البَابُ الثّانِي

مبادئ رياضية أولية

Mathematical Preliminaries

- مقدمة
- المؤثرات
- معادلات القيم الذاتية
- تماثل الدوال والتكاملات
- الأرقام والدوال المعقدة
- المحددات
- نظم الإحداثيات
- تمارين

٢-١ مقدمة

الكيمياء الفيزيائية فرع من العلوم يعتمد بالدرجة الأولى على تطبيق القواعد والمنطـق الرياضي لحل المشـاكل الكيميائيـة. و يزداد هذا الاعتمـاد زيادة ملحوظة وأساسـية عند تعرضنا لتطبيق نظرية الكم لحل وفهم مشـاكل التركيب الإلكتروني للجزيئات والذرات. ويهدف هذا الباب إلى تقديم بعض الأسس والقواعد الرياضية المتعـارف عليهـا، والـتي سـوف نسـتخدمها خـلال محاولتنـا للوصـول إلى نظرية متكاملـة – في هـذا الكتاب – للتركيب الإلكتروني للذرات والجزيئات. ولا بد أن يكون واضحًـا تمامًا أننـا لا نقدم بابًا في كتاب رياضيات يسـتلزم إثباتًـا وتفصيلاً للمبدأ الرياضي، إنما الهدف من هذا الباب هو تذكير الطالب بالأسـس الرياضية اللآزمة لفهـم باقي أبواب هذا الكتاب، وتوحيد مفرداتنا العلمية قبل التوغل في نظرية الكم. وفي حالـة احتياج الطالب لتفاصيل أكثر، فسـوف نُحيلـه إلى بعض المراجع في علوم الرياضيات.

٢-٢ المؤثرات Operators

المؤثـر رمـز رياضـي يـدل علـى عمليـة رياضيـة معينـة يجـب إجراؤهـا علـى كل مـا يلـي هـذا الرمـز. فمثـلاً في التعبـير($\sqrt{2}$) فـإن علامـة الجـذر $\sqrt{\ }$ هـي المؤثـر الرياضـي الـذي يدل علـى عملية أخذ الجـذر التربيعـي للرقم 2. وبالمثـل في التعبـير الرياضـي $\frac{d}{dx}(x^2+5x+1)$ فـإن $\frac{d}{dx}$ هـو المؤثـر الرياضـي الـذي يـدل علـى عمليـة التفاضـل بالنسـبة للمتغـير x علـى كل مـا يليـه وهـو $(x^2 + 5x + 1)$. وكما هو واضح فإن المؤثر الرياضي ليست له قيمة معينة في حد ذاته. وسوف نميز المؤثر الرياضي العام مثل $\hat{\alpha}, \hat{P}, \hat{Q}$ بوضع علامة ^ فوق الحرف. ويجب

الحذر عند اســتخدام المؤثرات الرياضية، حيث إنها تتبع قواعد خاصة، سنحاول أن نوجز بعضها في هذا الفصل. فإذا كان:

$$\hat{P} = (\partial / \partial x)_{yz} \qquad (٢ - ١)$$
$$\hat{Q} = (\partial / \partial y)_{xz}$$

فإن
$$\hat{P} \,.\, \hat{Q} = \left| \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)_{xz} \right|_{yz} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$$

إن عمليــة ترتيــب اســتخدام المؤثرات الرياضية في غايــة الأهمية، إذ لا تتمتع بالضــرورة بخاصيــة التبديــل (commutation) مع بعضها البعــض بعكس الأرقام مثلاً، وعلى ذلك فإنه بالنسبة للمؤثرين (٢ - ١) فإن

$$\hat{P}.\hat{Q} = \hat{Q}.\hat{P} \qquad (٢ - ٢)$$

حيث إن

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \qquad (٢ - ٣)$$

وهــي حالــة خاصــة وليســت عامــة. والكميــة ($\hat{P}.\hat{Q} - \hat{Q}.\hat{P}$) وتســمى المتبــادل (commutator) للمؤثرين $\hat{P}, \hat{Q}$ ويرمز لها بالرمز ($\hat{P}, \hat{Q}$) وإذا كان $\hat{P}, \hat{Q}$ يتبادلان مع بعضهما البعض فإن ($\hat{P}, \hat{Q}$) تساوى صفرًا.

مثال ٢-١

احسب معامل التبديل للمؤثرين $\hat{A}=3$, $\hat{B}=\frac{d}{dx}$

الحل

يمكن التعبير عن معامل التبديل للمؤثرين $\hat{B}, \hat{A}$ بالصورة

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

وبالتعويض في هذا التعبير عن كل من $\hat{B}, \hat{A}$ ، فإن

$$[\hat{3},\frac{\hat{d}}{dx}]=3\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}3=0\ [\hat{3},\frac{d}{dx}]=3\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}3=0$$

وحيث إن معامل التبديل لهذين المؤثرين يساوي الصفر فإنه ينطبق عليهما قانون التبديل كالأرقام تمامًا.

مثال ٢-٢

احسب معامل التبديل $[\hat{A},\hat{B}]$ للمؤثرين $\hat{B}=x^2,\hat{A}=\frac{d}{dx}$ ومن ثم وضح ما إذا كانايحققان قانون التبديل.

