+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}$	$\sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}$

$$\therefore \left|\ell+\tfrac{1}{2},m\right\rangle = \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\therefore \left\langle S_z\right\rangle_{j=\ell+\frac{1}{2}} = \frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}\left(\tfrac{1}{2}\hbar\right) + \frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}\left(-\tfrac{1}{2}\hbar\right) = \frac{m\hbar}{2\ell+1}$$

وبالمثل فإن :

$$\therefore \left|\ell-\tfrac{1}{2},m\right\rangle = -\sqrt{\frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|m+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\therefore \left\langle S_z\right\rangle_{j=\ell-\frac{1}{2}} = \frac{\ell-m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}\left(\tfrac{1}{2}\hbar\right) + \frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}\left(-\tfrac{1}{2}\hbar\right) = -\frac{m\hbar}{2\ell+1}$$

$$\therefore \left\langle S_z\right\rangle_{j=\ell\pm\frac{1}{2}} = \pm\frac{m\hbar}{2\ell+1}$$

وهو المطلوب .

حساب معاملات كليبش – جوردان :

لحساب معاملات كليبش – جوردان $(m_1 m_2|jm)$.

نعلم أنه لكل قيمة من j توجد $(2j+1)$ قيمة لـ m وأن j تأخذ القيم من $|j_1-j_2|$ إلى (j_1+j_2) وبذلك فإن العدد الكلي للحالات $|jm\rangle$ سوف يكون :

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

وبذلك فإن المصفوفة $(m_1 m_2|jm)$ يكون لها عدد من الصفوف قدره $(2j_1+1)(2j_2+1)$ ، ونفس العدد من الأعمدة ، ولكنها تنقسم إلى عدة مصفوفات فرعية (Submatrices) تبعاً لقيمة $m=m_1+m_2$.

ويلاحظ أن أكبر قيمة لـــ m هي $m=j=j_1+j_2$ تحدث فقط عندما :

$m_1=j_1, m_2=j_2$

والقيمة التالية لـــ m : $m=j-1=j_1+j_2-1$ تحدث عندما :

$m_1=j_1 \ , \ m_2=j_2-1$

وعندما : $m_1=j_1-1 \ , \ m_2=j_2$

وهكذا ....

فعندما $m=j_1+j_2-n$ فإن :

$m=j_1 \ , \ m_2=j_2-n$

$m_1=j_1-n \ , \ m_2=j_2$

ولحساب عناصر تلك المصفوفات الفرعية ، نستخدم القواعد التالية :

(١) كل العناصر ($m_1 m_2|jm$) تكون حقيقية .

(٢) $|jm\rangle=\sum\limits_{m_1,m_2}|m_1 m_2\rangle(m_1 m_2|jm)$.

$$\therefore (j'm'|jm)=\sum_{m_1,m_2}(j_1 j_2 m_1 m_2|jm)(j'm'|j_1 j_2 m_1 m_2)$$

$$=\delta_{j'j}\,\delta_{m'm}$$

$$\therefore \sum_{m_1,m_2}|(j_1 j_2 m_1 m_2|jm)|^2=1$$

ولأكبر قيمة لـــ j : $j=j_1+j_2$ فإن $m_1=j_1 \ , \ m_2=j_2$

$$\therefore |(j_1 j_2 j_1 j_2|jj)|^2=1 \ \rightarrow \ (j_1 j_2 j_1 j_2|jj)=\pm 1$$

ونأخذ دائماً العدد $+1$ ، ونهمل -1 .

وبإستخدام هذه العلاقات يمكن إيجاد عناصر مختلف المصفوفات الفرعية .

فمثلاً في حالة المصفوفات 2×2 :

نلاحظ أن $m = j_1 + j_2 - 1$ ، j تأخذ القيمتين $j_1 + j_2 - 1 , j_1 + j_2$

وتكون العناصر المختلفة كما هو موضح بالجدول :

	j	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2 - 1$
m_1	m_2 \ m	$j-1$	$j-1$
j_1	$j_2 - 1$	$(j_1, j_2 - 1 \| j, j-1)$	$(j_1, j_2 - 1 \| j-1, j-1)$
$j_1 - 1$	j_2	$(j_1 - 1, j_2 \| j, j-1)$	$(j_1 - 1, j_2 \| j-1, j-1)$

ولحساب المعاملات في هذا الجدول نستخدم العلاقات الآتية :

$$(j_1, j_2 - 1 | j, j-1) = \sqrt{\frac{j_2}{j}} = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_ (1)}$$

