جامعة تكريت
كلية التربية للبنات
قسم الكيمياء

كيمياء الكم

المرحلة الرابعة

محاضرة

فرضيات ميكانيكا الكم

م .د.اسيا اكبر توفيق
asya.akbar@tu.edu.iq

الصياغـــة العامـــة لميكانيـــكا الكـــم

فرضيات ميكانيكا الكم

إن حقيقة إظهار الإلكترونات والجسيمات المايكروسكوبية الأخرى للطبيعة المزدوجة أي سلوك مادي وموجي ، تشير إلى أن الإلكترونات لا تتقبل قوانين الميكانيك الكلاسيكي التي تمت صياغتها من السلوك الملحوظ للأجسام المرئية .

أما نوع الميكانيك الذي تخضع له الأنظمة المايكروسكوبية فيسمي بميكانيك الكم وإن الأفكار الأساسية لميكانيكا الكم قد وضعت على شكل فرضيات **postulates** . أما اختبار مصداقية هذه الفرضيات فكان يستند على درجة التوافق بين القيم المحسوبة على أساسها مع تلك المحصل عليها عمليًا في المختبر .

وسنتطرق أولاً في هذا الجزء إلى هذه الفرضيات ومن ثم سنأخذ مثالاً يوضح لنا كيفية تطبيق هذه الفرضيات .

فرضيات ميكانيكا الكم :

الفرضيـــة الأولـــى :

(أ) يمكن وصف أية حالة **state** للنظام بـــصورة كاملـــة بواســـطة دالـــة رياضـــية ψ (تلفـــظ بـــساي **Psi**) تعـــرف بالدالـــة الموجيـــة **Wave function** أو دالـــة الحالـــة **State function** وهـــي دالة لإحداثيات جسيمات النظام وهي أيضًا دالة للزمن .

(ب) تمتلك الدالة ψ خاصية هـــي أن $\psi\psi^* d\tau$ تمثـــل احتماليـــة إيجـــاد الجسيم فـــي حجـــم صـــغير $d\tau$ (أن ψ^* هـــو المـــرادف المعقـــد

complex conjugate للدالة ψ) فمثلاً لنظام يحوي جسيمين فإنه وفقًا للفقرة (أ) أعلاه تكون دالة الحالة ψ

$$\psi = \psi (x_1 , y_1 , z_1 , : x_2 , z_2 , t)$$

حيث x_1 , y_1 , z_1 هي إحداثيات الجسيم الأول و..... إلخ.

وعندما تكون الخصائص الملحوظة غير معتمدة على الزمن فإن الدالة التي تصف مثل هذه الحالة تسمي بدالة الموجة غير المعتمدة على الزمن (أي أنها دالة للإحداثيات فقط) أما الكمية $\psi^2 d\tau$ (أو $\psi\psi^* d\tau$) الواردة في الفقرة (ب) فهي تعطينا التفسير الفيزيائي للدالة ψ :

فقد اقترح ماكس بورن **Max Born** في عام **1926** أن $|\psi^2|$ تعطي احتمالية إيجاد جسيم كالإلكترون مثلاً عند مواقع محددة من الفراغ وبصورة أكثر شمولية استخدم الكمية . $\psi\psi^*$ للتعبير عن الاحتمالية مجيزين بذلك الدالة ψ أن يكون لها مرادف معقد .

وحتى نكون أكثر دقة نفترض أن احتمالية إيجاد الجسيم في حجم صغير $d\tau$ معطاة بـ $\psi\psi^* d\tau$ إن ψ هي دالة رياضية ولكنها تصف نظامًا فيزيائيًا لذا يجب أن تكون دالة مقبولة فيزيائيًا وطالما أن $\psi\psi^* d\tau$ تمثل احتمالية إيجاد الإلكترون فإن قيود الدالة المقبولة هي :

أولاً – أن تكون أحادية القيمة (أي تكون لها قيمة واحدة عند كل نقطة في الفراغ) .