الحل

إذا ما طبقنا قانون التبديل: $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}.\hat{B}-\hat{B}.\hat{A}$ عليهما عبر جعلهما يعملان على دالة في المتغير (X) مثل X فإننا نحصل على:

$$\hat{A}.\hat{B}=\frac{dx}{dx}.x^2=3x^2,\hat{B}.\hat{A}.=x^2\frac{dx}{dx}=x^2$$

$$\therefore\ \hat{A}.\hat{B}-\hat{B}.\hat{A}=3x^2-x^2\neq 0$$

وحيث إن معامل استبدل هذا لا يساوي الصفر، فلذا لا ينطبق عليهما قانون التبديل.

ومن الممكن أن تكون المؤثرات الرياضية حقيقية (real) أو معقدة (complex). والمؤثرات المعقدة هي تلك التي تحتوى على الكمية التخيلية $\sqrt{-1}$. وسوف نتعرض لخصائص الأرقام والدوال المعقدة فيما بعد. وخلال دراستنا في هذا الكتاب فإننا سوف نستعمل فقط النوع الخطي من المؤثرات (linear operators). ويطلق على المؤثر $\hat{P}$ مؤثر خطى فيما إذا حقق التعبير التالي

$$\hat{P}(c_1f+c_2g)=c_1\hat{P}f+c_2\hat{P}g \qquad (٢-٤)$$

أو

$$\frac{d}{dx}(c_1 f + c_2 g) = c_1\frac{df}{dx} + c_2\frac{dg}{dx}, \int (c_1 f(x) + c_2 g(x)dx = c_1 \int f(x)dx + c_2 \int g(x)dx \quad (٢ - ٥)$$

حيث c_1, c_2 هما مقداران ثابتان، وعلى ذلك فإن المؤثرات التفاضلية مثل $(\frac{d}{dx})$ أو التكاملية مثل $(\int)$ هي مؤثرات خطية، نظرًا لأن الموثر والدالة التي يعمل عليها متطابقان، أي يجب أن تكون العملية والنتيجة محددتان رياضيًا. أما المؤثر $(\sqrt{\ })$ فهو مؤثر غير خطي (non-linear) نظرًا لأن:

$$\sqrt{c_1 f(x) + c_2 g(x)} = c_1{}^2 f^2(x) + c_2{}^2 g^2(x) + 2c_1c_2 f(x)g(x)$$
$$\neq c_1 f(x) + c_2 g(x)$$

كما يجب أن تكون محققة للشرط (٢-٤).

مثال ٢-٣

بين المؤثرات الخطية وغير الخطية فيما يلي:

(أ) $3x^2\frac{d^2}{dx^2}$ (ب) $\sqrt{\ }$ (ج) $\int dx$ (د) $\exp$

الحل

نعمل هذه المؤثرات في الدالة: $c_1 f(x) + c_2 g(x)$ لذا إن كانت العملية والنتيجة محددتان رياضيًا بتحقيق الشرط (٢ - ٤).

$$3x^2\frac{d^2}{dx^2}\left(c_1 f(x) + c_2 g(x)\right) = c_1 3x^2\frac{d^2}{dx^2} f(x) + c_2 3x^2\frac{d^2}{dx^2} g(x)$$
$$= c_1\hat{A}f(x) + c_2\hat{A}g(x)$$

طالما أن الشرط (٢-٤) قد تحقق، فإن المؤثر $3x^2\frac{d^2}{dx^2}$ هو مؤثر خطي

(ب) $$\sqrt{c_1 f(x) + c_2 q(x)} = c_1{}^2 f^2(X) + c_2 q^2(x)$$
$$\neq c_1\hat{A}f(x) + c_2\hat{A}g(x)$$

لم يتحقق الشرط (٢ - ٤)، ولذا فإن المؤشر $(\sqrt{\ })$ هو غير خطي.

(ج) $\int \left[c_1 f(x) + c_2 g(x) \right] dx = c_1 \int f(x)\, dx + c_2 \int g(x)\, dx$

$$= c_1 \hat{A} f(x) + c_2 \hat{A} g(x)$$

بما أن الشرط (٢-٤) قد يتحقق، فإن المؤثر هو خطي.

(د) $\exp\left[c_1 f(x) + c_2 g(x) \right] = \exp c_1 f(x) + \exp c_2 g(x)$

$$\neq c_1 \exp f(x) + c_2 \exp g(x)$$

طالما أن الشرط (٢-٤) لم يتحقق، فإن المؤثر (exp) غير خطي.

ومن الممكن أن تكون المؤثرات متجهة (vector operators)، ومثال ذلك المؤثر دل (del) (Δ).

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j + \frac{\partial}{\partial z} k \qquad (٢ - ٦)$$

ويتم التعامل مع مثل هذه المؤثرات في صورة مركباتها، فمثلاً إذا كانت (f) هي دالة. فإن (Δf) تسمى ميل الدالة (f) (gradient of f).

