**جامعة الطائف**
**قسم الفيزياء**
**المقر: كلية المعلمين**

# محاضرات ميكانيكا الكم2

## الدكتور محمد أحمد آلجلالي

**AL-Jalali**
**1429/07/21**

# المؤثرات فى ميكانيكا الكم

# Operators

**المؤثر عبارة عن قاعدة رياضية تحول دالة ما إلى دالة أخرى مثلا المؤثر التفاضلي $d/dx$ يحول الدالة $f(x)$ إلى دالة أخرى $f'(x)$ والتكامل والجذر ألتربيعي والإعداد المضروبة بعدد تدل على عمليات تأثير رياضي**

**فالمؤثر رمز رياضي يجبرنا بأن نقوم بعمل ما ،مع كل ما يتلو أو يعقب ذلك الرمز**

**مثال**

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

## 1-المؤثرات وميكانيكا الكم Operators and Quantum Mechanics :

كافة المشاهدات الفيزيائية (المقادير الفيزيائية،المتحولات الديناميكية)تمثل رياضيا بالمؤثرات، الجدول التالي يعطي أهم المتحولات الديناميكية في فضاء الموضع.

Table 1: Physical observables and their corresponding quantum operators (single particle)

| اسم المشاهدة | رمز المشاهدة | رمز المؤثر | المؤثر |
|---|---|---|---|
| Positionالموضع | $\underline{\mathbf{r}}$ | $\hat{\mathbf{r}}$ | Multiply by $\underline{\mathbf{r}}$ |
| Momentumكمية الحركة | $\mathbf{p}$ | $\hat{\mathbf{p}}$ | $-i\hbar\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x}+\hat{j}\frac{\partial}{\partial y}+\hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$ |
| Kinetic energy الطاقة الحركية | $T$ | $\hat{T}$ | $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$ |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Potential energy<br>الطاقة الكامنة | $V(\mathbf{r})$ | $\hat{V}(\mathbf{r})$ | Multiply by $V(\mathbf{r})$ |
| Hamiltonian<br>الهاملتوني | H | $\hat{H}$ | $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\mathbf{r})$ |
| Total energy<br>الطاقة الكلية | $E$ | $\hat{E}$ | $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ |
| Angular momentum<br>كمية الحركة الزاوية<br>المدارية(الاندفاع الزاوي) | $l_x$<br>على المحورx | $\hat{l}_x$ | $-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$ |
| | $l_y$ | $\hat{l}_y$ | $-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$ |
| | $l_z$ | $\hat{l}_z$ | $-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ |

وفي فضاء كمية الحركة (الجدول التالي)

Table 1: Physical observables and their corresponding quantum operators (single particle)

| اسم المشاهدة | رمز المشاهدة | رمز المؤثر | المؤثر |
|---|---|---|---|
| Positionالموضع | $\underline{\mathbf{r}}$ | $\hat{\mathbf{r}}$ | $i\hbar\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial p_x}+\hat{j}\frac{\partial}{\partial p_y}+\hat{k}\frac{\partial}{\partial p_z}\right)$ |
| Momentumكمية الحركة | $\mathbf{p}$ | $\hat{\mathbf{p}}$ | $\hat{\mathbf{p}}$ |
| Total energy<br>الطاقة الكلية | $E$ | $\hat{E}$ | $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ |

| | | | |
|---|---|---|---|
| | | | |
| $-\hbar^2 \dfrac{\partial^2}{\partial p_x^2}$ | $\hat{X}^2$ | $X^2$ | $X^2$ مربع الموضع |

## 2- الخواص الأساسية للمؤثرات Basic Properties of Operators:

- الجمع والطرح لمؤثرين

$$(\hat{A}+\hat{B})f = \hat{A}f+\hat{B}f$$

$$(\hat{A}-\hat{B})f = \hat{A}f-\hat{B}f \qquad (2\text{-}1)$$

- ضرب مؤثرين

$$\hat{A}\hat{B}f \equiv \hat{A}[\hat{B}f] \qquad (2\text{-}2)$$

- في حال كون المؤثرين متساويين

$$\hat{A}f = \hat{B}f \qquad (2\text{-}3)$$

- مؤثر الوحدة حيادي بالنسبة للضرب

$$\hat{1}f = f \qquad (2\text{-}4)$$

- قانون الخلط(الربط)

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} \qquad (2\text{-}5)$$

- قانون التوزيع

$$\hat{A}(\hat{B}+\hat{C})=\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\hat{C} \qquad (2\text{-}6)$$

$$\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$$

## 3-المؤثرات الخطية Linear Operators :

**يدرس في** ميكانيكا الكم فقط ما يسمى المؤثرات الخطية والتي تتمتع بالخواص التالية:

$$\hat{A}(f+g) = \hat{A}f+\hat{A}g$$

$$\hat{A}(cf) = c\hat{A}f \qquad (3\text{-}1)$$

حيث c ثابت و f و g دوال ، ولنحاول أن نطبق ما سبق على المؤثر d/d x والمؤثر $()^2$ والمؤثر √فنجد:

$$(d/dx)[f(x)+g(x)] = (d/dx)f(x)+(d/dx)g(x)$$

$$(d/dx)[cf(x)] = c\,(d/dx)f(x)$$ المؤثر خطي (3-2)

$$(f(x)+g(x))^2\neq(f(x))^2+(g(x))^2$$

$$\sqrt{\psi_1+\psi_2}\neq\sqrt{\psi_1}+\sqrt{\psi_2} \qquad (3\text{-}3)$$

المؤثرين ليسا خطيين

## 4- القيم الخاصة (المميزة) والدوال الخاصة (المميزة) للمؤثر Eigenfunctions and Eigenvalues:

عندما يؤثر مؤثر ما $\hat{A}$ على دالة $f$ وينتج بعد تأثير المؤثر عليها نفس الدالة $f$ مضروبة بثابت ما k نسمي تلك الدالة بالدالة الخاصة(المسموحة) ونسمي الثابت بالقيمة الخاصة (الذاتية،المسموحة)

$$\hat{A}f = kf \qquad (4\text{-}1)$$

حيث k القيمة الخاصة

مثال:

أثبت أن الدالة التالية: حيث $A,\alpha$ ثوابت ،

$$\psi = Ae^{-\alpha x}$$

هي دالة مميزة للمؤثر التالي:

$$\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$$

**الحل:**

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

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 Ae^{-\alpha x} + \frac{2}{x}\left(-\alpha Ae^{-\alpha x}\right) + \frac{2\alpha}{x}\left(Ae^{-\alpha x}\right)$$

$$\hat{F}\psi = \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{x} + \frac{2\alpha}{x}\right)Ae^{-\alpha x}$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2 Ae^{-\alpha x}$$

$$\hat{F}\psi = \alpha^2\psi$$

أي أن $\psi$ دالة مميزة و $\alpha^2$ القيمة المميزة

**تمرين** أوجد الدالة المميزة للمؤثر التالي :

$$\hat{G} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + bx$$

هل الدالة التالية دالة خاصة للهاملتوني؟

$$\psi = A\cos(kx - \omega t)$$

الحل:

