مثال:

هل المؤثر $\hat{A}=d/dx$ مؤثر هيرميتي أم غير هيرميتي؟

الحل:

لحل هذا المثال سنحسب طرفي العلاقة (5) كل علي حدى ، ثم نبحث هل الطرفين متساويين فيكون المؤثر هيرميتي أم غير متساويين فيكون المؤثر غير هيرميتي.

أولاً: نحسب الطرف الأيسر:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\left(\hat{A}\ \psi_2\right)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\left(\frac{d}{dx}\psi_2\right)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx$$

ثانياً: نحسب الطرف الأيمن مستخدمين نظرية التكامل بالتجزيء والتي وتنص علي:

$$\int u\,d\mathrm{v}=u\,\mathrm{v}-\int \mathrm{v}\,du$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\left(\hat{A}\ \psi_1\right)^*dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\left(\frac{d}{dx}\psi_1\right)^*dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\frac{d\psi_1^*}{dx}dx$$

$$=\psi_2\psi_1^*\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx=-\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx$$

$\psi_2\psi_1^*\Big|_{-\infty}^{\infty}=0$ لأن الدالة ψ دالة حالة فيجب أن تكون محدودة "أي تؤول للصفر عند المالانهاية". وواضح أن:

$$\int\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx\neq-\int\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx$$

أي أن الطرف الأيسر لايساوي الطرف الأيمن وبالتالي فإن المؤثر $\hat{A}=d/dx$ مؤثر غير هيرميتي.

وهناك امثله محلوله في كتاب اساسيات ميكانيك الكم لسالم الشماع على المؤثر الهرميتي

3- المؤثرات المتبادلة وأقواس التبادل :

عندما تدعو الحاجة إلي التأثير بمؤثرين $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ معاً علي نفس الدالة ψ فيجب أن نولي أهمية كبيرة إلي أي المؤثرين يؤثر أولاً وأيهما يؤثر ثانياً. فبصفة عامة $\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi$.

ويسمي المقدار $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ بمبادلة المؤثرين "أو تبادل العكوس "commutator" ويكتب في الصورة المختصرة:

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

ويسمي المؤثران اللذان يؤديان إلي نفس النتيجة إذا أُبدِلَ ترتيب تأثيرهما بأنهما مؤثران متبادلان، وهما يحققا العلاقة:

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

أما المؤثران اللذان لايعطيا نفس النتيجة إذا أُبدِلَ ترتيب تأثيرهما بأنهما مؤثران غير متبادلان، وهما يحققا العلاقة:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

نظريات هامة علي خواص أقواس التبادل:

النظرية الأولي:

لو كان لدينا المؤثران $\hat{B}, \hat{A}$ لهما نفس المجموعة الكاملة المعايرة "المسواة" والمتعامدة من الدوال الذاتية ψ_n فإن المؤثرين يكونان متبادلان.

أي أن المطلوب إثبات أن:

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

عندما يكون:

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

$$\hat{B}\psi_n = b_n \psi_n$$

بضرب المعادلة الأولي من اليسار في $\hat{B}$ والثانية في $\hat{A}$ نحصل علي:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = a_n \hat{B}\psi_n = a_n b_n \psi_n$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n = b_n \hat{A}\psi_n = b_n a_n \psi_n$$

وبطرح العلاقتين السابقتين نحصل علي:

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n - \hat{B}\hat{A}\psi_n = 0$$

أي أن:

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

النظرية الثانية:

لو كان لدينا المؤثران $\hat{B}, \hat{A}$ وكانا متبادلين فإن المؤثرين لهما نفس المجموعة الكاملة المعايرة "المسواة" والمتعامدة من الدوال الذاتية ψ_n.

هذه النظرية عكس النظرية السابقة. ولإثبات ذلك نفرض أن المؤثر $\hat{A}$ له مجموعة الدوال الذاتية المتعامدة والمسواة ψ_n أي أن:

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

بضرب هذه المعادلة من اليسار في $\hat{B}$ نحصل علي:

$$\hat{B}\,\hat{A}\psi_n = a_n\,\hat{B}\psi_n$$

وبما أن المؤثرين متبادلين أي أن:

$$\hat{B}\,\hat{A}\psi_n = \hat{A}\,\hat{B}\psi_n$$

فمن العلاقتين السابقتين نحصل علي:

$$\hat{A}\,\hat{B}\psi_n = a_n\,\hat{B}\psi_n$$

أي أن $\hat{B}\psi_n$ دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ ولها نفس القيمة الذاتية a_n وحيث أن $\hat{B}\psi_n$ ، ψ_n ليستا حالة أنحلال فلابد أن يكون:

$$\hat{B}\psi_n = \text{constant}\ \psi_n = b_n \psi_n$$

أي أن المؤثر $\hat{B}$ له نفس مجموعة الدوال الذاتية المتعامدة والمسواة ψ_n.

