

**ميكانيكا المصفوفات**  
*Matrix Mechanics*

## ميكانيكا المصفوفات

## التمثيل المصفوفي لهيزنبرج

## Heisenberg Matrix Representation

مقدمة :

في عام ١٩٢٥ م أدخل هيزنبرج طريقة جديدة لوصف حالة الأنظمة الكمية ، وذلك باستخدام المصفوفات ( Matrices ) ، حيث وصف حالة أي نظام ( تمثله الدالة  $\psi$  ) بمصفوفة ذات عمود واحد  $\left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \psi \end{array} \right]$  ، كما وصف الدالة المركبة المرافقة  $\psi^*$  بمصفوفة ذات صف واحد  $\left[ \begin{array}{c} \psi^* \end{array} \right]$  ، أما المؤثر  $\hat{A}$  فوصفه بمصفوفة مربعة من رتبة  $n \times n$  ، صورتها :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

حيث  $a_{ij}$  هي عناصر المصفوفة التي تمثل المؤثر  $\hat{A}$  .

وحيث أن المؤثرات في ميكانيكا الكم هي مؤثرات خطية ، ويمكن تمثيلها بالمصفوفات ، فيمكن تمثيل مختلف المعادلات والعمليات في ميكانيكا الكم بلغة المصفوفات .

وقد تنتج عن ذلك أحد فروع ميكانيكا الكم الهامة وهو :

ميكانيكا المصفوفات ( Matrix Mechanics ) ، وقد تم تطوير ميكانيكا المصفوفات على يد كل من هيزنبرج وماكس بورن .

العناصر المصفوفية ( Matrix elements ) : ( مصفوفات الكميات الطبيعية )

نعتبر نظام كمي ، له دالة موجية إختيارية  $\Psi$  ، وأن  $\{\psi_n\}$  هي مجموعة الدوال الموجية الكاملة ( أو التامة ) له ، بحيث أن :

$$\Psi = \sum_n a_n \psi_n$$

ومن تعريف القيمة المتوسطة لكمية طبيعية  $f$  حيث :

$$\langle f \rangle = \bar{f} = \int \Psi^* f \psi d\tau$$

وبالتعويض عن :

$$\Psi^* = \sum_n a_n^* \psi_n^* , \quad \Psi = \sum_m a_m \psi_m$$

$$\therefore \langle f \rangle = \bar{f} = \int \left( \sum_n a_n^* \psi_n^* \right) f \left( \sum_m a_m \psi_m \right) d\tau$$

$$= \sum_n \sum_m a_n^* a_m \int \psi_n^* f \psi_m d\tau = \sum_n \sum_m a_n^* a_m f_{nm} \quad (1)$$

حيث

$$f_{nm} = \int \psi_n^* f \psi_m d\tau \quad (2)$$

الكميات  $f_{nm}$  تسمى العناصر المصفوفية ( Matrix elements ) وتمثل مصفوفة الكمية الطبيعية  $f$  .

يمكن كتابة  $f_{nm}$  على شكل مصفوفة رتبة كالتالي :

$$f_{nm} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \dots & f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & \dots & f_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_{n1} & f_{n2} & \dots & f_{nn} \end{pmatrix}$$

المعنى الطبيعي للعناصر المصفوفية :

تعتبر العناصر المصفوفية  $f_{nm}$  عن إنتقال النظام الكمي ( إلكترون مثلاً ) من الحالة ( m ) إلى الحالة ( n ) .

فإذا كان  $w_{nm}$  هو تردد الإشعاع ( أو الطاقة ) المنبعثة عند إنتقال إلكترون من الحالة ذات الطاقة  $E_n$  إلى الحالة ذات الطاقة  $E_m$  ، فإنه طبقاً لقاعدة التردد لبرهرفان :

$$E_n - E_m = \hbar w_{nm}$$

$$\therefore w_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad \text{_____ (3)}$$

يسمى  $w_{nm}$  بتردد الإنتقال ( Transition Frequency ) بين الحالتين  $n$  ,  $m$  .  
إعتماد العناصر المصفوفية  $f_{nm}$  على الزمن يتحدد بإعتماد الدوال الموجية على الزمن ، وتكتب بالصورة :

$$f_{nm}(t) = f_{nm} e^{i w_{nm} t} \quad \text{_____ (4)}$$

حيث  $f_{nm} = \int \psi_n^* f \psi_m d\tau$  هي مصفوفة الكمية  $f$  التي لا تعتمد على الزمن .  
يلاحظ أن العناصر المصفوفية عندما  $n = m$  تسمى عناصر قطرية ، وهي كميات حقيقية تمثل القيم الذاتية للمؤثر المستخدم .