مثال ٢-٤

احسب ميل الدالة $f = x^2 + y^2 + z^2$

الحل

$$\nabla f = \frac{\partial x^2}{\partial x} i + \frac{\partial y^2}{\partial y} j + \frac{\partial z^2}{\partial z} k$$

$$\Delta f = 2x\boldsymbol{i} + 2y\boldsymbol{j} + 2z\boldsymbol{k}$$

ومن المؤثرات التي سوف نستخدمها بكثرة خلال دراستنا لنظرية الكم هو المؤثر $\nabla^2 = \nabla . \nabla$ (دل تربيع)

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (٢ - ٧)$$

٢-٣ معادلات القيم الذاتية Eigenvalue Equations

تستلزم المعادلة الرياضية أو التعبير الرياضي الكامل وجود مؤثر رياضي للدلالة على نوع العمليات المراد إجراؤها يتبعه دالة رياضية لإجراء هذه العملية عليها. وهذان الحدان يعتبران الطرف الأيسر المعطى في المعادلة الرياضية، أما الطرف الأيمن فهو نتيجة هذه العملية الرياضية. فمثلاً: $\sqrt{9} = 3$ هذه المعادلة الرياضية تعني أن المؤثر $\sqrt{\ }$ أثر على الرقم 9 بأخذ الجذر التربيعي له وكانت النتيجة هي 3. وبالمثل في المعادلة الآتية:

$$\frac{d}{dx}\sin ax = a\cos ax \qquad (٢ - ٨)$$

فالطرف الأيسر يحتوي على المؤثر (d/dx) والدالة $\sin ax$ أما الطرف الأيمن فهو نتيجة العملية الرياضية. وهناك نوع معين من المعادلات الرياضية المعروفة باسم معادلات القيمة الذاتية (eigenvalue equation) والشكل العام لهذا النوع من المعادلات هو

$$\hat{P} f(x) = P f(x) \qquad (٢ - ٩)$$

حيث $\hat{P}$ هو مؤثر رياضي و $f(x)$ دالة رياضية في المتغير x. ويطلق على P القيمة الذاتية (eigenvalue)، في حين يطلق على الدالة $f(x)$ في هذه الحالة اسم الدالة الذاتية (eigenfunction) للمؤثر $\hat{P}$. وهذا النوع من المعادلات الرياضية يلعب دورًا رئيسيًا في نظرية الكم، وفي الحقيقة فإن العبء الرياضي الأساسي في تطبيق نظرية الكم هو في حل هذه المعادلات.

مثال ٢-٥

أوجد الدالة الذاتية للمؤثر $\hat{P} = d^2/dx^2$. ما هي القيمة الذاتية لهذه الدالة؟

الحل

في هذه الحالة فإننا نريد تحقيق المعادلة

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

أي أننا نبحث عن الدالة $f(x)$ التي عندما يتم تفاضلها مرتان تظهر مرة أخرى بدون أدنى تغيير مضروبة في الثابت P. والدوال التي تحقق ذلك عديدة، منها دوال $\cos ax$, e^{iax} , $\sin ax$ وغيرها. فمثلاً

$$\frac{d^2}{dx^2}(\sin ax) = d/dx(d/dx \sin ax)$$

$$= d/dx\,(a \cos ax) = -a^2 \sin ax$$

فطالما أن الشرط $\hat{P}f(x) = Pf(x)$ قد تحقق فإن الدالة $\sin ax$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ وعلى ذلك فإن القيمة الذاتية للدالة في هذه الحالة هي $-a^2$.

مثال ٢-٦

هل الدالة $\left[f = \sin ax\right]$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{P} = \frac{d}{dx}$ وما هي قيمتها الذاتية؟

الحل

نبحث عن تحقق الشرط $\hat{P}f(x) = Pf(x)$ وذلك بإعمال المؤثر $\frac{d}{dx}$ على الدالة $(\sin ax)$

$$\frac{df(x}{dx} = Pf(x) : \frac{d(\sin ax)}{ax} = a \cos a x ; \frac{df(x)}{dx} \neq Pf(x)$$

$\therefore$ $f = \sin ax$ ليست دلة ذاتية للمؤثر $\frac{d}{dx}$ ومن ثم فليس لها قيمة ذاتية.

مثال ٢-٧

وضع هل الدالة e^{ikx} هي دالة ذاتية لمؤثر كمية التحرك $(\hat{P})$ حيث أن $\left[\hat{P} = -i\&\frac{d}{dx}\right]$ وإذا كان ذلك كذلك ما هي القيمة الذاتية ؟

الحل

نبحث عن تحقق الشرط على الدالة $\hat{P}f(x) = Pf(x)$ بإعمال المؤثر ($\hat{P}$) على الدالة e^{ikx} :

$$\hat{P}e^{ikx} = -i\&\frac{d}{dx}e^{ikx} = \&e^{ikx} = Pf(x)$$

طالما تحقق الشرط أعلاه فإن الدالة e^{ikx} هي دالة ذاتية للمؤثر $\left(-it\frac{d}{dx}\right)$ ومن ثم فإن قيمتها الذاتية تساوي (&).