حيث : $m_1 = j_1 \, , \, m_2 = j_2 - 1 \, , \, j = j_1 + j_2 \quad , \quad (j_1 j_2 | j j) = 1$

وبإستخدام العلاقة التعامدية $\sum_{m_1 m_2} \left|(j_1 j_2 m_1 m_2 | j m)\right|^2 = 1$ يمكننا كتابه :

$$\left|(j_1, j_2 - 1 | j, j-1)\right|^2 + \left|(j_1 - 1, j_2 | j, j-1)\right|^2 = 1$$

وبإستخدام (1) : $\therefore \quad \frac{j_2}{j_1 + j_2} + \left|(j_1 - 1, j_2 | j, j-1)\right|^2 = 1$

$$\therefore \quad (j_1 - 1, j_2 | j, j-1) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_ (2)}$$

وبالمثل يمكن الحصول على العلاقتين الآتيتين :

$$(j_1, j_2 - 1 | j-1, j-1) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_ (3)}$$

$$(j_1 - 1, j_2 | j-1, j-1) = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \qquad \text{\_\_\_\_\_ (4)}$$

المعادلات (4)،(3)،(2)،(1) تعطي العناصر المختلفة المبينة بالجدول السابق .

فمثلاً : بإستخدام الجدول السابق والعلاقات (4) ، (3) ، (2) ، (1) .

وفي حالة $j_1 = 1 \,,\, j_2 = \frac{1}{2}$:

(1) $m_1 = j_1 = 1 \quad , \quad m_2 = j_2 - 1 = \frac{1}{2} - 1 = -\frac{1}{2}$

$$j = j_1 + j_2 = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}, \quad m = j - 1 = j_1 + j_2 - 1 = \frac{3}{2} - 1 = \frac{1}{2}$$

$$(j_1, j_2 - 1 | j, j-1) = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}$$

$$\therefore (1, -\frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{\frac{1}{2}}{1 + \frac{1}{2}}} = \sqrt{\frac{1}{2(\frac{3}{2})}} = \sqrt{\frac{1}{3}}$$

(2) $m_1 = j_1 - 1 = 0 \quad , \quad m_2 = j_2 = \frac{1}{2}$

$$j = j_1 + j_2 = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \quad , \quad m = j - 1 = \frac{3}{2} - 1 = \frac{1}{2}$$

$$\therefore (j_1 - 1, j_2 | j, j-1) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}$$

$$\therefore (0, \frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{1}{2}}} = \sqrt{\frac{1}{\frac{3}{2}}} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

(3) $m_1 = j_1 = 1 \quad , \quad m_2 = j_2 - 1 = \frac{1}{2} - 1 = -\frac{1}{2}$

$$j = j_1 + j_2 - 1 = 1 + \frac{1}{2} - 1 = \frac{1}{2} \,,\; m = j - 1 = \frac{1}{2} - 1 = -\frac{1}{2}$$

$$(j_1, j_2 - 1 | j - 1, j - 1) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}$$

$$\therefore (1, -\tfrac{1}{2} | -\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{1}{2}}} = \sqrt{\frac{1}{\frac{3}{2}}} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

(4) $m_1 = j_1 - 1 = 0 \quad , \quad m_2 = j_2 = \frac{1}{2}$

$$j = j_1 + j_2 - 1 = \frac{1}{2} \quad , \quad m = j - 1 = -\frac{1}{2}$$

$$(j_1 - 1, j_2 | j - 1, j - 1) = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}$$

$$\therefore (0, \tfrac{1}{2} | -\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}) = -\sqrt{\frac{\frac{1}{2}}{1 + \frac{1}{2}}} = -\sqrt{\frac{1}{2(\frac{3}{2})}} = -\sqrt{\frac{1}{3}}$$

مثال تطبيقي : لنعتبر ذرة هيدروجين في الحالة -p (p-state) التي تتميز بالأعداد الكمية $\ell = 1 , s = \frac{1}{2}$ ، أوجد الدوال الموجية للذرة بدلالة التوافقيات الكروية $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ والحالات اللفية .

الحل : الدوال الموجية لذرة الهيدوجين يمكن كتابتها بالصورة :

$$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\theta,\phi) \; \psi(s)$$

حيث $\psi(s)$ تمثل الحالة اللفية (spin state) ، $R_{n\ell}$ هي الدالة الموجية القطرية ، Y_ℓ^m هي التوافقيات الكروية .

