بسم الله الرحمن الرحيم

المملكة العربية السعودية
وزارة التعليم العالي
جامعة الطائف

Kingdom of Saudi Arabia
Ministry of Higher Education
Taif University

مقدمة في

المؤثرات

في ميكانيكا الكم

ساعدني في كتابة وتنسيق المحاضرات (6-7-8-10)كنشاط طلابي الطلاب الواردة أسماؤهم في الصفحة التالية مشكورين سلفا

بسم الله الرحمن الرحيم

قال تعالى : [وَمَا أُوتِيتُمْ مِنَ العِلْمِ إِلَّا قَلِيلًا] صدق الله العظيم

وبعد .. يطيب لأبنائك الطلاب :

ممدوح محمد الغامدي	42705907
سامر عجلان الثبيتي	4275828
محمد جمعان الحارثي	42606015
ظافر ثواب السبيعي	42706017
سلمان عبد الرحمن الحارثي	42605401

أن نتقدم بهذا العمل للدكتور / محمد الجلالي

الذي نتمنى أن يحوز على إعجابكم وهذا كله آتي بعد الله سبحانه وتعالى ثم بفضل مجهودكم الذي لولاه لما ازدان هذا العمل، راجين من الله عز وجل أن ينفع به الجميع ، متمنين لكم دوام التوفيق والسداد في خدمة الطلاب ، والله ولي التوفيق .

المؤثرات

Operators

1- تعريف المؤثر :

المؤثر عبارة عن تركيب ما يعبر عن قاعدة رياضية يتم وفقها تأثير ذلك المؤثر على تابع (دالة) ما فيحقق ترابطاً مع تلك الدالة بحيث ينتج تابع (دالة) أخرى أو نفس التابع مضروباً بقيمة ما. وبالتالي فهو قاعدة رياضية تساعد تابع ما f على أن يرتبط مع تابع آخر ε وفق المساواة التالية :

$$f = \hat{Q}\,\varphi$$

حيث $\hat{Q}$ مؤثر ما ونميزه عن غيره من الرموز بوضع الإشارة ($\hat{}$) فوق الحرف.

يمكن أن يكون المؤثر بشكل تفاضل (∇) أو جذر ($\sqrt{\ }$) أو إحداثي (x, y, z).

وفي هذا الصدد يمكننا القول إن المقدار الفيزيائي في ميكانيكا الكم لا يتميز بقيمته العددية بل بالمؤثر الذي يوصف به المقدار الفيزيائي.

وفيما يلي بعض الأشكال التي يمكن أن يأخذها المؤثر وبعض الأمثلة:

أ– ابسط أنواع المؤثرات هي التي تكون عملية تأثيرها عملية الضرب العادي فمثلاً المؤثر $\hat{A}$ له العلاقة:

$$\hat{A} = x$$

فعندما يؤثر $\hat{A}$ على تابع $\varphi(x)$

$$\hat{A} = \varphi(x) = x\ \varphi(x)$$

ونلاحظ من عملية التأثير أننا حصلنا على تابع جديد يساوي $x\,\varphi(x)$.

ب– يعتبر المؤثر التفاضلي $\frac{\partial}{\partial x}$ من المؤثرات الهامة جداً في ميكانيكا الكم وله الشكلين التاليين :

$$\hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{C} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

ج– وهناك نوع آخر من المؤثرات له الشكل التالي :

$$\widehat{E} = x\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\widehat{F} = \frac{\partial}{\partial x}x$$

مثال : أدرس تأثير المؤثر $\widehat{F}$ على الدالة $f(x)$

الحل :

$$\widehat{F}f(x) = \frac{\partial}{\partial x}x\, f(x)$$

$$= f(x) + x\frac{\partial}{\partial x}f(x)$$

$$= \left(1 + x\frac{\partial}{\partial x}\right)f(x)$$

ويلاحظ أننا استخدمنا القواعد المعروفة في اشتقاق جداء دالتين وبالتالي فإن المــؤثر $\widehat{F}$ يساوي

$$\widehat{F} = \frac{\partial}{\partial x}x = 1 + x\frac{\partial}{\partial x}$$

مثال آخر:

ادرسي تأثير المؤثر $\widehat{G} = \frac{\partial}{\partial x}x^2$ على الدالة $g(x)$

