

المؤثرات Operators

ان كل عملية رياضية محددة مثل إضافة رقم مثلا ستة او الضرب في رقم مثلا أربعة او C الخ يمكن تمثيلها بوساطة رمز خاص يسمى مؤثر Operator . فالمؤثر اذن ماهو الا رمز يأمرنا بعمل شيء على ما يتبعه فمثلا في التعبير $\sqrt{3}$ يكون $\sqrt{\quad}$ هو المؤثر وهو يأمرنا بأخذ الجذر التربيعي لما يتبعه. وفي هذه الحالة سيكون الرقم ثلاثة. وكمثال اخر $\frac{d}{dx}(x^2 + x + 1)$ وحين يكون المؤثر ها هنا هو $\frac{d}{dx}$ فهو يطلب ان نأخذ التفاضل نسبة الى x . لما يتبعه وهو $(x^2 + x + 1)$. وبصورة عامة تتميز المؤثرات عن الرموز الأخرى بوضع علامة رأس سهم (^) فوقها مثلا P او Q واذا كان المؤثر P يمثل a+ , والمؤثر Q يمثل C فإن PQf يعني a + cf حيث ان f هي الدالة. اما QPf فتعني C (a+f) وهكذا يمكننا ان نكتب:

$$\hat{P} \hat{Q} f = \hat{Q} \hat{P} f + (c - 1) a$$

وتسمى مثل هذه المعادلة مؤثر Operator Equation ولنأخذ حالة أخرى : اذا كان المؤثر \hat{P} يساوي $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_{YZ}$ والمؤثر \hat{Q} يساوي $\left(\frac{\partial}{\partial y}\right)_{XZ}$ فعندئذ يكون :

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

كيمياء تربية بنات الانبار

حين نتعامل مع المؤثرات يجب علينا ان نكون حذرين في ترتيب عمل هذه المؤثرات والمعتاد عليه ان نبدأ دائما بالمؤثر الكائن على جهة اليمين ونعمل باتجاه اليسار.

$$\hat{Q} \hat{P} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$$

وهذا يعني ان $\hat{P} \hat{Q} = \hat{Q} \hat{P}$, وفي مثل هذه الحالة يقال عن هذين المؤثرين بأنهما متبادلان Commute . وتدعى الكمية $\hat{P} \hat{Q} = \hat{P} \hat{Q}$ بالمبدل Commutator . وتكتب غالبا بالشكل $[\hat{P}, \hat{Q}]$. فإذا كان \hat{P}, \hat{Q} متبادلين فعندئذ تكون قيمة المبدل صفرا . وبالعكس عندما تكون قيمة المبدل صفرا فإن \hat{P}, \hat{Q} متبادلان.

في ميكانيك الكم تستخدم المؤثرات الخطية Linear Operators فقط. ويكون المؤثر خطيا اذا كان ما يلي صحيحا:

$$P(f + g) = \hat{P}f + \hat{P}g$$

$$\hat{P}nf = n\hat{P}f$$

حيث ان n هي المقدار الثابت ... ويعتبر d/dx مؤثرا خطيا ولكن المؤثر $\sqrt{\quad}$ ليس مؤثرا خطيا . مثلا $\sqrt{3+4} \neq \sqrt{3} + \sqrt{4}$. ان المؤثر المستخدم كثيرا في ميكانيك الكم هو $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$. ويسمى عامل ديل او عامل لابلاس Del or Laplace factor وهو مرتبط بالطاقة الحركية ويعبر عنه بدلالة الاحداثيات الديكارتية كما يلي :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

وبدلالة الاحداثيات الكروية القطبية يكتب بالشكل التالي:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

معادلات القيمة الذاتية (قيمة ايجن) Eigen Value Equations

ان معادلة من نوع $\hat{P}(qi) F(qi) = n F(qi)$ تدعى بمعادلة القيمة الذاتية , ذلك ان $\hat{P}(qi)$ هو المؤثر , و $F(qi)$ هي الدالة , و n هي المقدار الثابت. فعندما يعمل مؤثر على دالة فان النتيجة ستكون ظهور نفس الدالة مضروبة بمقدار ثابت, ويعرف مثل هذه المعادلة بمعادلة القيمة الذاتية وتسمى الدالة بالدالة الذاتية (او دالة ايجن) اما المقدار الثابت فيمثل القيمة الذاتية (او قيمة ايجن) تلعب معادلات القيمة الذاتية دورا رئيسيا في الصياغة الرياضية لمعادلات ميكانيك الكم. ففي هذا المجال , يكون \hat{P} عادة مؤثرا تفاضليا, وعندئذ تكون معادلة القيمة الذاتية معادلة تفاضلية.