ولحساب الحالات اللفية : نلاحظ أن هناك حالتان للف :

(١) حالة اللف لأعلى spin up state وهي التي تناظر القيمة $(+\frac{1}{2})$ وتكتب $|jm\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ، وتمثل بالملفوف $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

(٢) حالة اللف لأسفل spin down state وهي التي تناظر القيمة $(-\frac{1}{2})$ وتكتب $|jm\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ ، وتمثل بالملفوف $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

والآن : نأخذ $j_1 = \ell = 1\ ,\ j_2 = s = \frac{1}{2}$ وبذلك فإن حالة الذرة يمكن كتابتها بالصورة $|jm\rangle = \psi_{jm}$.

حيث j هو العدد الكمي لكمية الحركة الزاوية الكلية للذرة ، m هي المركبة z لـ j .

الحالات $|jm\rangle$ يمكن كتابتها كمفكوك بدلالة الحالات $|j_1 m_1\rangle , |j_2 m_2\rangle$ وذلك بإستخدام معاملات كليبش – جوردان بالصورة :

$$|jm\rangle = \sum_{m_1,m_2} |j_1\, j_2\, m_1 m_2\rangle (j_1\, j_2\, m_1 m_2 | jm) \qquad \text{\_\_\_\_}(1)$$

حيث $|j_1\, j_2\, m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1 \otimes j_2\, m_2\rangle$

للقيمة $j_1 = 1$ فإن : $m_1 = 1, 0, -1$

للقيمة $j_2 = \frac{1}{2}$ فإن : $m_2 = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

وتصبح الحالات $|j_1\, m_1\rangle$ الممكنة هي : $|1,1\rangle , |1,0\rangle , |1,-1\rangle$

والحالات $|j_2\, m_2\rangle$ الممكنة هي : $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$

أما j فتأخذ القيم من $|j_1 - j_2|$ إلى $j_1 + j_2$ ، أي $j = \frac{3}{2}\ ,\ \frac{1}{2}$

وفي حالة $j = \frac{3}{2}$ فإن $m = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$

وفي حالة $j = \frac{1}{2}$ فإن $m = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

وتكون الحالات $|jm\rangle$ الممكنة هي :

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle , \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$$

ولحساب تلك الحالات :

نستخدم العلاقة (1) وقيم معاملات كليبش – جوردان المناظرة لـ $j_1 = 1\ ,\ j_2 = \frac{1}{2}$ ، وقد سبق حسابها .

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle = |1,1\rangle \otimes \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \qquad \text{\_\_\_\_}(2)$$

$$\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,1\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|1,0\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|1,1\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,0\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|1,0\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,-1\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,0\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|1,-1\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle=\left|1,-1\right\rangle\otimes\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

نلاحظ أن كل الحالات الممكنة لـ $\left|j,m\right\rangle$ نتجت بدلالة الحالتين $\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$, $\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$ ، حيث الحالة $\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$ تمثل الحالة اللفية لأعلى ويمثلها الملفوف $\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ والحالة $\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$ تمثل الحالة اللفية لأسفل ويمثلها الملفوف $\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

وبذلك يمكننا كتابة :

$$\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle=R_{n1}(r)Y_1^1\ (\theta,\phi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}R_{n1}\,Y_1^1\\0\end{pmatrix}$$

وبالمثل :

$$\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}R_{n1}(r)Y_1^1\ (\theta,\phi)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}+\sqrt{\tfrac{2}{3}}R_{n1}(r)Y_1^0\ (\theta,\phi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}R_{n1}\,Y_1^1\\ \sqrt{\tfrac{2}{3}}R_{n1}\,Y_1^0\end{pmatrix}$$

وهكذا بالنسبة لكل الحالات الباقية حيث يمكن كتابتها كملفوفات ذات مركبتين بدلالة التوافقيات الكروية .

الدوران وكمية الحركة الزاوية :

(١) تعرف العملية التماثلية (Symmetry operation) بأنها العملية التي تتم من خلال تحويل لا يغير من العلاقات المتبادلة بين مكونات أي منظومة فيزيائية .

وكمثال لتلك العمليات : عملية الإنتقال (translation) الهندسي ، عملية دوران (rotation) الأنظمة أو المنظومات الفيزيائية .