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

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = -K^2\psi(x,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\omega A\sin(kx - \omega t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}.-K^2\psi(x,t) + U(x)\psi(x,t) = -i\hbar\omega A\sin(kx - \omega t)$$

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m}\psi(x,t) + U(x)\psi(x,t) = -i\hbar\omega A\sin(kx - \omega t)$$

$$\left(\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + U(x)\right)\psi(x,t) = -EiA\sin(kx - \omega t)$$

$$E\psi(x,t) = -EiA\sin(kx - \omega t) \Rightarrow$$

$$\psi(x,t) = -iA\sin(kx - \omega t) \neq A\cos(ks - \omega t)$$

الدالة لا تحقق الشرط

طريقة أخرى:حسب نظام المؤثرات

$$\hat{E}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi$$

$$i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial t}A\cos(kx - \omega t)\right] = E\psi$$

$$i\hbar\left[-\omega A\sin(kx - \omega t\right] = E\psi$$

$$-i\hbar\omega A\sin(kx - \omega t) = E\psi$$

$$\hbar\omega = E \Rightarrow -iEA\sin(kx - \omega t) = E\psi \Rightarrow$$

$$-iA\sin(kx - \omega t = \psi \neq A\cos(kx - \omega t)$$

لاحظ أن الدالة تحقق معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن لأن:

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x)\right)\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(x)\psi = E\psi$$

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\left(x,t\right) = -K^2\psi\left(x,t\right)$$

$$\left(\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + U(x)\right)\psi\left(x,t\right) = E\psi\left(x,t\right) \Rightarrow$$

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + U(x) = E$$

$$\frac{P^2}{2m} + U(x) = E$$

$$\frac{1}{2}mv^2 + U(x) = E$$

وهي عبارة الطاقة الكلية الكلاسيكية

## 5-أقواس التبادل والمبادلات Commutators in Quantum Mechanics :

بفرض لدينا مؤثرين $\hat{A}$ , $\hat{B}$ لهما نفس الدالة المميزة(الخاصة) ،فحسب قواعد الدالة المميزة والقيمة المميزة للمؤثر سيكون لدينا قيمتين مميزتين b,a وذلك وفق العلاقتين التاليتين:

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi &= a\psi \\ \hat{B}\psi &= b\psi\end{aligned} \qquad (5\text{-}1)$$

إذا ضربنا العلاقة الأولى بـ $\hat{B}$ والثانية بـ $\hat{A}$ نجد:

$$\hat{B}\hat{A}\psi = a\hat{B}\psi$$
$$\hat{A}\hat{B}\psi = b\hat{A}\psi \qquad (5\text{-}2)$$

وكون ψ الدالة المميزة لكل من المؤثرين $\hat{A}$ , $\hat{B}$ نجد:

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}a\psi = ab\psi$$
$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}b\psi = ba\psi \qquad (5\text{-}3)$$

بطرح العلاقة الثانية من الأولى نجد:

$$\hat{B}\hat{A}\psi = ab\psi$$
$$\hat{A}\hat{B}\psi = ba\psi$$
$$\hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = b\ \ \psi - ab\psi$$
$$\left[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right]\psi = \left[ba - ab\right]\psi$$
$$\left[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right]\psi = \left[0\right]\psi \qquad (5\text{-}4)$$
$$\left[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right]\psi = 0$$

وكون الدالة الموجية لا تساوي الصفر ، فالقوس يساوي الصفر أي:

$$\left[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right] = 0 \qquad (5\text{-}5)$$

**ويسمى بقوس التبادل في ميكانيكا الكم**

وهذه من أهم العلاقات في ميكانيكا الكم فلكي نلاحظ أو نقيس مقدارين فيزيائيين في آن واحد يكفي أن نثبت أن قوس التبادل للمؤثرين يساوي الصفر أو أن المؤثرين تبادليين ، وإذا كان قوس التبادل لا يساوي

الصفر فذلك يعني أننا لا نستطيع قياس المقدارين الفيزيائيين في أن واحد (مبدأ اللاتحديد أو الشك لهايزنبرغ)، وعموما يكتب قوس التبادل على النحو التالي:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \tag{5-6}$$

وهذه بعض العلاقات المفيدة للمبادلات:

$$[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{B},\hat{A}]=0$$

$$[\hat{A},\hat{A}]=0$$

$$[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$$

$$[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$$

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$$

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}+\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]$$

$$\left[A_1A_2,B_1B_2\right]=B_1\left[A_1A_2,B_2\right]+\left[A_1A_2,B_2\right]B_2$$

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]=0$$

$$[\hat{A},\hat{B}^n]=n\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$$

$$[\hat{A}^n,\hat{B}]=n\hat{A}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}] \tag{5-7}$$

## أمثلة:

$$[x,p^2] = [x,p]p + p[x,p] = i\hbar p + i\hbar p = 2i\hbar p$$

If you prefer to do it the long way around, you'll get the same answer:

$$\begin{aligned}[x,p^2]f(x) &= -\hbar^2 x\frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar^2\frac{d^2}{dx^2}(xf) \\ &= -\hbar^2 x\frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar^2\frac{d}{dx}\left(x\frac{df}{dx}+f\right) \\ &= -\hbar^2 x\frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar^2 x\frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar^2\frac{df}{dx} + \hbar^2\frac{df}{dx} \\ &= 2\hbar^2\frac{df}{dx} = 2i\hbar\left(-i\hbar\frac{df}{dx}\right) = 2i\hbar p f(x)\end{aligned}$$

and therefore

$$[x,p^2] = 2i\hbar p$$

$$[2x^3,p] = 2[x^3,p]$$

(If you don't believe me you can leave it in, but you'll get the same answer.) If we let this commutator act on a test function $f(x)$, we get

$$\begin{aligned}[2x^3,p]f(x) &= 2\left(-i\hbar x^3\frac{df}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}(x^3 f)\right) \\ &= 2\left(-i\hbar x^3\frac{df}{dx} + i\hbar x^3\frac{df}{dx} + 3i\hbar x^2 f\right) \\ &= 6i\hbar x^2 f(x)\end{aligned}$$

and so, if we lose the test function, we find

$$[2x^3,p] = 6i\hbar x^2$$

**تمرين:**

$$\left[x^n, p_x\right] f(x) = -i\hbar x^n \frac{df(x)}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx} x^n f(x)$$

$$\left[x^n, p_x\right] f(x) = -i\hbar x^n \frac{df(x)}{dx} + i\hbar n x^{n-1} f(x) + i\hbar x^n \frac{df(x)}{dx}$$

$$\left[x^n, p_x\right] f(x) = i\hbar n x^{n-1} f(x)$$

**تمرين:**

$$\left[p_x, x^n\right] f(x) = p_x x^n f(x) - x^n p_x f(x)$$

$$\left[p_x, x^n\right] f(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} x^n f(x) + i\hbar x^n \frac{df(x)}{dx}$$

