المؤثرات operators

مقدمة:

في الفيزياء الكلاسيكية إذا أردنا إيجاد قيمة أي كمية فيزيائية لجسم ماكروسكوبي "مثل السرعة أو الطاقة الكلية أو كمية الحركة" فإننا نستخدم أجهزة القياس المناسبة في كل حالة "مثلاً نستخدم الرادار لتعيين سرعة سيارة أو طائرة".

أما في ميكانيكا الكم إذا أردنا إيجاد قيمة أي كمية فيزيائية لجسم ميكروسكوبي فإننا نبحث أولاً عن شكل المؤثر الذي يمثل هذه الكمية الفيزيائية، ثم نوجد حل معادلة القيمة الملائمة لهذا المؤثر للحصول علي القيم الملائمة التي تمثل نتيجة عملية قياس الكمية الفيزيائية. فمثلاً إذا أردنا أن نوجد الطاقة الكلية E لإلكترون ذرة الهيدروجين، نوجد أولاً الشكل المناسب لمؤثر الهاميلتونيان $\hat{H}$ الذي يمثل الطاقة الكلية للإلكترون محل الدراسة، ثم نحل معادلة شرودنجر $\hat{H}\psi = E\psi$ للحصول علي القيم الملائمة E_n والتي تمثل المقادير المطلوب قياسها.

ولأن المؤثرات تلعب دوراً رئيسياً في ميكانيكا الكم سنهتم في هذا الجزء بدراسة المؤثرات وخواصها والعلاقات الرياضية والفيزيائية بين هذه المؤثرات.

المؤثر:

يمكن تعريف المؤثر بأنه رمز يعني طلب اجراء عملية رياضية ما علي ما يلي هذا الرمز. فمثلاً المؤثر $\partial/\partial x$ يعني طلب اجراء التفاضل الجزئي للدالة التي تلي هذا المؤثر، وكذلك المؤثر sin يعني طلب حساب قيمة دالة الجيب للزاوية التي تلي هذا المؤثر.

ويمكن تعريف المؤثر بطريقة أخري كالآتي: المؤثر $\hat{A}$ هو كيان رياضي يؤثر علي أي دالة لتحويلها إلي دالة أخري. أي أن المؤثر $\hat{A}$ عملية رياضية "تعبير رياضي" عندما تؤثر علي الدالة g تحولها إلي دالة أخري u. ويمكن كتابة هذا التعريف رياضياً كالآتي:

$$\hat{A}\, g = u \qquad (1)$$

معادلة القيمة الملائمة "أو المميزة أو الذاتية أو المسموحة" لمؤثر:

إذا كانت الدالة u دالة متصلة وقيمتها محدودة في كل الفراغ المعرف، وكان تأثير المؤثر $\hat{A}$ علي الدالة u هو نفس الدالة u مضروبة في مقدار عددي ثابت a، أي أن:

$$\hat{A}\, u = a\, u \qquad (2)$$

سميت هذه المعادلة بمعادلة القيمة الملائمة "أو القيمة المميزة" للمؤثر، وسميت كل من u، a بالدالة الملائمة للمؤثر والقيمة الملائمة للمؤثر علي الترتيب.

لاحظ لو أن الدالة u تحقق العلاقة السابقة ولكنها ليست متصلة أو قيمتها غير محدودة عند أي نقطة في الفراغ المعرف، فلا يمكن تسميتها بالدالة الملائمة للمؤثر.

فمثلاً كل من الدالتين $u_1 = exp(-x)$ ، $u_2 = exp(x)$ تحققان العلاقة السابقة $\hat{A}\,u = a\,u$ للمؤثر $\hat{A} = d^2/dx^2$ حيث $a = 1$ في الحالتين، ولكن الدالة u_2 دالة غير محدودة عندما x تؤل إلي مالا نهاية. ولذلك فإن u_1 هي دالة ملائمة للمؤثر $\hat{A}$، وقيمتها الملائمة هي 1، أما الدالة u_2 لاتصلح كدالة تصف سلوك جسم كمي ولذلك لاتستخدم في نظرية الكم ولايمكن تسميتها بالدالة الملائمة للمؤثر $\hat{A}$.

طيف المؤثر:

تسمي جميع القيم الملائمة التي يمكن الحصول عليها من المؤثر $\hat{A}$ بطيف المؤثر $\hat{A}$. وهناك نوعان من طيف المؤثر، الأول الطيف المتقطع "الغير مستمر" وفيه تكون قيم a متقطعة وغير متصلة. والثاني هو الطيف المتصل "المستمر" وفيه تكون قيم a متصلة أي أنها تأخذ جميع القيم المسموحة في مدي معين من مدي الأرقام العددية.