الحل :

$$\widehat{G}\, g(x) = \frac{\partial}{\partial x}x^2 g(x)$$

$$= 2x\, g(x) + x^2\frac{\partial g(x)}{\partial x}$$

$$= \left(2x + x^2\frac{\partial g(x)}{\partial x}\right)g(x)$$

أي أن المؤثر

$$\frac{\partial}{\partial x}x^2 = 2x + x^2\frac{\partial}{\partial x}$$

2- خواص المؤثرات في ميكانيكا الكم :

في ميكانيكا الكم لا يمكننا التعامل مع كل المؤثرات الرياضية بل هناك شروط على المؤثرات وانتقائية خاصة بفرض أنواع محددة من تلك المؤثرات.

ومن أهم المؤثرات في ميكانيكا الكم ما يلي :

أ- المؤثرات الخطية :

نقول عن المؤثر $\hat{B}$ بأنه خطي إذا حقق العلاقتين

$$\hat{B}\,(\varphi_1+\varphi_2)=\hat{B}\;\varphi_1+\hat{B}\;\varphi_2$$

$$\hat{B}\,a\,\varphi=a\,\hat{B}\;\varphi$$

حيث a مقدار ثابت .

فإذا كان $\hat{B}=\dfrac{\partial}{\partial x}$ فإن

$$\frac{\partial}{\partial x}(\varphi_1+\varphi_2)=\frac{\partial\varphi_1}{\partial x}+\frac{\partial\varphi_2}{\partial x}$$

و

$$\frac{\partial}{\partial x}\,a\,\varphi=a\,\frac{\partial\varphi}{\partial x}$$

وبالتالي فالمؤثر $\hat{B}$ مؤثر خطي .

وبشكل عام إذا كان التابع ψ يمثل مجموعة توابع مثل :

$$\psi=c_1\psi_1+c_1\psi_1.......+c_n\,\psi_n$$

فإن :

$$\hat{B}\,\psi=c_1\,\hat{B}\,\psi_1+c_1\,\hat{B}\,\psi_1.......+c_n\,\hat{B}\,\psi_n$$

هذا وتوضح المؤثرات الخطية للعمليات الجبرية كالجمع والجداء وفقاً للقواعد التالية

$$\hat{A}+\hat{B}=\hat{C}$$

$$\hat{A}-\hat{B}=\hat{D}$$

$$\hat{A}\cdot\hat{B}=\hat{E}$$

وعموماً فان $\hat{A}\cdot\hat{B}\neq\hat{B}\cdot\hat{A}$

مثال

$$\hat{A} = x \qquad \hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$$

فإن:

$$\left(\widehat{A} + \widehat{B}\right)\psi = \left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$

و

$$\widehat{A} \cdot \widehat{B}\, \psi = x \frac{\partial}{\partial x}\psi$$

و

$$\widehat{A} \cdot \widehat{B}\, \psi = \frac{\partial}{\partial x} x \;\psi$$

$$= \left(1 + x \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$

إذن

$$\widehat{A} \cdot \widehat{B} \neq \widehat{A}\; \widehat{B}$$

ب- المؤثرات التبادلية :

نقول عن مؤثرين $\widehat{A}\,,\widehat{B}$ بأنهما تبادليان إذا حققا العلاقة التالية :

$$\widehat{A}\; \widehat{B}\, \psi - \widehat{A}\; \widehat{B}\, \psi = 0$$

وهذا يعني أن

$$\widehat{A}\;\; \widehat{B} = \widehat{B}\;\; \widehat{A}$$

ونقول عنهما أنهما تبادليان على التعاكس إذا كان :

$$\widehat{A}\;\; \widehat{B} = -\widehat{B}\;\; \widehat{A}$$

ويمكن تمثيل ما سبق بما يسمى أقواس التبادل وفق العلاقة التالية :

$$\left[\widehat{A}\,,\widehat{B}\,\right] = \widehat{A}\;\; \widehat{B} - \widehat{B}\;\; \widehat{A}$$

ويلاحظ أننا حصلنا على مؤثر جديد يسمى بالمؤثر المبادل للمؤثرين $\widehat{A}\,,\widehat{B}$. فإذا كان الناتج صفراً يكون المؤثران تبادليان.