$$\left[p_x, x^n\right] f(x) = -i\hbar n x^{n-1} f(x) - i\hbar x^n \frac{df(x)}{dx} + i\hbar x^n \frac{df(x)}{dx}$$

$$\left[p_x, x^n\right] f(x) = -i\hbar n x^{n-1} f(x)$$

**ويمكن حل ما سبق بالاستفادة من العلاقتين:**

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$$

**نجد**

$$\left[\hat{x},\hat{p}^{n}\right]=np^{n-1}\left[\hat{x},\hat{p}\right]=i\hbar n\hat{p}^{n-1}$$

$$\left[\hat{p},\hat{x}^{n}\right]=nx^{n-1}\left[\hat{p},\hat{x}\right]=-i\hbar n\hat{x}^{n-1}$$

$$\left[f(x),\hat{p}\right]=i\hbar\frac{\partial}{\partial x}f(x)$$

**تمارين هامة:**

$$\left[\hat{x}^{2},\hat{p}_{x}\right]=i2\hbar\hat{x}$$

$$\left[\hat{p},\hat{p}^{2}\right]=0$$

$$\left[\hat{x},\hat{p}_{x}^{2}\right]=2i\hbar\hat{p}$$

$$\left[f\left(\hat{A}\right),\hat{A}\right]=0$$

$$\left[e^{\hat{p}},\hat{p}\right]=\left[\sum\frac{\hat{p}^{n}}{n!},\hat{p}\right]=0$$

$$e^{\hat{p}}=1+\hat{p}+\frac{\hat{p}^{2}}{2!}+.....$$

**مثال:**

إذا كانت الدالة الموجية لجسيم حر طليق تعطى بالعلاقة التالية:

$$\psi=Ae^{ikx}$$

بين أنها دالة خاصة(مسموحة) لكل من مؤثري الهاملتوني وكمية الحركة.

أولا يجب إثبات أن:

$$\left[\hat{P},\hat{H}\right]=0$$
$$where \quad V(x)=0$$

ثانيا: إثبات أن:

$$\hat{P}\psi = p\psi = \hbar k\,\psi$$
$$\hat{H}\psi = \frac{\hat{P}^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{dx^2}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E\psi$$

## 6- شرط التنظيم(المعايرة) (normalization) والتعامد(orthogonality)

## Orthonormalization condition:

نتطرق بداية إلى احتمال تواجد الجسيم في مكان ما (dv)من الفضاء المد روس كدالة للدالة الموجية ويعطى بالعلاقة التالية:

$$dp = \left|\psi(r,t)\right|^2 dv = \psi^*(r,t)\psi(r,t)dv \qquad \textbf{(6-1)}$$

حيث dp يعطي احتمال تواجد الإلكترون في الحجم dv ويأخذ دوما قيما حقيقية، هذا وان احتمال تواجد الجسيم في كامل الفضاء المدروس يفرض تكامل العلاقة السابقة فنجد:

$$p = \int_{-\infty}^{+\infty} dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(r,t)\right|^2 dv = 1 \qquad \textbf{(6-2)}$$

تبين العلاقة أن احتمال تواجد الجسيم في الفضاء كله يساوي 100%=1 والعلاقة التي تحقق الشرط السابق تسمى بعلاقة التنظيم(المعايرة).

وفي حال كون الدالة منظمة(معايرة) فان شرطي التنظيم والتعامد يعطيا وفق العلاقة:

$$\int \psi_n \psi_m dv = \delta_{nm}$$
$$when \quad n = m \Rightarrow \int \psi_n \psi_m dv = \delta_{nm} = 1 \qquad \textbf{(6-3)}$$
$$when \quad n \neq m \Rightarrow \int \psi_n \psi_m dv = \delta_{nm} = 0$$

وفي حال عدم تحقق شرط المعايرة نضرب التكامل بثابت ما بحيث يتحقق شرط المعايرة أي:

$$A^2 \int \psi_n \psi_m dv = \delta_{nm}$$
$$when \quad n = m \Rightarrow A^2 \int \psi_n \psi_m dv = \delta_{nm} = 1 \qquad \textbf{(6-4)}$$
$$when \quad n \neq m \Rightarrow A^2 \int \psi_n \psi_m dv = \delta_{nm} = 0$$

في كثير من الأحيان يكون لدينا مجموعة من الدوال الخاصة لمؤثر ما بحيث تتحقق العلاقة:

$$\hat{A} u_n = a_n u_n \qquad (6\text{-}5)$$

وفي مثل هذه الحالة يمكن استعمال منشور دالة ما بحيث تحقق الشرط:

$$\psi(r) = \sum_i b_i u_i(r) \qquad (6\text{-}6)$$

حيث $b_i$ معامل النشر ويمكن الحصول علية من ضرب العلاقة السابقة من الطرفين بمرافق الدالة المميزة $u_n$ ثم المكاملة وفق العلاقة التالية:

$$\int u_n^*(r)\psi(r)dv = \sum_i b_i \int u_n^* u_i(r)dv = \sum_i b_i \delta_{ni} = b_n \qquad (6\text{-}7)$$

إن احتمال الحصول على القيم الخاصة $a_n$ للمؤثر المدروس تعطى بالعلاقة:

$$p(a_n) = \left| \int u_n^*(r)\psi(r)dv \right|^2 = \left| \sum_i b_i \int u_n^* u_i(r)dv \right|^2 = \left| \sum_i b_i \delta_{ni} \right|^2 = b_n^2$$
(6-8)

أي مربع معامل النشر يعطينا الاحتمال لكي نحصل على القيمة الخاصة وهي علاقة مهمة جدا في حال حساب القيمة المتوقعة لمقدار فيزيائي يخضع للشروط السابقة.

**أمثلة:** جسيم داخل بئر جهد لانهائي عرضه a له الدالة التالية المستقلة عن الزمن والغير معايرة:

$$\psi(x)=A\sin\frac{\pi n}{a}x$$

أوجد ثابت المعايرة A. علما أن:

$$\sin^2\theta=\frac{1-\cos 2\theta}{2}$$
$$\cos^2\theta=\frac{1+\cos 2\theta}{2}$$

الحل باستخدام شرط التنظيم(المعايرة) تابع الحل:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx=\int_0^a \left|A\sin\frac{\pi n}{a}x\right|^2 dx=1\Rightarrow$$

$$A^2\int_0^a \sin^2\frac{\pi n}{a}x\,.dx=A^2\int_0^a\left(\frac{1-\cos\frac{2\pi n}{a}x}{2}\right)dx=1$$

$$A^2\left(\int_0^a \frac{1}{2}dx\right)-\int_0^a \frac{\cos\frac{2\pi n}{a}x}{2}dx=1$$

$$A^2.\frac{a}{2}-0=1\Rightarrow A^2=\frac{2}{a}\Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$then \qquad \psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}x$$