### خواص العناصر المصفوفية للكميات الطبيعية :

وجد هيزنبرج أن هناك تناظراً بين المؤثرات والجبر الذي يحكمها والمصفوفات وجبرها ، حيث أن كل مؤثر يمكن تمثيله بمصفوفة ، وبمعنى آخر فإن الجبر الذي يتحكم في العناصر المصفوفية ( $f_{nm}$ ) لكمية طبيعية ( $f$ ) هو نفسه جبر المصفوفات ، ولتوضيح هذا التناظر : فإنه يمكننا إثبات الآتي :

$$(i) \quad (f + g)_{nm} = f_{nm} + g_{nm}$$

$$(ii) \quad (\lambda f)_{nm} = \lambda f_{nm} , \lambda \text{ ثابت}$$

$$(iii) \quad (fg)_{nm} = \sum_k f_{nk} g_{km}$$

الإثبات :

$$(i) \quad (f+g)_{nm} = \int \psi_n^* (f+g) \psi_m \, d\tau \\ = \int \psi_n^* f \psi_m \, d\tau + \int \psi_n^* g \psi_m \, d\tau = f_{nm} + g_{nm}$$

$$(ii) \quad (\lambda f)_{nm} = \int \psi_n^* \lambda f \psi_m \, d\tau \\ = \lambda \int \psi_n^* f \psi_m \, d\tau = \lambda f_{nm}$$

$$(iii) \quad (fg)_{nm} = \int \psi_n^* fg \psi_m \, d\tau$$

ولنكتب مفكوك الدالة  $(g\psi_m)$  بدلالة الدوال الذاتية  $\psi_k$  بالصورة :

$$(g\psi_m) = \sum_k a_k \psi_k$$

$$\therefore (fg)_{nm} = \sum_k a_k \int \psi_n^* f \psi_k \, d\tau \\ = \sum_k a_k f_{nk} \quad \text{_____ (1)}$$

ولإيجاد  $a_k$  :

$$g_{sm} = \int \psi_s^* g \psi_m \, d\tau$$

$$(g\psi_m) = \sum_k a_k \psi_k \quad \text{وبكتابة}$$

$$\therefore g_{sm} = \sum_k a_k \underbrace{\int \psi_s^* \psi_k \, d\tau}_{\delta_{sk}} = \sum_k a_k \delta_{sk}$$

$$\therefore \boxed{g_{km} = a_k}$$

وبالتعويض في (1) :

$$(fg)_{nm} = \sum_k f_{nk} g_{km}$$

وهو المطلوب .

القيم الذاتية والمتجهات الذاتية للمصفوفة الممثلة لمؤثر :

لإيجاد القيم الذاتية والدوال الذاتية لمؤثر  $\hat{A}$  ممثل بمصفوفة في ميكانيكا المصفوفات :

نكتب معادلة القيمة الذاتية للمؤثر  $\hat{A}$  :

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi \quad \text{_____ (1)}$$

إذا كانت  $\{\psi_n\}$  هي مجموعة تامة من الدوال العيارية المتعامدة فإن الدالة  $\Psi$  يمكن كتابتها بالصورة :

$$\Psi = \sum_n a_n \psi_n \quad \text{_____ (2)}$$

بالتعويض في (1) :

$$\therefore \hat{A} \sum_n a_n \psi_n = \lambda \sum_n a_n \psi_n$$

$$\therefore \sum_n a_n (\hat{A}\psi_n - \lambda\psi_n) = 0$$

وبالضرب في  $\psi_m^*$  والتكامل على كل الفراغ نحصل على :

$$\sum_n a_n \left[ \underbrace{\int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau}_{A_{mn}} - \lambda \underbrace{\int \psi_m^* \psi_n d\tau}_{\delta_{mn}} \right] = 0$$

$$\therefore \sum_n a_n [A_{mn} - \lambda \delta_{mn}] = 0 \quad \text{_____ (3)}$$

$$A_{mn} = \int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau, \quad \int \psi_m^* \psi_n d\tau = \delta_{mn} \quad \text{حيث :}$$

العلاقة (3) تمثل مجموعة معادلات جبرية متجانسة من الدرجة الأولى (أي خطية) في المجاهيل  $a_n$ .