أما المؤثر المبادل المعاكس للمؤثرين $\hat{A}\,,\hat{B}$ فهو

$$\left[\hat{A}\,,\hat{B}\right]=\hat{A}\;\hat{B}+\hat{B}\;\hat{A}$$

إذا كان الناتج صفراً يكون المؤثران تبادليان على التعاكس

مثال :

أوجد ناتج ما يلي بتطبيق أقواس التبادل

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},x\right]=\frac{\partial}{\partial x}x-x\,\frac{\partial}{\partial x}$$

$$=1+x\,\frac{\partial}{\partial x}-x\,\frac{\partial}{\partial x}$$

$$=1\neq 0$$

$$\left[x\;,\frac{\partial}{\partial x}\right]=\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x$$

$$=x\,\frac{\partial}{\partial x}-1-x\,\frac{\partial}{\partial x}$$

$$=-1\neq 0$$

أي أن المؤثرين $x\,,\,\frac{\partial}{\partial x}$ غير تبادليين.

ويلاحظ أنه لو كان المؤثران تبادليان فإن المبادل للمؤثرين يساوي الصفر وهــي علاقــة قيمة جداً في ميكانيكا الكم كما سنرى فيما بعد.

ويلاحظ أيضاً في المثال الأول إذا كان التأثير على التابع ψ فإنه يعطينا نفس التــابع ψ ولذلك يسمى بمؤثر الوحدة.

د- المؤثرات الخطية الهيرميتية (ذاتية الترافق):

لا تعتمد في ميكانيكا الكم كل المؤثرات الخطية بل تعتمد منها فقط ما يسمى بــالمؤثرات الهيرميتية. ونسمي المؤثر هرميتياً إذا تحقق لأي تابعين اثنين U و ϑ المساواة التالية

$$\int \vartheta^* \hat{L} U\, dv = \int U\ \widehat{L^*}\ \vartheta^* dv$$

ويعتبر المؤثر $\hat{L}$ هنا هرميتيا إذا كان هذا المؤثر ومرافقه $\widehat{L^*}$ يحققان العلاقة السابقة.

3- القيم الخاصة والتوابع الخاصة للمؤثرات الخطية :

عندما يؤثر مؤثر ما $\hat{A}$ على دالة ما U ونحصل بعد التأثير على نفس الدالة مضروبة بعدد ما a بحيث تتحقق العلاقة

$$\hat{A} U = aU$$

فإننا نسمي الدالة U بالدالة الخاصة للمؤثر $\hat{A}$ ونسمي a القيمة الخاصة للمؤثر $\hat{A}$

فإذا أثر المؤثر $-i\dfrac{\partial}{\partial x}$ على الدالة $U(x) = e^{ia_n x}$ فإن الناتج

$$-i\frac{\partial}{\partial x} \cdot u(x) = -i\frac{\partial}{\partial x} \cdot e^{ia_n x}$$

$$= a_n\, e^{ia_n x} = a_n u(x)$$

فالدالة $U(x)$ هو الدالة الخاصة للمؤثر $-i\dfrac{\partial}{\partial x}$ والقيم a_n هي القيم الخاصة لهذا المؤثر.

((لا ننسى أن القيم الخاصة تسمى في بعض الكتب القيم التمييزية))

يمكن للقيم a_n أن تكون مستمرة أو متقطعة ولذلك فان القيم a_n تسمي عادة بطيف المؤثر. وإذا أخذ هذا الطيف قيم متقطعة $a_1, a_2, \ldots, a_n$ فإن كل قيمة من قيم a_n تتوافق مع دالة خاصة $U_1, U_2, \ldots, U_n$ كما درسناها عند دراسة الدالة ألموجية في فقرة سابقة (قارن بين الفقرتين).