وهذه الدالة الأخيرة معايرة جرب بنفسك بتطبيق علاقة المعايرة من جديد

**مثال:**

جسم محدد بالفضاء(∞-> x>∞) وموصوف بدالة الموجة

$$\psi(x,t)=A\,\mathrm{e}^{-x^2}e^{i(kx-\omega t)}$$

**1**-ثابت المعايرة(A)

2-الاحتمالية الكلية لإيجاد جسيم في أي موضع بين (-∞,∞) . إذا علمت أن :

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

أولا ثابت المعايرةA:شرط المعايرة تكامل مربع الدالة يساوي الواحد ومنه

$$\Psi(\mathbf{x},\mathbf{t}) = \mathbf{A}\mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \mathbf{A}\mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} \right|^2 dx = 1$$

$$\mathbf{A}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} \right|^2 dx = 1$$

$$\mathbf{A}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} \left\{ e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} \right\} \right|^2 dx = 1$$

$$2\mathbf{A}^2 \int_{0}^{+\infty} \mathbf{e}^{-2\mathbf{x}^2} \left| \left\{ e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} \right\} \right|^2 dx = 1$$

$$2\mathbf{A}^2 \int_{0}^{+\infty} \mathbf{e}^{-2\mathbf{x}^2} \left| \left\{ e^{-i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} . e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} \right\} \right| dx = 1$$

$$2\mathbf{A}^2 \left( \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \right) = 1 \Rightarrow A^2 = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} \Rightarrow A = \sqrt{\sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1}}$$

ثانيا: احتمال تواجد الجسيم في الفاصل (x , x+dx):

$$dp = \left|\psi(r,t)\right|^2 dv = \psi^*(r,t)\psi(r,t)dv$$

$$dp = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} \left|\mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})}\right|^2 dx$$

$$dp = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} e^{-2x^2} dx$$

ثالثا: الاحتمالية الكلية:

$$p = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\sqrt{\sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1}} \mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})}\right|^2 dx$$

$$p = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\mathbf{e}^{-\mathbf{x}^2} e^{i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})}\right|^2 dx$$

$$p = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{e}^{-2\mathbf{x}^2} e^{\pm i(\mathbf{kx}-\mathbf{wt})} dx$$

$$p = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{e}^{-2\mathbf{x}^2} dx$$

$$p = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} 2\int_{0}^{+\infty} \mathbf{e}^{-2\mathbf{x}^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}^{-1} 2.\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} = 1$$

**حل المثال التالي:**

جسيم موجود في المجال $-a \le x \le a$ أوجد ثابت التنظيم لدالته الموجية التالية:

$$\psi(x) = A\cos\frac{\pi}{2a}x$$

في كثير من الحالات نلجأ إلى ما يسمى بكثافة الاحتمال والتي تعطى بالعلاقة التالية:

$$\rho(r,t) = \frac{\left|\psi(r,t)\right|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(r,t)\psi(r,t)d\ v}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(r,t)dv = 1$$

## 7-القيمة المتوقعة the expectation value :

في ميكانيكا الكم كل المعلومات حول الجسيم المدروس تكون محتواة في لدالة الموجية ،ومنها احتمال تواجد الجسيم في مكان ما خلال زمن ما،القيم المتوقعة للمقدار الفيزيائي(المتحول الديناميكي) عنوان هذه الفقرة.

كلاسيكيا لحساب القيمة المتوقعة لمشاهدة ما ولتكن الموضع ،يفترض أن الجملة المدروسة مؤلفة من **N** جسيم منها $N_i$ جسيم موجود في الموقع $X_i$ ،فالقيمة الوسطية لموقع الجسيم تعطى بالعلاقة التالية:

$$\bar{X} = \frac{N_1X_1 + N_2X_2 + \ldots\ldots + N_mX_m}{N_1 + N_2 + \ldots\ldots + N_m}$$

$$\bar{X} = \frac{\sum_i N_iX_i}{\sum_i N_i} \qquad (7\text{-}1)$$

**وكميا من أجل جسيم واحد** فان تواجد الجسيم في الموضع $X_i$ سيكون باحتمال $p_i$ والقيمة المتوقعة لموضع الجسيم هو:

$$\bar{X} = \frac{p_1 x_1 + p_2 x_2 + \dots + p_m x_m}{p_1 + p_2 + \dots + p_m} = \frac{\sum_i p_i x_i}{\sum_i p_i} \qquad (7\text{-}2)$$

حيث الاحتمال يعطى بالعلاقة التالية:

$$p_i = |\psi_i|^2 dx \qquad (7\text{-}3)$$

وفي حال كون الجملة مستمرة يحول المجموع السابق إلى تكامل:

$$\bar{x} = \frac{\int x \, |\psi|^2 dx}{\int |\psi|^2 dx} = \langle x \rangle \qquad (7\text{-}4)$$

وعندما تكون الدالة الموجية معايرة ودالة خاصة للمؤثر $\hat{A}$، عندئذ تكون معادلة القيم الذاتية للمقدار الفيزيائي كما سبق وأعطيت كالتالي :

$$\hat{A}\psi(r) = a\psi(r) \qquad (7\text{-}5)$$

**إن القيمة الخاصة a للمؤثر هي ما نقصد به القيمة المتوقعة لحالة نقية** ويمكن استنتاجها بضرب العلاقة السابقة من الطرفين ومن اليسار بمرافق الدالة الموجية ثم المكاملة على كامل الفضاء فنجد:

$$\int \psi^*(r)\hat{A}\psi(r)dv = \int \psi^*(r)a\psi(r)dv = a$$

$$then \quad \langle A \rangle = \int \psi^*(r)\hat{A}\psi(r)dv = a \qquad (7\text{-}6)$$

وهي علاقة القيمة المتوقعة أو القيمة الوسطى للمقدار الفيزيائي المدروس وفي حال كون الدالة الموجية

عبارة عن تركيب خطي لعدة دوال خاصة فإننا نكتب العبارة العامة للقيمة المتوقعة لأي مقدار فيزيائي بالشكل التالي:

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \psi dv}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dv} \qquad (7\text{-}7)$$

وإذا كانت الدالة ψ منظمة(معايرة) فان التكامل في مقام العلاقة السابقة يساوي الواحد(شرط التنظيم). وتعود العلاقة إلى معادلة القيم المميزة(الخاصة).