(٢) إذا كان لدينا نظاماً كمياً ذو متجه حالة $|\psi\rangle$ وتعرض لعملية دوران في الفراغ خلال زاوية ما (θ) ، فإن متجه حالته يصبح $|\psi'\rangle$ فبفرض أن عملية الدوران قد تمت من خلال مؤثر u_R ، فإن $|\psi'\rangle = u_R|\psi\rangle$. يسمى u_R مؤثر الدوران (rotation operator) .

وهناك قاعدة نسبية تقول أنه عند الدوران فإن حواصل الضرب القياسية لا تتغير ، أي أن $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$

$$\therefore \langle\psi|u_R^+ u_R|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

$$\therefore u_R^+ u_R = 1 \longrightarrow$$ ∴ $\boxed{u_R \text{ هو مؤثر واحدي}}$

وهذا يعني أن عملية الدوران في ميكانيكا الكم تتم من خلال مؤثر واحدي u_R أو أن عملية الدوران تمثل بتحويل واحدي (unitary transformation) .

أيضاً : فإن المتغيرات الديناميكية (A مثلاً) تتغير في عملية الدوران بواسطة تحويلات واحدية .

$$A = u_R^+ A' u_R \quad , \quad A' = u_R A u_R^+$$

(٣) إن الدوران حول محور في إتجاه متجه الوحدة $\hat{n}$ (الواقع في إتجاه المحور) خلال زاوية صغيرة θ ، يمكن تمثيله بمصفوفة واحدية صورتها :

$$u_R = I - \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})\theta$$

حيث $\vec{J}$ هو المؤثر الهيرميتي لكمية الحركة الزاوية ، ويطلق عليه إسم مولد الدوران (generator of rotation) .

المركبة $(\hat{n}\cdot\vec{J})$ هي مركبة $\vec{J}$ في إتجاه $\hat{n}$.

ومن الخواص الواحدية للمؤثر u_R فإن :

$$I = u_R^+ u_R = \left[I + \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})^+ \theta\right]\left[I - \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})\theta\right]$$

$$= I + \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})^+ \theta - \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})\theta$$

وذلك مع إهمال مربعات θ والقوى الأعلى (نظرا لصغر قيمة θ) .

$$\therefore \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})^+ \theta - \frac{i}{\hbar}(\hat{n}\cdot\vec{J})\theta = 0 \qquad \therefore (\hat{n}\cdot\vec{J})^+ = (\hat{n}\cdot\vec{J})$$

وهذا يعني أن مركبة $\vec{J}$ في إتجاه $\hat{n}$ هي هيرميتية ، وبالتالي فإن $\vec{J}$ نفسه هو مؤثر هيرميتي ، وتخضع مركباته التي هي مؤثرات هيرميتية للعلاقات التبادلية الآتية :

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad , \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad , \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

(٤) **يمكن إثبات أن $\vec{J}$ هو مؤثر إتجاهي (vector operator) كالتالي** :

حيث أن

$$|\psi'\rangle = (1 - \frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot\vec{J}\theta)|\psi\rangle \quad \therefore \langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot\langle\vec{J}\rangle$$

حيث $\langle\vec{J}\rangle$ هو القيمة المتوقعة لـ $\vec{J}$ في الحالة $|\psi\rangle$.

إذا تعرضت الحالة لدوران ما ، فإن حواصل الضرب القياسية

$\langle \psi | \psi' \rangle \, , \, \langle \psi | \psi \rangle$

لا تتغير ، وبذلك فإن حاصل الضرب القياسي $\hat{n}\cdot\langle \vec{J} \rangle$ هو أيضاً لا متغير دوراني أي يظل كما هو قياسياً ، وحيث أن $\hat{n}$ هـو متجـه ، فـإن $\langle \vec{J} \rangle$ أيضاً يجب أن يكون متجهاً ، وبهذا فإن $\vec{J}$ هو مؤثر إتجاهي .

(٥) <u>ولتحديد</u> $\vec{J}$: نفرض $\vec{A}$ أي مؤثر إتجاهي إختياري ، بمعنى أنه عنـد أي دوران فإن القيمة المتوقعة له تتحرك كمركبات متجه .

يمكن كتابة القيمة المتوقعة الجديدة (بعد الدوران) بالصورة :

$$\langle \psi' | \vec{A} | \psi' \rangle = \langle \psi' | A_i | \psi' \rangle = \sum_{j=1}^{3} R_{ij} \langle \psi | A_j | \psi \rangle$$

حيث $i = 1, 2, 3$.