خواص المؤثرات المستخدمة في ميكانيكا الكم:

1− مؤثرات خطية Linear operators:

المؤثرات المستخدمة في ميكانيكا الكم يجب أن تكون خطية. والمؤثر $\hat{A}$ يكون مؤثراً خطياً إذا استوفى العلاقتين الآتيتين :

$$\hat{A}(C\psi) = C\,\hat{A}\,\psi$$

$$\hat{A}\;(\psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \ldots) = \hat{A}\,\psi_1 + \hat{A}\,\psi_2 + \hat{A}\,\psi_3 + \ldots$$

حيث C مقدار ثابت. ويمكن جمع العلاقتين السابقتين في العلاقة التالية:

$$\hat{A}\;(C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + \cdots) = C_1\hat{A}\,\psi_1 + C_2\,\hat{A}\psi_2 + \cdots \tag{4}$$

وبذلك فإن المؤثرات c = ثابت، x "الإزاحة"، d/dx ، d^2/dx^2 هي مؤثرات خطية. أما المؤثر $\sqrt{}$ ، والمؤثر ln فهما مؤثران غير خطيان.

2− مؤثرات هيرميتية Hermitian operator:

القيم الملائمة للمؤثرات الخطية إما أعداد حقيقية أو أعداد مركبة "تخيلية". والمؤثرات الخطية التي ينتج عنها طيف مركب لاتصلح لأن تمثل الكميات الفيزيائية "لأنه لايمكن أن يكون ناتج قياس الكميات الفيزيائية كميات تخيلية". لذلك فالمؤثرات المستخدمة في ميكانيكا الكم يجب أن تكون خطية ذات طيف حقيقي وتسمي تلك المؤثرات الخطية ذات الطيف الحقيقي بالمؤثرات الهيرميتية. ويمكن إثبات أن شرط أن يكون المؤثر $\hat{A}$ مؤثراً هيرميتياً هو:

$$\int \psi_m^* \left(\hat{A}\,\psi_n\right) d\,\tau d = \int \psi_n \left(\hat{A}\,\psi_m\right)^* \,d\,\tau \tag{5}$$

وذلك بفرض أن ψ_m ، ψ_n دالتان ملائمتان للمؤثر $\hat{A}$ وأن a_m ، a_n هما القيمتان الملائمتان لهما:

$$\hat{A}\psi_n = a_n\,\psi_n \tag{6}$$

$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m \qquad (7)$$

وبضرب العلاقة (6) من اليسار في ψ_m^* ثم إجراء التكامل علي كل الفراغ المعرف، وبأخذ المرافق للعلاقة (7) ثم ضربها من اليسار في ψ_n ثم إجراء التكامل علي كل الفراغ المعرف نحصل علي:

$$\int \psi_m^* \left(\hat{A}\psi_n\right) d\tau = a_n \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau \qquad (8)$$

$$\int \psi_n \left(\hat{A}\psi_m\right)^* \, d\tau = a_m^* \int \psi_n \psi_m^* \, d\tau \qquad (9)$$

وبطرح العلاقة (9) من (8) نحصل علي:

$$\int \psi_m^* \left(\hat{A}\psi_n\right) d\tau - \int \psi_n \left(\hat{A}\psi_m\right)^* \, d\tau = \left(a_n - a_m^*\right) \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau \qquad (10)$$

بما أن طيف المؤثر $\hat{A}$ طيف حقيقي، أي أن $a_m^* = a_m$، فإن الطرف الأيمن للعلاقة (10) دائماً مساوياً للصفر. لأنه عندما $m = n$ يكون $\int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 1$ ولكن $a_m^* = a_n$. وعندما $m \neq n$ يكون $a_m^* \neq a_n$ ولكن $\int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 0$. وبذلك نحصل علي شرط أن يكون المؤثر $\hat{A}$ مؤثراً هيرميتياً "العلاقة (5)":

$$\int \psi_m^* \left(\hat{A}\,\psi_n\right) d\,\tau d = \int \psi_n \left(\hat{A}\,\psi_m\right)^* \, d\,\tau \qquad (5)$$

ويجب ملاحظة أن التكاملات في العلاقة (5) تكون علي كل الفراغ المعرف.

نظريات هامة علي المؤثرات الهيرميتية:

النظرية الأولي:

القيم الملائمة للمؤثر الهيرميتي قيم حقيقية.