مثال :

أوجد القيمة الخاصة والدالة الخاصة للمؤثر

$$\widehat{P_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

الحل :

بفرض أن الدالة الخاصة $U(x)$ فإننا نجد وفق قواعد المؤثرات أن

$$\widehat{P_x}\,U(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}U(x) = P_x\,U(x)$$

بإصلاح العلاقة نجد

$$\frac{\partial u(x)}{u(x)} = \frac{-P_x}{i\hbar}dx = \frac{i\,P_x}{\hbar}dx$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الأولى تقبل حلاً لها الدالة:

$$U(x) = U(0)e^{i\frac{P_x}{\hbar}x}$$

وللسهولة تعتبر $U(0) = 1$ لأنها لا تهمنا في هذه الدراسة وهي تتبع شرط التنظيم. نجـد أن

$$U(x) = e^{\frac{iP_x \cdot x}{\hbar}}$$

وهذا الداة هو الدالة الخاصة للمؤثر $\widehat{P_x}$ والقيمة الخاصة P_x يمكن أن تكـون أي عـدد مستمر أو متقطع ولإثبات أنه متقطع نفرض شروط حدية على الدالة الخاصة. فمثلاً ينعدم التابع عند النقطة $x = 0$ و $x = L$ وهي دالة دورية ضمن المسافة (L) عندئذٍ نكتـب الدالة بالشكل:

$$U(x) = \cos\frac{P_x .x}{\hbar} + i\,\sin\frac{P_x \cdot x}{\hbar}$$

إن الحد الأول لايحقق الشروط الحدية بالتالي يستبعد من العلاقة أما الحد الثـاني يحقـق الشروط الحدية لأنه عندما $x = 0$ فإن

$$\sin\frac{P_x \cdot 0}{\hbar} = 0$$

وعندما $x = L$ فإنه من المفترض

$$\sin\frac{P_x \cdot L}{\hbar} = 0$$

وهذا يعني أن

$$\frac{P_x \cdot L}{\hbar} = 2\pi n$$

لأن $\sin 2\pi n = 0$ دوماً

حيث $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$

ومنه $\frac{P_x}{\hbar} = \frac{2\pi n}{L}$

وبالتالي قيم P_x متقطعة

وضمن الشروط السابقة تصبح الدالة الخاصة القسم التخيلي من الدالة $U(x)$

$$U(x) = \sin\frac{2\pi n}{L}\, x$$

لاحظ هنا أن القيم الخاصة والدالة الخاصة اعتمدا على المؤثر ثم على الشروط الحدية.

4- تعامد التوابع الخاصة للمؤثرات الهرميتية:

لقد درسنا في فقرة سابقة شرط التعامد لتابعين (دالتين)

$$\int \psi_n^* \psi_m \, dv = 0$$

عندما $m \neq n$

فإذا كان التابعين السابقين تابعين خاصين للمؤثر $\widehat{L}$ فإننا نجد من شروط المؤثر الهرميتي أن :

$$\int \psi_n^* \widehat{L} \psi_m \, dv = \int \psi_m \widehat{L^*} \psi_n^* \, dv$$

وبما أن

$$\left. \begin{aligned} \widehat{L} \psi_m &= L_m \psi_m \\ \widehat{L^*} \psi_n^* &= L_n^* \psi_n^* \end{aligned} \right\}$$

نجد

$$\int \psi_n^* L_m \psi_m \, dv - \int \psi_m L_n^* \psi_n^* \, dv = 0$$

$$\left(L_m - L_n^*\right) \int \psi_n^* \psi_m \, dv = 0$$

وضمن المؤثرات الهرمتية فإن القيم الخاصة للمؤثرات تلك هي أعداد حقيقة ويمكن البرهان على أن $L_n^* = L_n$

ومنه

$$\left(L_m - L_n\right) \int \psi_n^* \psi_m \, dv = 0$$

وبما أن $L_m - L_n \neq 0$ فإن $\int \psi_n^* \psi_m \, dv = 0$ وهو شرط التعامد

تمرين :

أثبت أن $L_n^* = L_n$

الحل :

من الشرط $\left(L_m - L_n^*\right)\int \psi_n^* \, \psi_m \, dv = 0$

فعندما $n = m$ نجد أن

$$\left(L_m - L_n^*\right)\underbrace{\int \psi_n^* \, \psi_m \, dv}_{} = 0$$

التكامل يساوي الواحد وفق شروط التنظيم $n = m$ ومنه

$$L_n - L_n^* = 0$$

أي

$$L_n = L_n^*$$

أي أن القيم الخاصة L للمؤثر الهرميتي $\hat{L}$ هي عدد حقيقي دوما.