R_{ij} تمثل مصفوفة (3×3) تعطي التحويل من قيم $\vec{A}$ في الحالة $|\psi\rangle$ إلى القيم فـي الحالـة $|\psi'\rangle$ ، وهـذه المصـفوفات هـي مصـفوفات واحديـة (unitary matrices) ويمكن إختيارها كمصفوفات قطرية مكونة مـن عـدد من المصفوفات الفرعية (submatrices) بالصورة :

$$R_{ij} = \begin{pmatrix} R_{ij}^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & R_{ij}^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & R_{ij}^{(3)} \end{pmatrix}$$

وبذلك فإن التمثيل الأصلي يمكن إختزالة (reduced) إلـى عـدد مـن التمثـيلات البسـيطة ، ويقـال أن التمثيـل مختـزل أو قابـل للإختـزال (reducible) .

وإذا لم يكن هناك تمثيلاً مكافئاً يختزل المصفوفات R_{ij} للتمثيل إلى تمثيلات أبسط ، قيل أن التمثيل غير مختزل أو غير قابل للأختزال (irreducible) .

ويمكن إثبات أن أي تمثيل قابل للإختزال يمكن إختزاله بطريقة معينة إلى مركبات غير قابلة للإختزال .

<u>المركبات الكروية أو العيارية للمؤثر الإتجاهي</u> :

إذا كان $\vec{A}$ مؤثر متجه (vector operator) فإن المركبات الكروية (spherical component) أو المركبات القياسية أو العيارية (standard component) له تعرف كالتالي :

$$A_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(A_x + iA_y) = -\frac{1}{\sqrt{2}}A_+ \quad , \quad A_0 = A_z$$

$$A_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x - iA_y) = \frac{1}{\sqrt{2}}A_-$$

وتخضع هذه المؤثرات للعلاقات التبادلية الآتية :

$$\left.\begin{aligned} [A_0, A_1] &= \hbar A_1 \\ [A_0, A_{-1}] &= -\hbar A_{-1} \\ [A_1, A_{-1}] &= 2\hbar A_0 \end{aligned}\right\} \longrightarrow \begin{aligned} [A_z, A_+] &= \hbar A_+ \\ [A_z, A_-] &= -\hbar A_- \\ [A_+, A_-] &= 2\hbar A_z \end{aligned}$$

وإذا كان $\vec{A} = \vec{J}$ فإن المركبات الكروية لـ $\vec{J}$ هي :

$$J_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x + iJ_y) = -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+ \quad , \quad J_0 = J_z$$

$$J_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x - iJ_y) = \frac{1}{\sqrt{2}}J_-$$

ويخضع للعلاقات التبادلية :

$$[J_0, J_1] = \hbar J_1 \; , \; [J_0, J_{-1}] = -\hbar J_{-1} \; , \; [J_1, J_{-1}] = 2\hbar J_0$$

وبوجه عام فإن :

$$[J_\mu , J_v] = \sum_{\mu'} J'_\mu \langle 1\mu' | J_\mu | 1v \rangle$$

حيث :

$$\langle 1\mu' | J_0 | 1\mu \rangle = \langle 1\mu' | J_z | 1\mu \rangle = \mu\hbar\delta_{\mu\mu'}$$

$$\langle 1\mu' | J_{\pm 1} | 1\mu \rangle = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1\mu' | J_\pm | 1\mu \rangle$$

$$= \mp\left[1 - \frac{1}{2}(\mu^2 \pm \mu)\right]^{\frac{1}{2}} \hbar\delta_{\mu', \mu\pm 1}$$

المؤثرات الممتدة (Tensor operators) :

يعرف المؤثر الممتد بأنه مجموعة من n مؤثر $T_1, T_2, \cdots, T_n$ بحيث أن التحويلات الدورانية (rotational transformation) لها هي دوال خطية في المؤثرات n .

$$T'_m = u_R T_m u_R^+ = \sum_\ell T_\ell R_{\ell m} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (1)}$$

وتعتمد المعاملات $R_{\ell m}$ على الدوران ، وتتحول بواسطة تمثيل غير مختزل (irreducible representation) ، بمعنى أن المعاملات $R_{\ell m}$ هي عناصر مصفوفية لتمثيل غير مختزل .

والآن لنعرف ما يسمى بالمؤثر الممتد الكروي غير المختزل

(irreducible spherical tensor operator)

من المرتبة (j) ويكتب $T_m^{(j)}$ ، حيث $m = j, j-1, \cdots, -j$ وهو عبارة عن ممتد له عدد $(2j+1)$ من المركبات (التي هي مؤثرات) المناظرة لقيم m التي هي $(2j+1)$ قيمة .