## 8- مبدأ تراكب الحالات combination of eigenstates :

نعود إلى مسألة كون الدالة الموجية كتركيب خطي لعدة دوال خاصة لمؤثر ما ولنحاول إيجاد القيمة المتوقعة للمقدار المدروس،تعطى الدالة الموجية في هذه الحالة بالعلاقة:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots\ldots + c_i\psi_i = \sum_{i=1}^{N} c_i\psi_i \qquad (8\text{-}1)$$

ولنحسب القيمة المتوقعة لمتحول ديناميكي(مقدار فيزيائي) من علاقة القيم المتوقعة ونعتبر الدالة معايرة فنجد :

$$\langle A\rangle = \int \psi^* \hat{A}\psi dv$$

$$\langle A\rangle = \int \left[\sum_{i=1}^{N} c_i \psi_i\right]^* \hat{A}\left[\sum_{j=1}^{N} c_j \psi_j\right] dv$$

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i^* \sum_{j=1}^{N} c_j \int \psi_i^* \hat{A}\psi_j dv$$

$$c_i^* = c_i$$

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i \sum_{j=1}^{N} c_j \int \psi_i^* a_j \psi_j dv$$

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} c_i c_j a_j \int \psi_i^* \psi_j dv$$

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} c_i c_j a_j \delta_{ij}$$

$$when \quad i = j$$

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i^2 a_i \qquad (8\text{-}2)$$

لاحظ أن القيمة المتوقعة لكل حالة ترتبط ألان بالاحتمال الذي درسناه سابقا في العلاقة:

$$p(a_n) = \left|\int u_n^*(r)\psi(r)dv\right|^2 = \left|\sum_i b_i \int u_n^* u_i(r)dv\right|^2 = \left|\sum_i b_i \delta_{ni}\right|^2 = b_n^2$$

(8-3)

أي أن احتمال الحصول على القيمة $a_i$ يكون باحتمال مساوي إلى $c_i^2$ .

**مثال:**

لديك دالة موجية خاصة لمؤثر ما تعطى بالعلاقة التالية:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_3\psi_3$$

أوجد القيمة المتوقعة للمقدار المدروس.

في الحالة العامة تعطى القيمة المتوقعة بالعلاقة التالية:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N} c_i^2 a_i}{\sum_{i=1}^{N} c_i^2} = \frac{c_1^2 a_1 + c_3^2 a_3}{c_1^2 + c_3^2}$$

$$\langle A \rangle = \frac{c_1^2 a_1}{c_1^2 + c_3^2} + \frac{c_3^2 a_3}{c_1^2 + c_3^2}$$

$$where \qquad p = \sum_i c_i^2 = c_1^2 + c_3^2 = 1$$

$$\langle A \rangle = c_1^2 a_1 + c_3^2 a_3$$

فلو كان المقدار هو الطاقة سيكون لدينا مستويي طاقة أحدهما $a_1=E_1$ والأخر $a_3=E_3$

القيمة المتوقعة الأولى ستكون باحتمال $c_1^2$ والثانية باحتمال $c_3^2$ وبشكل عام يكون احتمال أي قياس مفرد معطى بالعلاقة:

$$p_i = \frac{|c_i|^2}{\sum_i c_i^2}$$

**مثال:** جسيم داخل صندوق ذي جدران صلبة ،ندرس الجسيم في حالة البعد الواحد x فيكون عرض الصندوق a ،فإذا كانت الدالة الموجية التي تصف الجسيم عند اللحظة t=0 هي:

$$\psi(x,0) = \frac{3\phi_2 + 4\phi_9}{\sqrt{25}}$$

بين ما يلي:

1 -هل الدالة عياريه؟

2 -أوجد قيم الطاقة التي يمكن الحصول عليها وبأي احتمال نجد كل من هذه القيم؟

الحل:

1 - الطلب الأول

$$\int \psi^* \psi dx = \int \left( \frac{3\phi_2 + 4\phi_9}{\sqrt{25}} \right) \left( \frac{3\phi_2 + 4\phi_9}{\sqrt{25}} \right) dx$$

$$\int \psi^* \psi dx = \int \frac{9\phi_2\phi_2}{25} dx + \int \frac{12\phi_2\phi_9}{25} dx + \int \frac{12\phi_9\phi_2}{25} + \int \frac{16\phi_9\phi_9}{25}$$

$$\int \psi^* \psi dx = \frac{9}{25} + \frac{16}{25} = \frac{25}{25} = 1$$

2 - الطلب الثاني

$$c_i = 0 \quad except \quad i = 2,9 \neq 0 \Leftrightarrow c_2 = \frac{3}{\sqrt{25}}, c_9 = \frac{4}{\sqrt{25}}$$

$$p_i = \frac{|c_i|^2}{\sum_i c_i^2} \Rightarrow \sum_i c_i^2 = c_2^2 + c_9^2 = \frac{9}{25} + \frac{16}{25} = 1 \Rightarrow$$

$$p_i = |c_i|^2$$

$$p_2(E_2) = c_2^2 = \frac{9}{25}$$

$$p_9(E_9) = c_9^2 = \frac{16}{25}$$

$$p_{i \neq 2,9}(E_{i \neq 2,9}) = 0$$

القيم المتوقعة للطاقة:

$$\langle E \rangle = c_2^2 E_2 + c_9^2 E_9$$

$$\langle E \rangle = \frac{9}{25} E_2 + \frac{16}{25} E_9$$

إن هذا الجسيم لديه احتمالان للتواجد إما في المستوي الطاقي الثاني وباحتمال 9\25 = 36%أو في المستوي الطاقي التاسع وباحتمال 16\25=64%، وبمعنى آخر لو كان لدينا 25 صندوق كل منها

يحوي جسيم في نفس الشروط السابقة تماما فان 9 جسيمات ستشغل المستوي الطاقي الثاني ،و 16 جسيم ستشغل المستوي التاسع.

**مثال:**

أوجد القيمة المتوقعة لكمية حركة الجسيم على المحور x .

$$\left\langle p_x \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$$

$$\left\langle p_x \right\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx$$

$$\left\langle p_x \right\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} A e^{i(k_x x - \omega t)} dx$$

$$\left\langle p_x \right\rangle = -i\hbar . ik_x \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \hbar k_x$$

**مثال** :أوجد القيمة المتوقعة للطاقة؟

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

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

$$\left\langle E \right\rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial t} A e^{i(k_x x - \omega t)} dx$$

$$\left\langle E \right\rangle = i\hbar . -i\omega \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \hbar \omega$$

- أوجد القيمة المتوقعة لكل من $\hat{p}^2, \hat{H}$ ؟

يرتبط عدم التعيين (اللاتحديد)في موقع الجسيم ($\Delta x$) وكمية حركته ( $\Delta p_x$) بالقيم المتوقعة مباشرة فوفقا لقياسات الخطأ المطلق في التجارب فان الخطأ المرتكب في قياس ما يعطى وفقا للعلاقات التالية:

إن الشك في قياس A و B يحدد كما يلي:

$$\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \Rightarrow \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

$$\Delta B^2 = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 \Rightarrow \Delta B = \sqrt{\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2}$$

عندئذ الشك في قياس المقدارين يحدد بالعلاقة التالية:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} | < C > |$$

وهذه هي علاقة مبدأ الشك الشهيرة لهايزنبرغ والتي يمكن اشتقاقها من أجل الموضع وكمية الحركة مثلا (راجع ميكانيكا الكم 1)

$$\Delta p_x \, \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

**<u>مثال:</u>**

إذا علمت أن الدالة الموجية لجسيم

$$\psi = A e^{i(k_x x - \omega t)}$$

بين أن مقدار اللاتحديد في موقع الجسيم يساوي لانهاية($\infty$)