وهذه المجموعة من المعادلات لها حل غير صفري فقط إذا كان محدد المعاملات يساوي صفراً ، أي إذا كان :

$$|A_{mn} - \lambda \delta_{mn}| = 0$$

أي إذا كان :

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mm} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

حيث  $A_{nm}$  تمثل عناصر المصفوفة الممثلة للمؤثر  $\hat{A}$  .

وتعرف هذه المعادلة بالمعادلة العالمية ( Secular equation ) أو معادلة القيمة الذاتية .

وجذور هذه المعادلة ( التي يعتبر المجهول فيها هو  $\lambda$  ) هي القيم الممكنة للكمية  $\lambda$  ، أي القيم الذاتية لهذه الكمية ، وعددها  $n$  قيمة .

ومجموعة قيم  $\bar{a}_n$  التي تحقق المعادلة (3) عندما تساوى  $\lambda$  إحدى هذه القيم الذاتية ، تعين الدوال الذاتية المناظرة .

ملاحظات :

(1) من تعريف العناصر المصفوفية للكمية  $f$  :

$$f_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_m d\tau$$

وإذا كانت  $\psi_n$  هي الدوال الذاتية للكمية  $f$  ومن معادلة القيمة الذاتية :

$$\hat{f} \psi_m = \lambda_m \psi_m$$

$$\therefore f_{nm} = \int \psi_n^* \lambda_m \psi_m d\tau = \lambda_m \int \psi_n^* \psi_m d\tau = \lambda_m \delta_{nm}$$

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases} \quad \text{حيث}$$

وهذا يعني أن العناصر القطرية لمصفوفة الكمية  $f$  فقط هي التي سوف تختلف عن الصفر .

أيضاً : فإن :

$$f_{nm} = \lambda_m$$

## الباب الثاني

### ميكانيكا المصفوفات

وهذا يعني أن كل من هذه العناصر القطرية هو قيمة ذاتية للكمية الطبيعية .

وبمعنى آخر : فإن العناصر القطرية لمصفوفة الكمية  $f$  تمثل القيم الذاتية للكمية  $f$  .

وبصفة عامة : في ميكانيكا الكم فإن مصفوفة أي كمية طبيعية  $f$  ( مثل الطاقة أو

كمية الحركة أو غيرها ) يجب أن توضع في الصور القطرية (diagonal form)

حتى تكون عناصرها القطرية ممثلة للقيم الذاتية للكمية  $f$  .

(٢) في حالة المصفوفة القطرية :

إذا كانت المصفوفة المصاحبة للمؤثر  $\hat{A}$  هي مصفوفة قطرية فإن القيم الذاتية

لـ  $\hat{A}$  هي عناصر هذا القطر .

الإثبات :

في حالة المصفوفة القطرية فإن :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & A_{22} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & A_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

المعادلة العالمية ( أو معادلة القيمة الذاتية ) هي :

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & 0 & 0 & \dots \\ 0 & A_{22} - \lambda & 0 & \dots \\ 0 & 0 & A_{33} - \lambda & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0$$

$$\therefore (A_{11} - \lambda)(A_{22} - \lambda) \dots (A_{nn} - \lambda) = 0$$

$$\therefore \lambda = A_{11}, A_{22}, A_{33}, \dots, A_{nn}$$

أي أن القيم الذاتية لـ  $A$  هي العناصر القطرية لمصفوفة  $A$  .