٢-٤ تماثل الدوال والتكاملات Functions Symmetry and Integrals

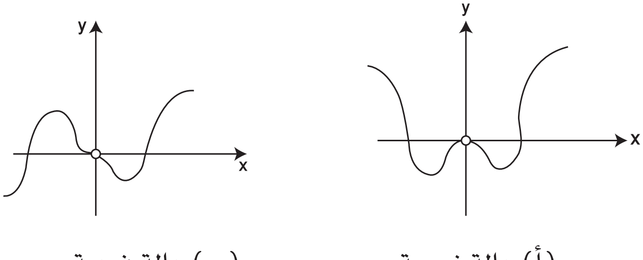
الـدوال الرياضية عمومًا يمكن أن يكون تماثلهـا فرديًا أو زوجيًا فمثلاً الدالة $f(x)$ تسمى دالة زوجية إذا حققت الشرط

$$f(x) = f(-x) \qquad (٢ - ١٠)$$

وتسمى دالة فردية إذا حققت الشرط

$$f(x) = -f(-x) \qquad (٢ - ١١)$$

يمكن توضيح خاصية التماثل للدول الموجية التي يمكن أن تكون متماثلة وغير متماثلـة أو زوجية وفردية بالتتابع للعملية $(x \rightarrow -x)$ ، والتي هي عبارة عن انعكاس عبر خط $x = 0$ ، كما في الشكل (٢-١) أدناه:



(ب) دالة فردية (أ) دالة زوجية

الشكل (٢-١). يوضح الدالة الزوجية $[y(x)=y(-x)]$ والدالة الفردية $[y(x) = -y(-x)]$.

الشكل (١-٢) يوضح الدالة الزوجية $[y(x)=y(-x)]$ والدالة الفردية $[y(x)=-y(-x)]$ ، إن خاصية تماثل الدوال الموجية تنتج من تماثل المؤثر، فمثلاً إذا كان:

$$\hat{P}(x)\psi_n(x)=En\psi_n(x)$$

فإن الانعكاس عبر خط $x = 0$ يعطي $(x \to -x)$ ولذا فإن

$$\hat{P}(-x)\psi_{(n)}(-x)=En\psi_n(-x)$$

أي أن $\hat{P}(x)=\hat{P}(-x)$ ، ولذا فهو متماثل ومن ثم فإن:

$$\hat{P}(x)\psi_n(-x)=En\psi_n(-x)$$

لنرى أن $\psi_n(-x)$ هي أيضًا دالة ذاتية للمؤثر $\hat{P}(x)$ ولديها نفس القيمة الذاتية (E_n) ولذا فإن $\psi_n(x)$ هي دالة متماثلة.

وعلى ذلك فإن الدالة $y = x$ دالة فردية، في حين أن الدالة $y = x2$ دالة زوجية. وعند التعامل مع دوال مكونة من حاصل ضرب أو خارج قسمة دالتين (مثلاً) فإن القواعد العامة لتحديد تماثل الناتج هي:

فردي × فردي = زوجي (٢ - ١٢)

فردي × زوجي = فردي

زوجي × فردي = فردي

زوجي × زوجي = زوجي

وهي نفس قواعد الضرب باستخدام (+1) و(–1) حيث (+1) تمثل الدالة الزوجية و(–1) تمثل الدالة الفردية. وتنطبق هذه القواعد على خارج القسمة. والسبب الرئيسي لاستعراضنا ما تقدم من تماثل الدوال هو أننا سوف نتعرض في دراستنا هنا إلى مجموعة من التكاملات التي يمكن إيجاد قيمة لها بمجرد معرفتنا بتماثل الدوال المستخدمة، ولتوضيح ذلك افترض التكامل التالي:

$$Y = \int_{-1}^{+1} \sinxdx \qquad (٢-١٣- أ)$$

ولتعيين القيمة العددية لهذا التكامل فإنه يمكن حلّه كالآتي:

$$Y = -\left|\cos x\right|_{-1}^{+1} = -\left|\cos(+1) - \cos(-1)\right| = 0$$

أمـا إذا نظرنـا إلى التكامل على أنه مسـاحة تحت منحنى ما، فإننا يمكن أن نقسم التكامل (٢-١٣- أ) إلى قسمين:

$$Y = \int_{-1}^{0} \sinxdx + \int_{0}^{+1} \sinxdx \qquad (٢-١٣- ب)$$

وحيث إن $(\sin x)$ هي دالة فردية في (x)، فإن الجزء الأول يساوي الجزء الثاني في المقدار ويختلف عنه في الإشارة، وعلى ذلك فإن $Y = 0$. ومن هنا نستخلص قاعدة عامة وهي أن تكامل الدوال الفردية بين حدود متماثلة لا بد وأن يساوى الصفر. وهذا النوع من التقييم في غاية الأهمية في نظرية الكم. فمن المهم معرفة ما إذا كان تكاملاً ما يتلاشى في ظروف معينة أم لا، فمثلاً بمجرد معرفة أن كلا الدالتين $\sin x$, x دوال فردية وبالتالي فإن حاصل ضربهما زوجي، فإن هذا التكامل لا يساوى الصفر في الحدود المتماثلة من +1 إلى -1.