ويحقق هذا الممتد معادلة التحويل الآتية :

$$u_R T_m^{(j)} u_R^+ = \sum_{m'=-j}^{j} T_{m'}^{(j)} R_{m'm}^{(j)} \qquad (2)$$

ويلاحظ أن المؤثر $T_m^{(j)}$ يتبادل مع المؤثر J_μ طبقاً للعلاقة :

$$\left[J_\mu , T_m^{(j)}\right] = \sum T_{m'}^{(j)} \langle jm' | J_\mu | jm \rangle \qquad (3)$$

هذه العلاقة تعطي تعريفاً آخر للممتد $T_m^{(j)}$ طبقاً للعالم راكا (Racah) .

<u>تعريف راكا</u> : " المؤثر الممتد $T_m^{(j)}$ يقال أنه مؤثر ممتد كروي غير مختزل ، إذا حققت مركباته مع مؤثر كمية الحركة الزاوية الكلية $\vec{J}$ ، العلاقة التبادلية (3) " .

ومن هذه العلاقة يمكن إثبات العلاقات التبادلية الآتية :

$$\left[J_z , T_m^{(j)}\right] = m\hbar T_m^{(j)}$$

$$\left[J_+ , T_m^{(j)}\right] = \left[j(j+1) - m(m+1)\right]^{\frac{1}{2}} \hbar T_{m+1}^{(j)}$$

$$\left[J_- , T_m^{(j)}\right] = \left[j(j+1) - m(m-1)\right]^{\frac{1}{2}} \hbar T_{m-1}^{(j)}$$

<u>نظرية فيجنر – إيكارت (Wigner – Eckart)</u>

إن العناصر المصفوفية للمؤثرات الممتدة بين حالات ذاتية مختلفة يمكن كتابتها بالصورة : $\langle \alpha_1 j_1 m_1 | T_m^{(j)} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle$

حيث j_1 , j_2 , m_1 , m_2 هي الأعداد الكيمة لكمية الحركة الزاوية ، α_1 , α_2 تعبر عن أي أعداد كمية أخرى لازمة لوصف الحالة وصفاً تاماً .

وتعطي نظرية فيجنر – إيكارت العناصر المصفوفية للمؤثر الممتد $T_m^{(j)}$ بدلالة معاملات كليبش – جوردان ، وصورتها هي :

$$\langle \alpha_1 j_1 m_1 | T_m^{(j)} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle =$$
$$= \langle \alpha_1 j_1 \; || T^{(j)} || \; \alpha_2 j_2 \rangle (j_2 \, j \, m_2 \, m | j_1 \, m_1)$$

حيث معاملات التناسب $\langle \alpha_1 j_1 \; || T^{(j)} || \; \alpha_2 j_2 \rangle$ يسمى بالعنصر المصفوفي المختزل (reduced matrix element) أو العنصر المصفوفي ذو الخطين (II) للمؤثر الممتد الكروي غير المختزل $T^{(j)}$ ، ويعتمد هذا المعامل على طبيعة المؤثر الممتد ، وعلى الأعداد الكمية $j_1 , j_2 , \alpha_1 , \alpha_2$ ، ولا يعتمد على الأعداد m_1 , m_2 , m والتي تحدد إتجاه الدوران للمنظومة في الفراغ ، أما المعاملات $(j_2 \, j \, m_2 \, m | j_1 \, m_1)$ فهي معاملات كليبش – جوردان ، وهي لا تعتمد على طبيعة المؤثر الممتد .

ويمكن كتابة نظرية فيجنر – إيكارت بالصورة الآتية :

" إن العنصر المصفوفي للمركبة الكروية m – للمؤثر $T^{(j)}$ بين الحالتين الذاتيتين : $|\alpha_1 j_1 m_1\rangle$ و $|\alpha_2 j_2 \; m_2\rangle$ يساوي حاصل ضرب معامل كليبش – جوردان $(j_2 \, j m_2 \, m | j_1 \, m_1)$ مع عدد لا يعتمد على m , m_1 , m_2 (الأعداد الكمية المغنطيسية) " .