ان المسألة الرياضية لميكانيك الكم هي إيجاد الحل للدالة الذاتية F والقيمة الذاتية n لتلك المعادلات , **كيمياء تربية بنات الانبلس** \hat{P} يساوي $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ والمطلوب هو إيجاد الدالات $f(x)$ بحيث تعيد نفسها مضروبة بثابت عندما يعمل عليها المؤثر \hat{P} . ومن النظر في الشكل الخاص للمؤثر هنا يتضح لنا اننا نحتاج الى الدالة التي ترجع الى شكلها الأصلي عند تفاضلها مرتين. يوجد العديد من الدالات التي تمتلك هذه الخاصية مثل $\sin nx$, $\cos nx$, $e^{\mp nx}$ ولناخذ $f(x) = \sin nx$ فعليه:

$$\begin{aligned} \hat{P}(x) f(x) &= \frac{d^2}{dx^2} f(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \sin nx \right) \\ &= \frac{d}{dx} (n \cos nx) = -n^2 \sin nx \end{aligned}$$

وهكذا اذا كانت n كمية ثابتة , فإن الدالة $f(x) = \sin nx$ تمثل الدالة الذاتية للمؤثر d^2/dx^2 مع قيمة ذاتية هي $-n^2$.

الأنظمة المحافظة Conservative Systems

ان المسألة الأساسية للميكانيك الكلاسيكي هو وصف الحركة لانظمة من الجسيمات تحت تأثير قوى مختلفة , وبصورة عملية اكثر , المسألة هي حل المعادلات التفاضلية الناتجة من قانون نيوتن الثاني

$$F = m a$$

الذي يربط القوة F المسلطة على الجسم مع التعجيل a الذي يعانیه الجسم ، ان مفهوم النظام المحافظ : هو النظام الذي فيه يكون حاصل جمع الطاقة الحركية Kinetic Energy وطاقة الجهد (الكامنة) Potential Energy مساويا لكمية ثابتة مع الزمن. فالنظام المحافظ اذن هو نظام معزول لا يتأثر بالقوى الخارجية وكذلك لا يمتلك قوى داخلية مشتتة كالاحتكاك Friction وهناك تعريف اخر وهو: بأنه النظام الذي يمكن فيه اشتقاق القوى من دالة الجهد V كالآتي :

$$F = - \nabla V$$

ولاجل توضيح ان تعريفي النظام المحافظ متكافان ، نأخذ حالة جسم منفرد مجبر على الحركة في اتجاه واحد وليكن x . حسب قانون نيوتن الثاني لهذه الحالة كالآتي:

$$F_x = m \frac{d^2 x}{dt^2}$$

$$F_x = - \frac{d V(x)}{dx}$$

حيث ان $\nabla = \frac{d}{dx}$ ، وبالتعويض نحصل على

$$- \frac{d V(x)}{dx} = m \frac{d^2 x}{dt^2}$$

حيث $\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{dx}{dt} = \frac{d\dot{x}}{dt}$ ، لان $\frac{dx}{dt} = \dot{x}$ ، وعند اجراء التكامل سينتج

$$- \int \frac{d V(x)}{dx} dx = m \int \frac{d\dot{x}}{dt} dx$$

$$- \int d V(x) = m \int \dot{x} dx$$

$$- V(x) + C = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

$$\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) = C$$

حيث ان C هو ثابت التكامل. وهكذا يتضح ان مجموع طاقة الجهد والطاقة الحركية للجسيم غير معتمدة على الزمن. وعندئذ يكون تعريفا النظام المحافظ متكافئين. ان اية خاصية لنظام ميكانيكي لا تعتمد على الزمن تدعى بثابت الحركة للنظام وفي هذه الحالة المذكورة انفا يكون ثابت الحركة مساويا للطاقة الكلية E للجسيم.