أثر مصفوفة (Trace or Spur) :

يعرف أثر (Trace) مصفوفة بأنه مجموع عناصرها القطرية

$$Tr A = Sp A = \sum A_{ii}$$

ويمكن إثبات أن :

$$(i) \quad Tr A = \sum_i \langle i | A | i \rangle$$

$$(ii) \quad Tr(AB) = Tr(BA)$$

$$(iii) \quad Tr(AA^+) = \sum_i \sum_j |\langle i | A | j \rangle|^2$$

أمثلة محلولة :

مثال (1) : أثبت أن المؤثر الهرميتي يصاحبه مصفوفة هيرميتية .

أو بمعنى آخر : التمثيل المصفوفي لمؤثر هيرميتي يكون هيرميتياً .

الحل :

للمؤثر الهرميتي فإن :

$$\int \psi^* A \psi d\tau = \int \psi A^* \psi^* d\tau$$

والمطلوب إثبات أن المصفوفة [A] المصاحبة للمؤثر A هي مصفوفة

هيرميتية ، بمعنى أن عناصر المصفوفة تخضع للعلاقة :

$$A_{nm} = A_{mn}^*$$

وأن العناصر القطرية  $A_{nn}$  تكون حقيقية .

ولإثبات ذلك : حيث أن  $\psi$  هي دالة إختيارية ، فيمكننا كتابة :  $\psi = \psi_1 + \psi_2$

حيث  $\psi_1$  ,  $\psi_2$  دالتان إختياريتان .

$$\therefore \int \psi^* A \psi d\tau = \int (\psi_1^* + \psi_2^*) A (\psi_1 + \psi_2) d\tau \quad \text{_____ (1)}$$

$$\int \psi A^* \psi^* d\tau = \int (\psi_1 + \psi_2) A^* (\psi_1^* + \psi_2^*) d\tau \quad \text{_____ (2)}$$

وبتطبيق الخاصية الهرميتية (بمساواة (1) ، (2) ) :

$$\begin{aligned} \therefore \int (\psi_1^* + \psi_2^*) A (\psi_1 + \psi_2) d\tau &= \int (\psi_1 + \psi_2) A^* (\psi_1^* + \psi_2^*) d\tau \\ \therefore \int \psi_1^* A \psi_1 d\tau + \int \psi_1^* A \psi_2 d\tau + \int \psi_2^* A \psi_1 d\tau + \int \psi_2^* A \psi_2 d\tau \\ &= \int \psi_1 A^* \psi_1^* d\tau + \int \psi_1 A^* \psi_2^* d\tau + \int \psi_2 A^* \psi_1^* d\tau + \int \psi_2 A^* \psi_2^* d\tau \\ \therefore \int (\psi_1^* A \psi_2 - \psi_1 A^* \psi_2^*) d\tau &= \int (\psi_2 A^* \psi_1^* - \psi_2^* A \psi_1) d\tau \end{aligned}$$

وبكتابة  $\psi_1 = e^{ia} \psi_m$  ،  $\psi_2 = e^{ib} \psi_n$  ثابتان إختاريان

$$\begin{aligned} \therefore \left[ e^{i(b-a)} \int \psi_m^* A \psi_n - e^{i(a-b)} \int \psi_m A^* \psi_n^* \right] d\tau \\ = \left[ e^{i(b-a)} \int \psi_n A^* \psi_m^* - e^{i(a-b)} \int \psi_n^* A \psi_m \right] d\tau \\ \therefore e^{i(b-a)} \left[ \int \psi_m^* A \psi_n - \int \psi_n A^* \psi_m^* \right] d\tau \\ = e^{i(a-b)} \left[ \int \psi_m A^* \psi_n^* - \int \psi_n^* A \psi_m \right] d\tau \\ \therefore e^{i(b-a)} [A_{mn} - A_{nm}^*] = e^{i(a-b)} [A_{mn}^* - A_{nm}] \end{aligned}$$

وحيث أن  $a, b$  إختاريان فإن هذه العلاقة تكون محققة إذا كان :

$$\begin{aligned} A_{mn} - A_{nm}^* = 0 \quad , \quad A_{mn}^* - A_{nm} = 0 \\ \therefore A_{mn} = A_{nm}^* \quad , \quad A_{nm} = A_{mn}^* \quad \text{_____ (3)} \end{aligned}$$

وإذا كانت  $m = n$

$$\begin{aligned} \therefore A_{nn} = A_{nn}^* \\ \therefore A_{nn} = \text{كمية حقيقية} \quad \text{_____ (4)} \end{aligned}$$

من (4) ، (3) ينتج أن المصفوفة  $[A]$  المصاحبة للمؤثر الهرميتي  $A$  هي مصفوفة هيرميتية .