وحساب المعاملات $\langle \alpha_1 j_1 \; || T^{(j)} || \; \alpha_2 j_2 \rangle$ نظرياً ليس سهلاً ، وعادة ما يتم حسابه من نظرية فيجنر – إكارت وذلك بحساب عنصر مصفوفي معين عملياً ، ويتم ذلك بإختيار بسيط ، مثل إختيار $m_1 = m_2$ تساوي صفر أو واحد ، $m = 0$ طبقاً لكون المنظومة ذات كمية حركة زاوية عدد صحيح أو نصف صحيح .

أمثلة محلولة :

مثال (١) : أوجد العناصر المصفوفية للمؤثر المتجه $\vec{A}$ ، الذي مركباته الكروية هي A_ℓ وذلك بدلالة العناصر المصفوفية لحاصل الضرب القياسي $(\vec{J}\cdot\vec{A})$ ، حيث $\vec{J}$ مؤثر متجه كمية الحركة الزاوية الكلية .

الحل :

إن النسبة بين العنصرين المصفوفين للمؤثرين $\vec{A},\vec{J}$ هي :

$$\frac{\langle \alpha' j' m' | A_\ell | \alpha j m\rangle}{\langle \alpha' j' m' | J_\ell | \alpha j m\rangle}=\frac{\langle \alpha' j' || \vec{A} || \alpha j\rangle}{\langle \alpha' j' || \vec{J} || \alpha j\rangle}$$

$$\therefore \langle \alpha' j' m' | A_\ell | \alpha j m\rangle$$

$$=\frac{\langle \alpha' j' || \vec{A} || \alpha j\rangle}{\langle \alpha' j' || \vec{J} || \alpha j\rangle}\langle \alpha' j' m' | J_\ell | \alpha j m\rangle \quad \text{\_\_\_\_\_} (1)$$

وبوضع $j=j'$ وأستخدام خواص $\vec{J}$ ، فإننا نحصل على العلاقة الآتية للمؤثر القياسي $\vec{J}\cdot\vec{A}$:

$$\langle \alpha' j m' | \vec{J}\cdot\vec{A} | \alpha j m\rangle = C\langle \alpha' j || \vec{A} || \alpha j\rangle \quad \text{\_\_\_\_} (2)$$

حيث C لا يعتمد على طبيعة $\vec{A}$ أو α أو α' ، وبذلك يمكن إيجاده بوضع $\vec{A}=\vec{J}$:

$$\therefore \langle \alpha' j m' | J^2 | \alpha j m\rangle = C\langle \alpha' j || \vec{J} || \alpha j\rangle \quad \text{\_\_\_\_} (3)$$

ولحساب $\langle \alpha' j || \vec{J} || \alpha j\rangle$:

من نظرية فيجنر – إيكارت :

$$\langle \alpha' j j | J_z | \alpha j j\rangle = \langle \alpha' j || \vec{J} || \alpha j\rangle (j 1 j 0 | j j)$$

حيث معاملات كليبش – جوردان :

$$(j1j0|jj)=\sqrt{\frac{j}{j+1}}$$

أيضاً فإن :

$$\langle \alpha' jj | J_z | \alpha jj \rangle = \hbar j \, \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\therefore \langle \alpha' j || \vec{J} || \alpha j \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1)} \; \delta_{\alpha\alpha'} \qquad \text{\_\_\_\_ (4)}$$

أيضاً :

$$\langle \alpha' jm' | J^2 | \alpha jm \rangle = \hbar^2 j(j+1) \; \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{mm'} \qquad \text{\_\_\_\_ (5)}$$

بالتعويض في (3) :

$$\hbar^2 j(j+1) \; \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{mm'} = C \cdot \hbar \sqrt{j(j+1)} \; \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\therefore C = \frac{\hbar \, j(j+1)}{\sqrt{j(j+1)}} \delta_{mm'} = \hbar \sqrt{j(j+1)} \;\; \delta_{mm'}$$

وتصبح العلاقة (2) :

$$\langle \alpha' jm' | \vec{J} \cdot \vec{A} | \alpha jm \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1)} \;\; \delta_{mm'} \cdot \langle \alpha' j || \vec{A} || \alpha j \rangle$$

$$\therefore \boxed{\langle \alpha' j || \vec{A} || \alpha j \rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \langle \alpha' jm | \vec{J} \cdot \vec{A} | \alpha jm \rangle}$$

وبالتعويض في (1) نحصل على العلاقة المطلوبة :

$$\langle \alpha' j' m' | A_\ell | \alpha jm \rangle$$

$$= \frac{\langle \alpha' jm | \vec{J} \cdot \vec{A} | \alpha jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \alpha' j' m' | J_\ell | \alpha jm \rangle \text{\_\_ (I)}$$

وهي علاقة تعبر عن العناصر المصفوفية للمؤثر المتجه $\vec{A}$ بدلالة العناصر المصفوفية لحاصل الضرب القياسي $(\vec{J} \cdot \vec{A})$.