٢-٥ الأرقام والدوال المعقدة Complex Numbers and Functions

هنالك معادلات جبرية كثيرة مثل: $x^2 + 4 = 0, x^2 + 2x + 10 = 0$

لا يمكـن تحقيقها بـأن عدد حقيقي. لقد قاد البحث لحـل هذه المعادلات إلى الأعـداد الخيالية والأعداد المعقدة. يأخذ العدد الخيالي الشـكل (iy) حيث (y) هو عدد حقيقي و (i) تسـمى الوحدة الخيالية. مجموع العدد الحقيقية والعدد الخيالية هـو أعـداد معقدة، مثل $(x + iy)$ حيـث x , y هما عددان حقيقيـان. عادة ما تكتب الأعداد المعقدة على الشكل:

$$z = x + iy \qquad (٢-١٤)$$

حيث x هو الجزء الحقيقي له و y هو الجزء الخيالي له:

يضاف العددان المعقدان إلى بعضهما بجمع الجزئين الحقيقين مع بعضهما والجزئين الخيالين مع بعضهما كالآتي:

$$z_1 + z_2 = x_1 + iy_1 + x_2 + iy_2 = (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2)$$

$$z_1 - z_2 = (x_1 + iy_1) - (x_2 + iy_2) = (x_1 - x_2) + i(y_1 - y_2)$$

أما حاصل ضربهما فيتم بضرب z_1, z_2 في بعضهما ووضع $(i^2 = -1)$ أينما وردت:

$$z_1.z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = x_1x_2 + ix_2y_1 + ix_1y_2 \quad + i^2y_1y_2$$

$$= (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_2y_1 + x_1y_2)$$

بأي عدد معقد (z) يرتبط مقدار مهم جدًا يسمى بالمترافق المعقد (z^*). ينتج المترافق المعقد (z^*) للعدد المعقد (z) بتغيير (i) إلى $(-i)$ أينما وردت (i) فيه، إذا كانت $(z = x + iy)$ فإن $(z^* = x - iy)$.

يرمز للقيمة المطلقة للرقم المعقد (z) بالرمز $|z|$، والذي يعطى بالعلاقة:

$$|z| = (x^2 + y^2)^{1/2} \qquad (٢ - ١٥)$$

كما أن التعبير المهم للقيمة المطلقة $|z|$ هو:

$$|z| = (zz^*)^{1/2} \qquad (٢ - ١٦)$$

والتي يمكن التحقق منها كالآتي:

$$zz^* = (x + iy)(x - iy) = x^2 - i^2y^2 = x^2 + y^2 \qquad (٢ - ١٧)$$

بتعويض المعادلة (٢ - ٧١) في المعادلة (٢ - ٦١) نحصل على

$$|z| = (zz^*)^{1/2} = (x^2 + y^2)^{1/2} \qquad (٢ - ١٨)$$

لقد وجد أنه من المفيد التعبير عن العدد المعقد بالشكل الأسي (exponential).

لإيجاد الشكل الأسي للرقم المعقد تسترجع تعابير ماكورين (Maclaurin) الثلاثة:

$$e^{x} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots\dots\dots$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} \dots\dots\dots$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} \dots\dots\dots$$

إذا ما استبدلنا x بالعلاقة $i\theta$ في e^{x} فتحصل على:

$$e^{ii} = 1 + i\theta + \frac{i^2 i^2}{2!} + \frac{i^3 i^3}{3!} + \frac{i^4\theta^4}{4!} + \dots\dots$$

$$e^{ii} = 1 + i\theta - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{i\theta^3}{3!} + \frac{\theta^4}{4!} + \frac{i i^5}{5!} \dots\dots$$

$$e^{ii} = \left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!}\right) + i\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} + \dots\right)$$

من الواضح أن السلسلتين الأُسِّيَتين هنا هما $\sin\theta, \cos\theta$ ولذا فإن:

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \qquad (٢ - ١٩)$$

تعرف العلاقة (٢ – ٩١) بصيغة إيولر. إذا عوضنا الصيغة الأسية $z = re^{i\theta}$ ومترافقها المعقد $z^* = re^{-i\theta}$ في العلاقة (٢–١٨) تحصل على:

$$|z| = (zz^*)^{1/2} = (re^{ii} . re^{-ii})^{1/2} = r = (x^2 + y^2)^{1/2} \qquad (٢ - ٢٠)$$

حيث r هي القيمة المطلقة للرقم (z).

مثال ٢–٨

اثبت أن: $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ استخدم هذه النتيجة والتمثيل الكردي:

$z = r(\cos\theta + i\sin\theta)$ لإثبات أن: $|e^{ii}| = 1$.

الحل

لإثبات أن $e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta$ نستخدم علاقة إيولر $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ وحقيقة أن $\cos\theta$ هي دالة زوجية في θ بمعنى أن $\cos(-\theta) = \cos\theta$ وأن $\sin\theta$ هي دالة فردية في θ أي أن $\sin(-\theta) = -\sin\theta$

أما بالنسبة للجزء الثاني: $|e^{i\theta}| = 1$ فنستخدم $|z| = (zz^*)^{1/2}$

$$|e^{i\theta}| = \left[(\cos\theta + i\sin\theta)(\cos\theta + i\sin\theta)\right]^{1/2}$$

$$= (\cos^2\theta + \sin^2\theta)^{1/2} = 1$$

٢-٦ المحددات Determinants

هناك العديد من المسائل الفيزيائية التي يمكن التعامل معها بسهولة لو تم وضعها في صورة صفوف (arrays). ويتم التعامل مع مثل هذه الصفوف (arrays) على أساس قواعد عامة محددة. وهناك نوعان من هذه الصفوف شائع استخدامها في نظرية الكم، وخاصة في كيمياء الكم، وهما: المحددات (determinants) والمصفوفات (matrices)، وسوف نستخدم في هذا الكتاب المحددات بصفة مستمرة. ومن أجل ذلك سوف نقدم باختصار في هذا الفصل بعض الخواص العامة للمحددات.