ثانيًا – يكون مربع الدالة قابلا للتكامل ، أي أن :

$$\int \psi\psi^* d\tau < \infty$$

ثالثًا – إذا كان التكامل $\int |\psi|^2 d\tau$ (أو $\int \psi\psi^* d\tau$) مساويًا واحد فإن ψ يقال لها بأنها دالة متناسقة **normalized function** .

الفرضيـــة الثانيـــة :

لكـــل متغيـــر دينـــاميكي **dynamic variable** ملحـــوظ أو كميـــة فيزيائيـــة ملحوظـــة فـــي النظـــام يوجـــد مـــؤثر هيرميتـــي خطـــي **Linear Hermitian operator** مـــصاحب لـــه . وإن الخـــواص الفيزيائية لهذا المتغير الملحوظ يمكن استنباطها مـــن الخـــواص الرياضـــية لذلك المؤثر .

وسوف نبحث الآن كيف نقرر صيغة أو شكل مؤثر يمثل ملحوظًـــا معلومًا والجواب على هذا هو اتباع القواعد التالية :

(أ) يكتب التعبير الكلاسيكي للكمية الفيزيائية الملحوظة بدلالة الإحـــداثيات الديكارتية والعزوم والزمن .

(ب) تجري التبديلات التالية :

أولاً – تترك الإحداثيات والزمن على حالها من دون تغير .

ثانيًا – يبذل العزم $\mathbf{P_q}$ (المعبر عنه بالإحداثيات الديكارتية) بواسطة المؤثر التفاضلي : $\mathbf{ih}\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\right)$ – (حيث **h** تساوي $\frac{\mathbf{h}}{\mathbf{2\pi}}$ وإن **h** هو ثابت بلانك) ولنأخذ المثال التالي :

إن الطاقة **E** لنظام ذي جسيم منفرد تساوي مجموع الطاقة الحركية **T** وطاقة الجهد **V** .

$$E = T + V$$

$$= \frac{1}{2} m \left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \right) + V(x,y,z)$$

ولأجل التعبير عن الطاقة (المتغير الديناميكي) بدلالة الضغوط والإحداثيات نستخدم $p_x = mv_x$, $p_y = mv_y$, $p_z = mv_z$ ويصبح عندنا :

$$E = \frac{1}{2m} \left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 \right) + V\left(x,y,z \right)$$

إن تعبير الطاقة **E** المعطى بدلالة الضغوط والإحداثيات يسمي بهاملتوني النظام أو الدالة الهاملتونية **H** للنظام) .

والآن نأخذ أولاً الطاقة الحركية ثم نطبق القاعدة (ب) المذكورة أعلاه :

$$T = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 \right)$$

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\left\{ \left[-i\hbar \left(\frac{\ell}{\ell x} \right) - \right]^2 + \left[-i\hbar \left(\frac{\ell}{\ell y} \right) \right]^2 + \left[-i\hbar \left(\frac{\ell}{\ell Z} \right) \right]^2 \right.$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{ \frac{\ell^2}{\ell x^2} + \frac{\ell^2}{\ell y^2} + \frac{\ell^2}{\ell Z^2} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

أما دالة الجهد **V** فهي دالة للإحداثيات فقط ولهذا استنادًا إلى القاعدة (ب) ستبقى على حالها . وبالتالي سنكتب :

$$\hat{E} = \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

أي أن :

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \qquad \ldots 1$$

الفرضية الثالثة :

نفترض أنه عندنا نظام موصوف بدالة ذاتية ψ_n **eiqenfunction** . وعليه فعندما نقيس الكمية الفيزيائية الملحوظة (أو للاختصار نسميها الملحوظ) العائدة للمؤثر **A** فإن القيم الممكنة التي نحصل عليها هي قيم ذاتية **eigenvalnes** a_n للمعادلة التالية :

$$A\psi_n = a_n \psi_n \quad \ldots (2)$$

وهذه الفرضية تعني أنه إذا قسنا الملحوظ **a** فسوف يمكننا الحصول على قيم مضبوطة له فقط عندما يكون النظام في حالة ذاتية **eigen state** لمؤثر مرتبط بالملحوظ **a** .