مثال (٢) : باستخدام رموز ديراك ، أثبت أن :

$$Tr A = \sum_i \langle i | A | i \rangle$$

لا يعتمد على القاعدة  $|i\rangle$  للفراغ المستخدم ( فراغ الكيت والبرا ) .

$$Tr AB = Tr BA \quad \text{أثبت أيضاً أن :}$$

الحل :

نعتبر قاعدة أخرى للفراغ  $|j\rangle$  ، فيكون أثر المصفوفة  $A$  في هذه القاعدة

هو :

$$Tr A = \sum_j \langle j | A | j \rangle$$

وباستخدام مؤثر الإسقاط بالصورة  $|i\rangle\langle i|$  ، فإن :

$$\begin{aligned} \sum_j \langle j | A | j \rangle &= \sum_{i,j} \langle j | i \rangle \langle i | A | i \rangle \langle i | j \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle i | A | i \rangle \langle j | i \rangle \langle i | j \rangle \end{aligned}$$

وحيث أن :

$$\sum_{i,j} \langle j | i \rangle \langle i | j \rangle = \sum_j \langle j | j \rangle = 1$$

$$\therefore \sum_j \langle j | A | j \rangle = \sum_i \langle i | A | i \rangle$$

وهذا يعني أن أثر  $(Tr A)$  لا يعتمد على القاعدة ( أو أساس الفراغ ) .

ثانياً :

$$\begin{aligned} Tr AB &= \sum_i \langle i | AB | i \rangle = \sum_i \langle i | A | i \rangle \langle i | B | i \rangle \\ &= \sum_i \langle i | B | i \rangle \langle i | A | i \rangle = \sum_i \langle i | BA | i \rangle \\ &= Tr BA \end{aligned}$$

وهو المطلوب ثانياً .

مثال (3) :

(أ) أثبت أن

$$\sum_{i,j} |\langle i | A | j \rangle|^2 = \text{Tr} A A^+$$

ولا يعتمد على الأساسي (أو القاعدة)  $\langle j |$  و  $| i \rangle$ .

(ب) أثبت أن  $\text{Tr} (A^+ A)$  هو كمية محددة موجبة (Positive definite)

وأن  $\text{Tr} (A^+ A) = 0$  فقط إذا كان  $A = 0$ .

الحل :

(أ)

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} |\langle i | A | j \rangle|^2 &= \sum_i \sum_j \langle i | A | j \rangle \langle i | A | j \rangle^* \\ &= \sum_i \sum_j \langle i | A | j \rangle \langle j | A^+ | i \rangle \end{aligned}$$

$$\langle i | A | j \rangle^* = \langle j | A^+ | i \rangle \quad \text{حيث}$$

$$\therefore \sum_{i,j} |\langle i | A | j \rangle|^2 = \sum_i \langle i | A A^+ | i \rangle = \text{Tr} A A^+$$

وهو لا يعتمد على القاعدة (أو الأساسي)  $\langle j |$  و  $| i \rangle$ .

(ب)

$$\text{Tr} (A^+ A) = \sum_i \langle i | A^+ A | i \rangle$$

$$= \sum_{i,j} \langle i | A^+ | j \rangle \langle j | A | i \rangle = \sum_{i,j} |\langle i | A | j \rangle|^2 \geq 0$$

أي أن  $\text{Tr} (A^+ A)$  هو محدد موجب.

وهو المتطابقة تكون صحيحة في حالة العناصر المصفوفية  $\langle i | A | j \rangle = 0$

وهذا يكافئ العلاقة المؤثرية (Operator relation) :  $A = 0$ .