المحددة هي ترتيب مربع لعدد N^2 من الكميات أو الأرقام في شكل عدد N عمود وعدد N سطر. والعدد N يسمى رتبة المحددة، فمثلاً رتبة المحددة

$$A = \begin{vmatrix} 3 & 7 & 4 \\ 2 & 5 & 2 \\ 5 & 3 & 9 \end{vmatrix} \qquad (٢-٢١)$$

تساوى 3 ويرمز لهذه المحددة بالرمز $|A|$ أي رمز المحددة بين خطين عموديين.

ولكل محددة قيمة عددية، ومن أيسر الطرق لتعيين القيمة العددية لمحددة، هي طريقة المعامل المرافق (cofactor) والمثال التالي يوضح هذه الطريقة.

مثال ٢-٩

أوجد القيمة العددية للمحددة (٢١ - ٢)

الحل

١- نختار أحد الأعمدة أو أحد السطور، وليكن مثلاً السطر الأول.

٢- نأخذ الحد الأول في السطر المختار وهو ٣ ونضربه في المحددة بعد حذف السطر والعمود المحتوى على هذا الحد.

٣- ننتقل إلى الحد الثاني في نفس السطر وهو ٧ ونغير إشارته ثم نضربه في المحددة المتبقية بعد إزالة السطر والعمود التابع لهما هذا الحد ونكرر نفس الشيء في الحد الثالث وعلى ذلك تكون قيمة $|A|$ هي:

$$|A| = 3\begin{vmatrix} 5 & 2 \\ 3 & 9 \end{vmatrix} - 7\begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 5 & 9 \end{vmatrix} + 4\begin{vmatrix} 2 & 5 \\ 5 & 3 \end{vmatrix}$$

$$|A| = 3(5x9 - 2x3) - 7(2x9 - 2x5) + 4(2x3 - 5x5) = -15$$

ومن الخواص المهمة للمحددات، والتي سوف نستخدمها في هذا الكتاب، هي:

١- تنعكس إشارة المحددة إذا ما تبدل وضع عمودين أو سطرين في المحددة.

٢- تتلاشى المحددة (قيمتها العددية تساوى الصفر) إذا ما احتوت على سطرين أو عمودين متطابقين.

مثال ٢-١٠

أوجد قيمة المحددة:

$$B = \begin{vmatrix} 7 & 3 & 4 \\ 5 & 2 & 2 \\ 3 & 5 & 9 \end{vmatrix}$$

الحل

$$|B| = 7\begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 5 & 9 \end{vmatrix} - 3\begin{vmatrix} 5 & 2 \\ 3 & 9 \end{vmatrix} + 4\begin{vmatrix} 5 & 2 \\ 3 & 5 \end{vmatrix}$$

$$56 - 117 + 76$$

$$|B| = 7(2x9 - 2x5) - 3(5x9 - 2x3) + 4(5x5 - 2x3) = +15$$

بما أن المحددة (B) هي نفسها المحددة (A) ولكن مع تبديل وضع العمودين الأول والثاني، فتغيرت إشارتها من السالب إلى الموجب.

مثال ٢-١١

أوجد القيمة العددية للمحددة:

$$C = \begin{vmatrix} 3 & 3 & 4 \\ 2 & 2 & 2 \\ 5 & 5 & 9 \end{vmatrix}$$

الحل

$$|C| = 3\begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 5 & 9 \end{vmatrix} - 3\begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 5 & 9 \end{vmatrix} + 4\begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 5 & 5 \end{vmatrix}$$

$$|C| = 3(2x9 - 2x5) - 3(2x9 - 2x5) + 4(2x5 - 2x5) = 0$$

إذاً تلاشت المحددة نظرًا لوجود عمودين متطابقين.

٢-٧ نظم الإحداثيات Coordinate Systems

الهدف الأساسي لنظم الإحداثيات هو لتمكين الشخص من وصف نقطة أو خط أو سطح في الفراغ. وهناك العديد من هذه النظم، ويهمنا في هذا الكتاب أربعة

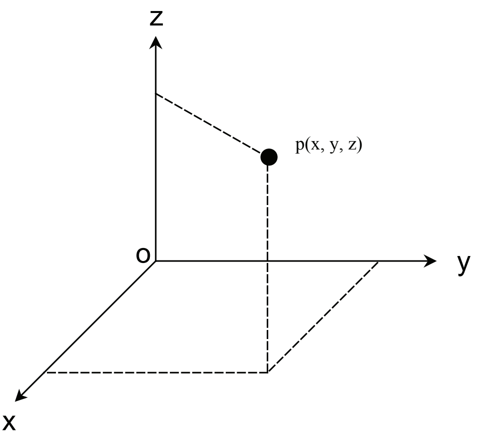
من هذه النظم، والتي سوف نستخدمها في المواقف المختلفة، وهذه النظم هي:

١- الإحداثيات الديكارتية (x, y, z) (cartesian coordinates).