فمثلاً نأخذ مسألة حساب الطاقات **E** (وهي القيم الذاتية a_n) المسموح بها في نظام ذري أو جزيئي موصوف بدالة ذاتية ψ لمؤثر الطاقة

الكلية (أي المؤثر الهاملتوني H) وكما يلي :

حيث في هذه الحالة نعيد كتابة معادلة (2) بالشكل التالي :

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad \ldots (3)$$

والآن نعوض معادلة (1) في معادلة (3) حيث ينتج لجسيم منفرد الآتي :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = 0$$

ويمكن ترتيب هذه المعادلة إلى الصيغة التالية :

$$\frac{h^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E - V) \psi = 0 \qquad \ldots (4)$$

وهذه المعادلة تسمى بمعادلة شرودنجر اللازمنية (أي غير المعتمدة على الزمن) لنظام ذي جسيم منفرد .

الفرضية الرابعة :

في حالة كون النظام غير موصوف بدالة ذاتية فإن معدل **average** عدد كبير من القياسات الملحوظ (مرتبط بمؤثر **A**) يمكن التعبير عنه بالمعادلة التالية :

$$< A >_{average} = \frac{\int \psi_x^* \, A \psi_s \, d\tau}{\int \psi_x^* \, \psi_s \, d\tau} \qquad \ldots (5)$$

حيث ψ هي الدالة الموجية للنظام (وهي ليست دالة ذاتية) أما $< A >_{av}$ فتدعى بقيمة التوقع **expectation value** أو معدل القيمة **average value** للكمية المرتبطة بالمؤثر $\hat{A}$.

مثـــــال

بين أن الدالات الموجية $\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\frac{s\pi x}{a}$ ليست دالات ذاتية لمـــؤثر العـــزم $\hat{P}_x$. ثـــم احـــسب معـــدل القيمـــة للكميـــة المرتبطـــة بالمؤشر $\hat{P}_x$ لجسيم يتحرك على اتجاه × في داخـــل صـــندوق (حيـــث **a** هنا تمثل طول الصندوق) .

الحـــــل :

أولاً – نجعل المؤشر $\hat{P}_x$ (وهو يساوي $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ –) يؤثر في الـــدالات ψ_n وإن كانت نتيجة هذا التأثير ظهور نفس الدالة ψ_n مـــضروبة بمقـــدار ثابت . فإن في مثل هذه الحالة ستكون دالات ذاتية ولكن عدم ظهورها يعني أنها ليست دالات ذاتية ولنرى كالآتي :

$$\hat{P}\,\psi_n = -\,i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\left(\frac{2}{\partial}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{a}\right]$$

$$= -\,i\hbar\left(\frac{n\pi}{a}\right)\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}\cos\frac{n\pi x}{a}$$

وهكذا يتضح أن ψ_n ليست دالات ذاتية للمؤثر $\hat{P}_x$.

ثانيًا – نوجد معدل القيمة باستخدام معادلة **(51)** وكما يلي :

$$< \hat{P}_x >_{av} = \frac{\int_0^a \psi_n \hat{P}_x \psi_n \, dx}{\int_0^a \psi_n^2 \, dx}$$

ونحسب البسط فقط لأن المقام يساوي واحدًا لدالات متناسقة (انظر الفرضية الأولى) :

ونحسب البسط فقط لأن المقام يساوي واحدًا لدالات متناسقة (انظر الفرضية الأولى) :

$$< \hat{P}_x >_{av} = \int_0^a \left[\left(\frac{2}{a} \right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a} \right] \left[-i\hbar \left(\frac{n\pi}{a} \right) \left(\frac{2}{a} \right)^{1/2} \cos \frac{n\pi x}{a} \right] dx$$

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

$$= \left(-\frac{2i\hbar\, n\pi}{a^2} \right) \left(\frac{a}{2n\pi} \right) \left[\sin^2 \frac{n\pi x}{a} \right]_0^a = 0$$

وهذا يشير إلى أن عددًا كبيرًا في القياسات لـ $\hat{P}_x$ على أنظمة متماثلة سيعطي معدل قيمة للعزم تساوي صفرًا .