الحل :لقد وجدنا في تمرين سابق أن :

$$\langle p_x \rangle = \hbar k_x \Rightarrow \langle p_x \rangle^2 = \hbar^2 k_x^2$$

وكذلك نجد أن :

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi dx$$

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi dx$$

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} A e^{i(k_x x - \omega t)} dx$$

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = -\hbar^2 . -k_x^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \hbar^2 k_x^2$$

وبتطبيق علاقة اللاتحديد في قياس كمية الحركة نجد:

$$\Delta p_x = \sqrt{\left\langle p_x^2 \right\rangle - \left\langle p_x \right\rangle^2} = \sqrt{\hbar^2 k_x^2 - \hbar^2 k_x^2} = 0$$

$$\Delta p_x . \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar}{0} = \infty$$

## 9- المؤثرات الهرميتيةHermitian Operators :

كل المشاهدات الفيزيائية تمثل بواسطة القيم المتوقعة، وقيمة المشاهدة الفيزيائية يجب أن تكون حقيقية (الطاقة ،كمية الحركة, الكثافة،.......) وهذا يعني أن العلاقة التالية يجب أن تكون محققة:

$$\left\langle A \right\rangle = \left\langle A \right\rangle^*$$

$$\int \psi^* \hat{A} \psi dx = \int \left( \hat{A}\psi \right)^* \psi dx = \left[ \int \left( \hat{A}\psi \right) \psi^* dx \right]^* \quad (9\text{-}1)$$

والمؤثر الذي يحقق هذا الشرط يسمى هرميتي والذي يجب علية أن يحقق العلاقة التالية:

$$\langle A\rangle = \int \psi^* \hat{A}\psi dv = \int \left(\hat{A}\psi\right)^* \psi dv = \langle A\rangle^*$$
$$\langle A\rangle = \int \psi^* a\psi dv = \int (a\psi)^* \psi dv = \int a^*\psi^*\psi dv = \langle A\rangle^*$$
$$\langle A\rangle = a\int \psi^*\psi dv = a^*\int \psi^*\psi dv = \langle A\rangle^* \qquad (9\text{-}2)$$
$$\langle A\rangle = a = a^* = \langle A\rangle^*$$

وفي حال وجود دالتين لهما المؤثر نفسه فإننا نجد حالتين تحققان:

أولا شرط التعامد:

$$\int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 dv = \int \left(\hat{A}\psi_1\right)^* \psi_2 dv$$
$$\int \psi_1^* a_2\psi_2 dv = \int (a_1\psi_1)^* \psi_2 dv$$
$$a_2\int \psi_1^*\psi_2 dv - a_1^*\int \psi_1^*\psi_2 dv = 0$$
$$\left(a_2 - a_1^*\right)\int \psi_1^*\psi_2 dv = \left(a_2 - a_1^*\right)\delta_{12} = 0$$
$$when \quad i \neq j \Rightarrow \delta_{12} = 0 \qquad (9\text{-}3)$$
$$then \ \left(a_2 - a_1^*\right) = (a_2 - a_1) \neq 0$$
$$\Rightarrow \int \psi_1^*\psi_2 dv = \delta_{12} = 0$$

وهو شرط التعامد من شرط الهرميتية

ثانيا شرط التنظيم:

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dv = \int \left( \hat{A} \psi_1 \right)^* \psi_2 dv$$

$$\int \psi_1^* a_2 \psi_2 dv = \int \left( a_1 \psi_1 \right)^* \psi_2 dv$$

$$a_2 \int \psi_1^* \psi_2 dv - a_1^* \int \psi_1^* \psi_2 dv = 0$$

$$\left( a_2 - a_1^* \right) \int \psi_1^* \psi_2 dv = \left( a_2 - a_1^* \right) \delta_{12} = 0$$

$$when \quad i = j \Rightarrow \delta_{12} = 1$$

$$then \left( a_2 - a_1^* \right) = \left( a_2 - a_1 \right) = 0 \qquad (9\text{-}4)$$

$$\Rightarrow a_1 = a_2 = a$$

$$\Rightarrow \int \psi_1^* \psi_2 dv = \delta_{12} = \delta_{11} = 1$$

وهو شرط التنظيم من شرط الهرميتية

تمرين: أثبت أن كافة المؤثرات الفيزيائية هرميتية

## 10- اصطلاح (رموز)ديراك Dirac notations :

تابع المقارنة من خلال العلاقات التالية:

$$\int \psi^* \psi dv \equiv \langle \psi \mid \psi \rangle \Leftrightarrow bracket$$

$$\psi \rightarrow \mid \psi \rangle \leftarrow ket$$

$$\psi^* \rightarrow \langle \psi \mid \leftarrow bra$$

$$\hat{A}\psi \rightarrow \hat{A} \mid \psi \rangle = a \mid \psi \rangle$$

$$\hat{A}^* \psi^* \rightarrow \langle \hat{A}\psi \mid = a^* \langle \psi \mid$$

$$\int f^* \hat{A} g dv \rightarrow \langle f \mid \hat{A} \mid g \rangle \equiv \langle f \mid \hat{A} g \rangle$$

$$\int u_n^* u_m dv = \delta_{nm} \rightarrow \langle u_n \mid u_m \rangle \equiv \langle n \mid m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\sum_n \mid n \rangle \langle n \mid = \hat{I} \qquad (10\text{-}1)$$

## 11- مؤثرات الترافق الهرميتيHermitian adjoint operators :

ليكن لدينا مؤثر هرميتي $\hat{A}$ ، يوجد مؤثر آخر $\hat{B}$يسمى المرافق الهرميتي للمؤثر $\hat{A}$يحقق العلاقة التالية:

$$\int f^{*}\hat{A}g\,dv = \int \left[\hat{B}f\right]^{*} g\,dv \qquad (11\text{-}1)$$

ويمكن كتابة ذلك بين المؤثرين بالعلاقة:

$$\begin{aligned} &\hat{B} = \hat{A}^{\dagger} \qquad (pronounce - 'A - dagger' \Rightarrow \\ &\int f^{*}\hat{A}g\,dv = \int \left[\hat{A}^{\dagger}f\right]^{*} g\,dv \Rightarrow \\ &\hat{A} = \hat{A}^{\dagger} \end{aligned} \qquad (11\text{-}2)$$

يمكن كتابة ما سبق بلغة رموز ديراك كما يلي :

$$\begin{aligned} &\langle f \mid \hat{A}g \rangle \equiv \langle f \mid \hat{A} \mid g \rangle = \langle \hat{B}f \mid g \rangle \Rightarrow \\ &\langle f \mid \hat{A} \mid g \rangle = \langle \hat{A}^{\dagger}f \mid g \rangle \\ &if \qquad \hat{A} = \hat{B}^{\dagger} \Leftrightarrow = \hat{B} \Rightarrow \hat{A}^{\dagger} \\ &\left(\hat{A}^{\dagger}\right)^{\dagger} = \hat{A} \end{aligned} \qquad (11\text{-}3)$$

## 12- معادلة شرودينجر المعتمدة على الزمن

: The time dependent Schroedinger equation and stationary states.