٢- الإحداثيات القطبية الكروية (r, φ, θ) (spherical polar coordinates).

٣- الإحداثيات الأسطوانية (ρ, φ, z) (cylindrical coordinates).

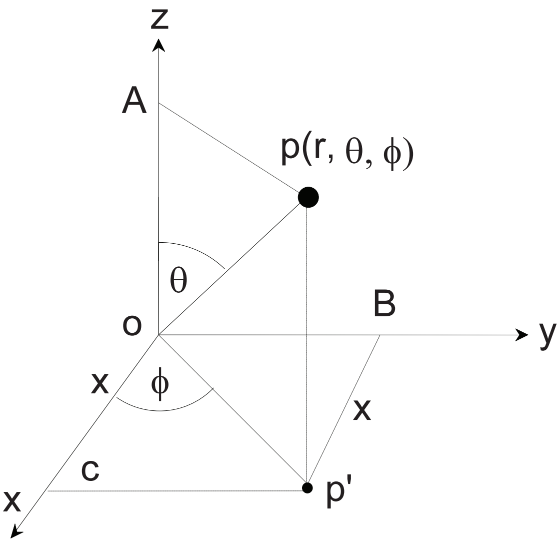
٤- الإحداثيات البيضاوية (μ, v, φ) (confocal ellipsoidal coordinates).



شكل (٢-٢): نظام الإحداثيات الديكارتية.

ويعتمد اختيارنا لنظام الإحداثيات على نوعية المشكلة نفسها، ويجب انتقاء نظام الإحداثيات الذي يبسّط المعادلات الرياضية الممثلة لهذه المشكلة إلى أقصى درجة. ولكن لا بد أن يكون واضحًا للأذهان أن النتيجة النهائية التي تستخلص من الحل لا بد وأن تكون مستقلة تمامًا وغير معتمدة إطلاقًا على نظام الإحداثيات المستخدم.

يوضح الشكل رقم (٢-٢) نظام الإحداثيات الديكارتية، وفيه تمثل النقطة P في الفراغ بثلاث مسافات (x , y , z). أما في نظام الإحداثيات الكروي القطبي، فتمثل النقطة P بالمسافة (r) وزاويتين (φ , θ). والمسافة r هي المسافة (نصف القطر) من مركز الإحداثيات O إلى P والزاوية θ هي الزاوية الواقعة بين المتجه OP والمحور Z. أما الزاوية φ فهي الزاوية الواقعة بين المحور x ومسقط OP في المستوى xy.



شكل (٢-٣): نظام الإحداثيات الكروية القطبية

ويوضح الشكل رقم (٢-٣) هذه العلاقات. ويمكن إيجاد العلاقة بين نظام الإحداثيات الديكارتية ونظام الإحداثيات القطبية الكروية كما يلي:

من الشكل (٢-٣) وفي المثلث OPA فإن

$$PA = r \sin \theta$$

$$z = r \cos \theta \qquad \text{(٢-٢٢-أ)}$$

وفي المستوى xy فإن مسقط OP يوازي ويساوى في المقدار AP، وبالتالي

$$O\,P' = r \sin \theta$$

وفي المثلث OP'B فإن

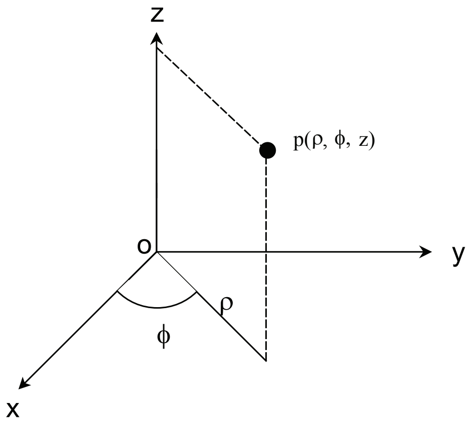
$$x = \text{op}' \sin \varphi$$

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \qquad \text{(٢-٢٢-ب)}$$

و

$$y = \text{op}' \sin \varphi$$

$$y = r \sin \theta \cos \varphi \qquad \text{(٢-٢٢-ج)}$$



شكل (٢-٤): نظام الإحداثيات الاسطوانية

يوضح الشكل رقم (٢-٤) نظام الإحداثيات الأسطوانية. وفي هذا النظام تمثل النقطة p بمسافتين وزاوية واحدة. والمسافتان هما z الإحداثي على المحور z، وطول المسقط المتجه o p في المستوى xy. أما الزاوية فهي φ ولها نفس التعريف الذي استخدم في النظام الكروي القطبي للإحداثيات. والعلاقة بين الإحداثيات الديكارتية وتلك الأسطوانية يمكن استنباطها بنفس الطريقة التي استخدمت في حالة النظام الكروي القطبي. والمعادلات (٢-٢٣) تمثل هذه العلاقة:

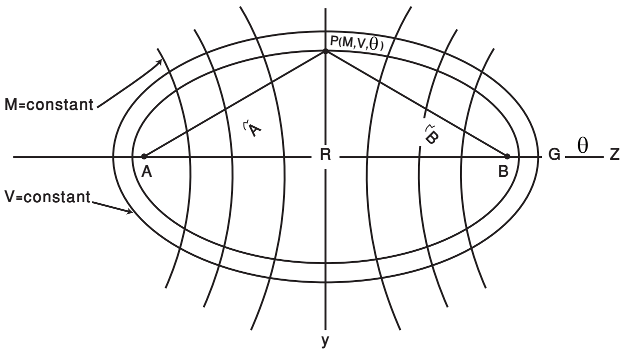
$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi \\ y &= \rho \sin \varphi \\ z &= z \end{aligned} \qquad (٢-٢٣)$$

أما النظام البيضاوي للإحداثيات فهو موضح في الشكل (٢-٥). ويستخدم هذا النوع من الإحداثيات في حالة الأشكال الفراغية التي تتميز بمركزين A, B تفصلهما عن بعضهما مسافة ثابتة R والخطان AP, BP يحددان مستوى يتقاطع مع المستوى(xy) وهذا التقاطع يحدد الزاوية φ. وتحدد النقطة P في هذه الحالة بثلاث إحداثيات μ , φ , v؛ و حيث تعرف v, μ كالتالي

$$\left.\begin{aligned} \mu &= (r_a + r_b) / R \\ \nu &= (r_a - r_b) / R \end{aligned}\right\} \qquad (٢-٢٤)$$

أما الزاوية (φ) فينشـؤها المثلث $(R, r_B r_A)$ حول المحور البؤري الداخلي. والعلاقة بين هذا النظام من الإحداثيات والنظام الديكارتي هي:

$$\left.\begin{aligned} x &= R/2\,(\mu^2 - 1)^{1/2}\,(1 - \nu^2)^{1/2} \cos\varphi \\ y &= R/2\,(\mu^2 - 1)^{1/2}\,(1 - \nu^2)^{1/2} \sin\varphi \end{aligned}\right\} \qquad (٢-٢٥)$$
$$z = R/2\,\mu\nu$$



شكل (٢-٥): نظام الإحداثيات البيضاوية

وعنـد تطبيـق نظرية الكم في أي من نظم الإحداثيات سـابقة الذكر، فإننا في أغلـب الأحوال نحاول أن نحل بعض التكاملات في كل الفراغ (all space). ولإجراء مثل هذه التكاملات يجب أولا تحديد وحدة الحجوم التفاضلية (differential volume element) ويرمـز لـه بالرمز $d\tau$، ويجب أيضًا معرفة حدود التكامل في كل نظام من نظم الإحداثيات. وسوف نلخص فيما يلي هذه المعلومات لكل النظم الأربع:

الإحداثيات الديكارتية

$$d\tau = dx\,dy\,dz \qquad -\infty \le x \le +\infty$$
$$-\infty \le y \le +\infty$$
$$-\infty \le z \le +\infty$$

الإحداثيات الكروية القطبية

$0 \le r \le +\infty$ $\qquad$ $d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$

$0 \le \theta \le \pi$

$0 \le \varphi \le 2\pi$

الإحداثيات الأسطوانية

$0 \le \rho \le \infty$ $\qquad$ $d\tau = \rho \, d\rho \, d\varphi \, dz$

$0 \le \varphi \le 2\pi$

$-\infty \le z \le +\infty$

الإحداثيات البيضاوية

$1 \le \mu \le \infty$ $\qquad$ $d\tau = R3 /8 \, (\mu^2 - v^2) \, d\mu \, dv \, d\varphi$

$-1 \le v \le -1$

$0 \le \varphi \le 2\pi$

تمارين

١- إذا كان المؤثران $\hat{P}, \hat{Q}$ لهما الشكل الرياضي (٢-١) احسب قيمة $\hat{P}.\hat{Q} - \hat{Q}.\hat{P}$ للدالة $f(x,y) = x^2 + y^2 + 2xy$.

٢- افترض أن $\hat{P} = d/dx$ و $\hat{Q} = x$ اثبت أنه بالنسبة للدالة $f(x) = x^2+2x+1$ فإن $\hat{P}\hat{Q} \neq \hat{Q}\hat{P}$

٣- استنبط تعبيرًا عامًا للمعامل التبادلي $(\hat{P}.\hat{Q} - \hat{Q}.\hat{P})$ للمؤثرين المعرفين في التمرين (٢).

٤- اثبت أن الدالة Ae^{-ax} (حيث a , A هما ثابتان) هي دالة ذاتية للمؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ ما هي القيمة الذاتية للدالة في هذه الحالة ؟

٥- اثبت أن الدالة $(\cos ax \cos by \cos cz)$ هي دالة ذاتية للمؤثر ∇^2 ما هي القيمة الذاتية للدالة في هذه الحالة ؟

٦- اذكر تماثل (فردي أم زوجي) كل دالة من الدوال التالية
x^3 , x^4 , $\sin x$, $\cos x$, $x \sin x$, $x \cos x$

٧- ارسم الدالة $y = \sin x$ بين القيم $x = -180°\ (-\pi)$, $x = 180°\ (\pi)$
ميز المناطق التي تنتمي إلي كل من التكاملات (٢-١٣- ب) عندما تكون $x = 180°$.

٨- باستخدام خواص التماثل للدوال وتأثيرها على التكاملات. اثبت أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\ e^{imt} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\ \cos mt\ dt$$

إذا كانت $f(t)$ هي دالة زوجية في المتغير t.