وللإثبات ذلك نفرض أن ψ_n دالة ملائمة للمؤثر الهيرميتي $\hat{A}$ وأن a_n القيمة الملائمة:

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n \qquad (11)$$

بأخذ المرافق للعلاقة (11):

$$\left(\hat{A}\psi_n\right)^* = a_n^* \psi_n^* \qquad (12)$$

وبضرب كل من العلاقة (11)، (12) من اليسار في ψ_n^*، ψ_n علي لترتيب ثم إجراء التكامل علي كل الفراغ المعرف نحصل علي:

$$\int \psi_n^* \left(\hat{A}\psi_n\right) d\tau = a_n \int \psi_n^* \psi_n \, d\tau = a_n \qquad (13)$$

$$\int \psi_n \left(\hat{A}\psi_n\right)^* \, d\tau = a_n^* \int \psi_n \psi_n^* \, d\tau = a_n^* \qquad (14)$$

ولأن المؤثر $\hat{A}$ مؤثر هيرميتي فيكون الطرفان الأيسران للعلاقتين (13)، (14) متساويين، وبالتالي نحصل علي:

$$a_n = a_n^*$$

وهذا لايتحقق إلا عندما تكون a_n عددا حقيقياً.

النظرية الثانية:

أي دالتين ملائمتين للمؤثر الهيرميتي ولهما قيمتين ملائمتين مختلفتين هما دالتان متعامدتان.

ولإثبات ذلك نفرض أن ψ_n ، ψ_m دالتان ملائمتان للمؤثر الهيرميتي $\hat{A}$ وأن a_m، a_n هما القيمتان الملائمتان لهما:

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n \qquad (15)$$

$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m \qquad (16)$$

وبضرب العلاقة (15) من اليسار في ψ_m^* ثم إجراء التكامل علي كل الفراغ المعرف نحصل علي:

$$\int \psi_m^* \left(\hat{A}\psi_n\right) d\tau = a_n \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau \qquad (17)$$

ولأن المؤثر $\hat{A}$ مؤثر هيرميتي، فإن الطرف الأيسر للعلاقة (17) يساوى:

$$\int \psi_m^* \left(\hat{A}\psi_n\right) d\tau = \int \psi_n \left(\hat{A}\psi_m\right)^* \, d\tau = a_m \int \psi_n \psi_m^* \, d\tau \qquad (18)$$

وذلك باستخدام العلاقة (16) والنظرية السابقة والتي تنص علي أن a_m عدد حقيقي. ومن العلاقتين (17)، (18) نجد أن:

$$(a_n - a_m)\int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 0 \qquad (19)$$

وحيث أن $a_m \neq a_n$ عندما $m = n$ ، فنحصل علي:

$$\int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 0 \qquad ; \qquad n \neq m \qquad (20)$$

وهذا هو شرط تعامد الدالتان الملائمتان ψ_m ، ψ_n للمؤثر الهيرميتي $\hat{A}$.

نتيجة علي النظرية الثانية "الإنحلال أو التفسخ "degeneracy :

في حالة الإنحلال من الرتبة n "التفسخ n-fold degenerate" والتي تقابلنا في بعض الأنظمة الكمية يكون هناك n دالة ذاتية ψ_i مختلفة "غير معتمدة خطية linearly independent" لها نفس القيمة الذاتية a للمؤثر $\hat{A}$. وطبقاً للنظرية السابقة تكون تلك الدوال الذاتية المختلفة ψ_I غير متعامدة. أي أنه في حالة:

$$\hat{A}\psi_i = a\psi_i \qquad \forall\, i = 1,2,\cdots,n$$

$$\int \psi_m^* \psi_n \, d\tau \neq 0 \qquad ;\ m,n \in i\ ,\ m \neq n$$

ويمكن تلخيص تلك النتيجة في العبارة " **الدوال المنحلة لن تكون دوالاً متعامدة**".

النظرية الثالثة:

مجموعة الدوال الملائمة ψ_i والتي لها نفس القيمة الذاتية a للمؤثر $\hat{A}$ والتي تمثل حالة الإنحلال من الرتبة n، تكون فراغاً جزئياً بعده n ويسمي الفراغ المتعلق بالقيمة الذاتية a. وأي تركيبة خطية من تلك المجموعة تمثل دالة ذاتية للمؤثر.

ولإثبات ذلك سوف ندرس حالة إنحلال من الرتبة 2 وبفرض أن:

$$\hat{A}\psi_1 = a\psi_1$$

$$\hat{A}\psi_2 = a\psi_2$$

وبفرض التركيبة الخطية:

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$$

وبالتأثير عليها بالمؤثر $\hat{A}$ نحصل علي:

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi &= \hat{A}C_1\psi_1 + \hat{A}C_2\psi_2 \\ &= C_1\hat{A}\psi_1 + C_2\hat{A}\psi_2 = C_1 a\psi_1 + C_2 a\psi_2 \\ &= a(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) \\ &= a\psi\end{aligned}$$

أي أن التركيبة الخطية ψ دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$.