تعطى معادلة شرودينجر المعتمدة على الموضع والزمن بالعلاقة التالية:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = E\psi(r,t)$$

$$if \qquad \psi(r,t) = \psi(r)\phi(t) \Rightarrow$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\psi(r)\phi(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r)\phi(t) = E\psi(r)\phi(t)$$

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

$$\psi(r)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t) = E\psi(r)\phi(t$$

$$\frac{\psi(r)}{\psi(r)\phi(t}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t) = E$$

$$\frac{1}{\phi(t)}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t) = E$$

**(12-1)**

والمعادلة الأخيرة هي معادلة شرودينجر المعتمدة على الزمن فقط وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الأولى يمكن حلها كما يلي:

$$\frac{1}{\phi(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(t) = E$$

$$\frac{\partial}{\phi(t)} \phi(t) = \frac{1}{i\hbar} E \partial t = -\frac{i}{\hbar} E \partial t$$

$$\phi(t) = \phi(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$if \ \ \phi(0) = 1 \Rightarrow \phi(t) = \phi(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \textbf{(12-2)}$$

$$then \qquad \psi(r,t) = \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

العلاقة الأخيرة تعطي الدالة الموجية العامة كدالة للموضع والزمن ،وإذا كانت الدالة التابعة للموضع تركيب خطي لدوال خاصة يمكن كتابة الدالة بالشكل التالي:

$$\psi(r,t) = \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\psi(r,t) = \sum_n a_n u_n(r) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$where \qquad \hat{\mathrm{H}} u_n(r) = E_n u_n(r) \qquad \textbf{(12-3)}$$

$$\Rightarrow \ p_n = \left| \left\langle \psi(t) \middle| u_n \right\rangle \right|^2 = \left| a_n \right|^2$$

**وفي مثالنا** السابق $\psi(x,0) = \dfrac{3\phi_2 + 4\phi_9}{\sqrt{25}}$

فان الدالة الموجية العامة للجسيم تصبح عندئذ:

$$\psi(x,0) = \frac{3\phi_2 + 4\phi_9}{\sqrt{25}}$$

$$\psi(r,t) = \psi(r)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\psi(r,t) = \left(\frac{3\phi_2 + 4\phi_9}{\sqrt{25}}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\psi(r,t) = \frac{3\phi_2}{\sqrt{25}}e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + \frac{4\phi_9}{\sqrt{25}}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$when \qquad E_n = n^2c^2 = n^2E_1 \Rightarrow$$

$$E_2 = 4E_1, E_9 = 81E_1$$

## 13- القيمة المتوقعة للمؤثر expectation values of operators :

في كثير من الحالات نحتاج لتفاضل القيمة المتوقعة بالنسبة للزمن وهذا بالطبع يشمل المؤثر المدروس وذلك لإثبات بعض النتائج المهمة في ميكانيكا الكم ،ويتم ذلك وفق الخطوات التالية:

$$\langle A\rangle = \int \psi^*\hat{A}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}\int \psi^*\hat{A}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \int\left(\frac{d\psi^*}{dt}\hat{A}\psi dv + \psi^*\frac{d\hat{A}}{dt}\psi + \int \psi^*\hat{A}\frac{d\psi}{dt}\right)dv$$

$$\hat{\mathrm{H}}\psi = \hat{E}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{\mathrm{H}}\psi \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathrm{H}}\psi$$

$$and \qquad \frac{\partial}{\partial t}\psi^* = \frac{-1}{i\hbar}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^*$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \int\left(\psi^*\frac{d\hat{A}}{dt}\psi + \frac{-1}{i\hbar}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^*\hat{A}\psi + \int \psi^*\hat{A}\frac{1}{i\hbar}\hat{\mathrm{H}}\psi\right)dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^*\hat{A}\hat{\mathrm{H}}\psi - \left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^*\hat{A}\psi\right)dv + \int \psi^*\frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$where \qquad \int\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^*\hat{A}\psi dv = \int \psi^*\left(\hat{\mathrm{H}}\hat{A}\psi\right)dv$$

$$then \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^*\hat{A}\hat{\mathrm{H}}\psi - \psi^*\hat{\mathrm{H}}\hat{A}\psi\right)dv + \int \psi^*\frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^*\left[\hat{A}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{A}\right]\psi\right)dv + \int \psi^*\frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^*\left[\hat{A},\hat{\mathrm{H}}\right]\psi\right)dv + \int \psi^*\frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{\mathrm{H}}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{A}\right]$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{A}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{d\hat{A}}{dt}\right\rangle \qquad (13\text{-}1)$$

والعلاقة الأخيرة تبين القيمة المتوقعة للمؤثر إذا كان يتبع الزمن صراحة وإلا فان قيمته تساوي الصفر وتؤول العلاقة الأخيرة إلى العلاقة التالية:

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle = 0$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{A}\right]\right\rangle \qquad (13\text{-}2)$$

وعندما تكون القيمة المتوقعة غير تابعة للزمن عندها العلاقة السابقة تساوي الصفر وتكون القيمة المتوقعة ثابت من ثوابت الحركة.

## 14- مبدأ ايرنفست ehrenfest's (theorem)principal :

تهدف هذه النظرية إلى اختزال معادلات ميكانيكا الكم إلى شكلها التقليدي (الكلاسيكي) إذا استبدلنا القيم المتوقعة التي تخص مؤثر ما في ميكانيكا الكم بما يقابلها في الميكانيكا التقليدي.مثلا لدينا العلاقات الكلاسيكية التالية:

$$m\frac{dr}{dt} = p$$

$$\frac{dp}{dt} = -\nabla v$$

$$v(r) = \text{potential energy} \qquad (14\text{-}1)$$

هل يمكن الحصول عليها من القيم المتوقعة في ميكانيكا الكم؟

من العلاقة الأولى نجد:

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

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{x}\right]\right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(r),\hat{x}\right]\right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2,\hat{x}\right] + [v(r),\hat{x}]\right\rangle$$

$$[v(r),\hat{x}] = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2,\hat{x}\right]\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{\hat{p}^2}{2m},\hat{x}\right]\right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\left\langle\left[\hat{p}^2,\hat{x}\right]\right\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\left\langle\hat{p}\,[\hat{p},\hat{x}] + [\hat{p},\hat{x}]\,\hat{p}\right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\left\langle(\hat{p})\right\rangle = \frac{i}{2m\hbar}(-2i\hbar)\,p_x = \frac{p_x}{m} \Rightarrow$$

$$p_x = m\,\frac{d}{dt}\langle x\rangle = m\,\frac{dx}{dt} \qquad (14\text{-}2)$$

وهو المطلوب إثباته

من العلاقة الثانية نجد:

$$\frac{dp}{dt} = -\nabla v$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{p}_x\right]\right\rangle$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(x), -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\right\rangle$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \left\langle\left[v(x),\frac{\partial}{\partial x}\right]\right\rangle$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \int\left[\psi^*\left(v(x)\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}(v(x)\psi)\right]dv \qquad (14\text{-}3)$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = -\int\psi^*\frac{\partial v(x)}{\partial x}\psi dv = -\left\langle\frac{\partial v(x)}{\partial x}\right\rangle$$

$$where \qquad \left[\nabla^2,\frac{\partial}{\partial x}\right] = 0$$

وهو المطلوب إثباته

## 15- ملحق

### تيار الاحتمال

### Probability current.

Probability current :

Probability interpretation for the particle wave function: modulus square of it is a probability to find a particle in a given place (probability density).