مثال (٢) : الإرتباط (L-S) [L-S coupling] لذرة الهيدروجين :

يعرف المؤثر المتجه للعزم المغنطيسي للذرة بالعلاقة :

$$\vec{m}=\frac{-e}{2\mu c}(g_L\vec{L}+g_S\vec{S})$$

حيث $\vec{L},\vec{S}$ مؤثرات إتجاهيان يرتبطان بالمؤثر $\vec{J}$ بالعلاقة $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$ ،

أثبت أنه في حالة الإرتباط $(L-S)$ الذي يمثل الحالة الأرضية للذرة ، فإن قيمة العزم المغنطيسي للذرة يعطي بالعلاقة :

$$\boxed{m=-\frac{e\hbar}{2\mu c}jL_g}$$

حيث :

$$L_g=1+\frac{j(j+1)-\ell(\ell+1)+s(s+1)}{2j(j+1)}$$

يعرف بمعامل لاندي (Lande' – factor) .

الحل :

القيمة المتوقعة لـ $\vec{m}$ يمكن كتابتها بإستخدام نظرية فيجنر – إريكارت بالصورة :

$$m=\langle\alpha jj|m_z|\alpha jj\rangle=\langle\alpha j||\vec{m}||\alpha j\rangle(j1j0|jj)$$

وحيث أن معامل كليبش – جوردون :

$$(j1j0|jj)=\sqrt{\frac{j}{j+1}}$$

$$\therefore\quad m=\langle\alpha jj|m_z|\alpha jj\rangle=\sqrt{\frac{j}{j+1}}\langle\alpha j||\vec{m}||\alpha j\rangle$$

وبإستخدام العلاقة (I) في المثال رقم (١) وتطبيقها على المؤثر المتجه للعزم المغنطيسي $\vec{m}$ فإننا نحصل على :

$$m=\langle\alpha jj|m_z|\alpha jj\rangle=\frac{-e}{2\mu\hbar C(j+1)}\langle\alpha jj|g_L(\vec{L}\cdot\vec{J})+g_S(\vec{S}\cdot\vec{J})|\alpha jj\rangle$$

ولكن :

$$\vec{L}\cdot\vec{J}=\frac{1}{2}(J^2+L^2-S^2)\ ,\ \vec{S}\cdot\vec{J}=\frac{1}{2}(J^2+S^2-L^2)$$

ولكن

$$\therefore\ m=\frac{-e}{2\mu\ \hbar C(j+1)}\cdot\frac{1}{2}\langle\alpha jj|\ (g_L+g_S)J^2+(g_L-g_S)(L^2-S^2)|\alpha jj\rangle$$

وإذا كان الإرتباط (L-S) [أي L-S coupling] يصف الحالة الأرضية للذرة ، وبإعتبار الحالة $|\alpha jj\rangle$ هي حالة ذاتية تتميز بالعددين الكميين ℓ,s حيث :

$$\langle J^2\rangle=\hbar^2 j(j+1)$$

$$\langle L^2\rangle=\hbar^2\ell(\ell+1)$$

$$\langle S^2\rangle=\hbar^2 s(s+1)$$

ولما كان g_L,g_S هي معاملات الإرتباط المغناطيسية المرتبطة بكميتي الحركة $\vec{L},\vec{S}$ ، وقيمتهما : $g_L=1\ ,\ g_S=2$ فإن :

$$m = \frac{-e}{2\mu\ \hbar C(j+1)} \cdot \frac{1}{2}\langle \alpha j j | 3J^2 - L^2 + S^2 | \alpha j j \rangle$$

$$= \frac{-e}{2\mu\ \hbar C(j+1)} \cdot \frac{1}{2}\left[3\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 \ell(\ell+1) + \hbar^2 s(s+1)\right]$$

$$= \frac{-e\hbar}{2\mu C} j \left[\frac{3j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\right]$$

$$= \frac{-e\hbar}{2\mu C} j \left[1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\right]$$

$$= \frac{-e\hbar}{2\mu C} j L_g$$

حيث :

$$L_g = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

يعرف بمعامل لاندي (Lande' g – Factor) .

وهو المطلوب .