خواص أقواس التبادل:

هناك العديد من خواص أقواس التبادل سنذكر هنا بعضاً منها:

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

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

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

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

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

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

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

$$[\hat{A}_1\hat{A}_2,\hat{B}_1\hat{B}_2] = \hat{B}_1[\hat{A}_1\hat{A}_2,\hat{B}_2] + [\hat{A}_1\hat{A}_2,\hat{B}_1]\hat{B}_2$$

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

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

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

مثال :

أثبت أن:

$$\left[x,\frac{d}{dx}\right]=-1$$

$$\left[\frac{d}{dx},x\right]=+1$$

الحل :

لإثبات ذلك نحسب قيمة:

$$\int\left[x,\frac{d}{dx}\right]f(x)dx=\int x\frac{d}{dx}f(x)dx-\int\frac{d}{dx}x\;f(x)dx$$

الحد الثاني في الطرف الأيمن يمكن حسابه من قانون تفاضل حاصل ضرب دالتين ويساوي:

$$\int\frac{d}{dx}x\,f(x)dx=\int x\frac{d}{dx}f(x)dx+\int f(x)dx$$

$$\therefore\;\int\left[x,\frac{d}{dx}\right]f(x)dx=-\int f(x)dx$$

أي أن:

$$\left[x,\frac{d}{dx}\right]=-1$$

وبالمثل:

$$\int\left[\frac{d}{dx},x\right]f(x)dx=\int\frac{d}{dx}x\,f(x)dx-\int x\frac{d}{dx}\,f(x)dx$$

$$=\int x\frac{d}{dx}f(x)dx+\int f(x)dx-\int x\frac{d}{dx}f(x)dx$$

$$=\int f(x)dx$$

أي أن:

$$\left[\frac{d}{dx},x\right]=+1$$

مثال :

احسب:

$$[\,\hat{x}\,,\hat{p}_x\,]$$

الحل :

$\hat{p}_x$ هو مؤثر كمية الحركة في اتجاه x ويساوي $-i\hbar\,\partial/\partial x$ ، $\hat{x}$ هو مؤثر الإحداثي x ويساوي x. والمطلوب الآن حساب قيمة:

$$\int[\hat{x}\,,\hat{p}_x]\,f(x)\partial x=-i\hbar\int x\frac{\partial}{\partial x}f(x)\partial x+i\hbar\int\frac{\partial}{\partial x}x\;f(x)\partial x$$

$$=-i\hbar\int x\frac{\partial}{\partial x}f(x)\partial x+i\hbar\int x\frac{\partial}{\partial x}f(x)\partial x+i\hbar\int f(x)\partial x$$

$$=i\hbar\int\;f(x)\partial x$$

أي أن:

$$[\,\hat{x}\,,\hat{p}_x\,]=i\hbar$$

وبالمثل يمكن اثبات أن:

$$[\,\hat{p}_x\,,\hat{x}\,]=-i\hbar$$

$$،[\,\hat{p}_y\,,\hat{y}\,]=-i\hbar$$

$$،[\,\hat{p}_z\,,\hat{z}\,]=-i\hbar$$

ومن هذا يتبين أن مؤثرات كمية الحركة والإحداثيات هي مؤثرات غير متبادلة، أي لايمكن قياسهما معاً في آن واحد.

مثال :

احسب:

$$[\hat{p}_x , \hat{p}_y]$$

الحل :

$\hat{p}_x$ هو مؤثر كمية الحركة في اتجاه x ويساوي $-i\hbar\,\partial/\partial x$ ، $\hat{p}_y$ هو مؤثر كمية الحركة في اتجاه y ويساوي $-i\hbar\,\partial/\partial y$ والمطلوب الآن حساب قيمة:

$$\int [\hat{p}_x , \hat{p}_y]\, f(x,y)\partial x\,\partial y = (-i\hbar)^2 \int \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} f(x,y)\partial x\,\partial y$$

$$- (-i\hbar)^2 \int \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} f(x,y)\partial x\,\partial y$$

$$= 0$$

أي أن:

$$[\hat{p}_x , \hat{p}_y] = 0$$

وبالمثل يمكن اثبات أن:

$$[\hat{p}_x , \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{p}_y , \hat{p}_z] = 0$$ ،

ومن هذا يتبين أن المؤثرات التي تمثل مركبات كمية الحركة هي مؤثرات متبادلة، أي يمكن تحديد المركبات الثلاثة لكمية الحركة بدقة تامة في آن واحد.