THUS: Integral over space has to give 1. However locally spacial probability density can change with time. We can define the probability current, useful when discussing movement of particles

$$\frac{\partial \rho(\vec{r},t)}{\partial t}=\frac{\partial \Psi^*\Psi}{\partial t}=\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}=i\frac{\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*)=-i\frac{\hbar}{2m}\nabla(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)$$

change of probability density with time (at a given place) is related to the out-flow of the current.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=-i\frac{\hbar}{2m}\nabla(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)=-\nabla\vec{j}$$

$$\vec{j}=i\frac{\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)=\Re(\Psi^* i\frac{\hbar}{m}\nabla\Psi)$$

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]\Psi \qquad i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]\Psi^*$$

## Unitary Operators

A linear operator whose inverse is its adjoint is called *unitary*. These operators can be thought of as generalizations of complex numbers whose absolue value is 1.

$$U^{-1}=U^\dagger \tag{63}$$

$$UU^\dagger=U^\dagger U=I$$

A unitary operator preserves the ``lengths'' and ``angles'' between vectors, and it can be considered as a type of rotation operator in abstract vector space. Like Hermitian operators, the eigenvectors of a unitary matrix are orthogonal. However, its eigenvalues are not necessarily real.

---

## Postulates of Quantum Mechanics

In this section, we will present six postulates of quantum mechanics. Again, we follow the presentation of McQuarrie [1], with the exception of postulate 6, which McQuarrie does not include. A few of the postulates have already been discussed in section 3.

**Postulate 1**. The state of a quantum mechanical system is completely specified by a function $\Psi(\mathbf{r}, t)$ that depends on the coordinates of the particle(s) and on time. This function, called the wave function or state function, has the important property that $\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)d\tau$ is the probability that the particle lies in the volume element $d\tau$ located at $\mathbf{r}$ at time $t$.

The wavefunction must satisfy certain mathematical conditions because of this probabilistic interpretation. For the case of a single particle, the probability of finding it *somewhere* is 1, so that we have the normalization condition

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)d\tau = 1 \tag{110}$$

It is customary to also normalize many-particle wavefunctions to 1.[2] The wavefunction must also be single-valued, continuous, and finite.

**Postulate 2**. To every observable in classical mechanics there corresponds a linear, Hermitian operator in quantum mechanics.

This postulate comes about because of the considerations raised in section 3.1.5: if we require that the expectation value of an operator $\hat{A}$ is real, then $\hat{A}$must be a Hermitian operator. Some common operators occuring in quantum mechanics are collected in Table 1.

**Table 1: Physical observables and their corresponding quantum operators (single particle)**

| اسم المشاهدة | رمز المشاهدة | رمز المؤثر | المؤثر |
|---|---|---|---|
| **Position**الموضع | $\underline{\mathbf{r}}$ | $\hat{\mathbf{r}}$ | **Multiply by** $\underline{\mathbf{r}}$ |
| **Momentum**كمية الحركة | $\mathbf{P}$ | $\hat{\mathbf{P}}$ | $-i\hbar\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x}+\hat{j}\frac{\partial}{\partial y}+\hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)$ |
| **Kinetic energy** الطاقة الحركية | $T$ | $\hat{T}$ | $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$ |
| **Potential energy** الطاقة الكامنة | $V(\mathbf{r})$ | $\hat{V}(\mathbf{r})$ | **Multiply by** $V(\mathbf{r})$ |
| **Hamiltonian** الهاملتوني | **H** | $\hat{H}$ | $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\mathbf{r})$ |
| **Total energy** الطاقة الكلية | $E$ | $\hat{E}$ | $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ |
| **Angular momentum** كمية الحركة الزاوية المدارية | $l_x$ | $\hat{l}_x$ | $-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$ |

| | | | |
|---|---|---|---|
| (الاندفاع الزاوي) | | | |
| | $l_y$ | $\hat{l}_y$ | $-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$ |
| | $l_z$ | $\hat{l}_z$ | $-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ |

**Postulate 3**. In any measurement of the observable associated with operator $\hat{A}$, the only values that will ever be observed are the eigenvalues $a$, which satisfy the eigenvalue equation

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \tag{111}$$

This postulate captures the central point of quantum mechanics--the values of dynamical variables can be quantized (although it is still possible to have a continuum of eigenvalues in the case of unbound states). If the system is in an eigenstate of $\hat{A}$with eigenvalue $a$, then any measurement of the quantity $A$will yield $a$.

Although measurements must always yield an eigenvalue, the state does not have to be an eigenstate of $\hat{A}$*initially*. An arbitrary state can be expanded in the complete set of eigenvectors of $\hat{A}$( $\hat{A}\Psi_i = a_i\Psi_i$) as

$$\Psi = \sum_i^n c_i\Psi_i \tag{112}$$

where $n$ may go to infinity. In this case we only know that the measurement of $A$ will yield *one* of the values $a_i$, but we don't know which one. However, we do know the *probability* that eigenvalue $a_i$ will occur--it is the absolute value squared of the coefficient, $|c_i|^2$ (cf. section 3.1.4), leading to the fourth postulate below.

An important second half of the third postulate is that, after measurement of $\Psi$ yields some eigenvalue $a_i$, the wavefunction immediately ``collapses'' into the corresponding eigenstate $\Psi_i$ (in the case that $a_i$ is degenerate, then $\Psi$ becomes the projection of $\Psi$ onto the degenerate subspace). Thus, measurement affects the state of the system. This fact is used in many elaborate experimental tests of quantum mechanics.

**Postulate 4**. If a system is in a state described by a normalized wave function $\Psi$, then the average value of the observable corresponding to $\hat{A}$ is given by

$$< A >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau \qquad (113)$$

**Postulate 5**. The wavefunction or state function of a system evolves in time according to the time-dependent Schrödinger equation

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad (114)$$

The central equation of quantum mechanics must be accepted as a postulate, as discussed in section 2.2.

**Postulate 6**. The total wavefunction must be antisymmetric with respect to the interchange of all coordinates of one fermion with those of another. Electronic spin must be included in this set of coordinates.

The Pauli exclusion principle is a direct result of this *antisymmetry principle*. We will later see that Slater determinants provide a convenient means of enforcing this property on electronic wavefunctions.