مثال (٤) :

(أ) إذا كان  $|\phi\rangle$  ،  $|\psi\rangle$  هما متجهتا كيت إختياريان ، فأثبت أن :

$$Tr(|\psi\rangle\langle\phi|) = \langle\phi|\psi\rangle$$

(ب) إذا كان  $A$  مؤثر واحد ، وكانت معادلة القيمة الذاتية له :

$$A|\psi_i\rangle = \lambda_i|\psi_i\rangle \text{ ، فأثبت أن } \lambda_i = e^{ic} \text{ حيث } c \text{ ثابت حقيقي .}$$

الحل :

(أ) بكتابة  $|\psi\rangle\langle\phi|$  في صورة المؤثر  $A$  .

$$\begin{aligned} \therefore Tr A &= \sum_i \langle i|A|i\rangle = \sum_i \langle i|\psi\rangle\langle\phi|i\rangle \\ &= \sum_i \langle\phi|i\rangle\langle i|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \end{aligned}$$

وهو المطلوب .

(ب) حيث  $A|\psi_i\rangle = \lambda_i|\psi_i\rangle$

$$\therefore \langle\psi_i|A^\dagger = \lambda_i^* \langle\psi_i|$$

$$\therefore \langle\psi_i|A^\dagger A|\psi_i\rangle = \lambda_i^* \lambda_i \langle\psi_i|\psi_i\rangle$$

وحيث أن  $A$  هو مؤثر واحد ، فإن  $A^\dagger A = 1$

$$\therefore \langle\psi_i|\psi_i\rangle = |\lambda_i|^2 \langle\psi_i|\psi_i\rangle$$

$$\therefore (1 - |\lambda_i|^2) \langle\psi_i|\psi_i\rangle = 0$$

الكمية  $\langle\psi_i|\psi_i\rangle$  هي المعيار (norm) حيث  $\langle\psi_i|\psi_i\rangle \neq 0$

إلا في حالة  $|\psi_i\rangle$  يساوي صفراً .

$$\therefore 1 - |\lambda_i|^2 = 0 \quad \therefore |\lambda_i|^2 = 1 \quad \therefore \lambda_i = e^{ic}$$

حيث  $c$  عدد حقيقي ، وهو المطلوب .

مثال (5) : قاعدة التبادل الأساسية (Commutation rule) في ميكانيكا الكم :

تنص قاعدة التبادل الأساسية في ميكانيكا الكم والتي تربط بين مؤثر الإحداثيات (x) ومؤثر كمية الحركة (p) على الآتي :

$$px - xp = \frac{\hbar}{i}$$

وفي ميكانيكا المصفوفات : يمكن كتابة هذه القاعدة في صورة مصفوفات كالاتي :

$$[px - xp] = (px - xp)_{nm} = \frac{\hbar}{i} [I]$$

حيث [I] هو مصفوفة الوحدة

$$[I] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

الإثبات :

من تعريف العناصر المصفوفية ، وباعتبار أن  $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  فإن :

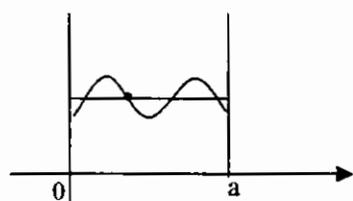
$$\begin{aligned} (px - xp)_{nm} &= \frac{\hbar}{i} \int \psi_n^* \left( \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_m dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \left[ \psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} (x \psi_m) dx - \psi_n^* x \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \left[ \psi_n^* x \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx + \psi_n^* \psi_m dx - \psi_n^* x \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \psi_n^* \psi_m dx = \frac{\hbar}{i} \delta_{nm} \end{aligned}$$

$$\therefore [p_x - x p] = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{i} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\hbar}{i} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\hbar}{i} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{i} [I]$$

وهو المطلوب .

مثال (٦) : حل مسألة الجسيم في صندوق باستخدام ميكانيكا المصفوفات .

في حالة جسيم يتحرك في صندوق أبعاده  $0 \leq x \leq a$  فإن الدوال الذاتية لهذا الجسيم يمكن كتابتها بالصورة :



$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

المطلوب إيجاد المصفوفات المصاحبة للمؤثرات  $p_x$ ,  $p_x^2$ ,  $x$  أي حساب العناصر المصفوفية لهذه المؤثرات .

**الحل :**

أولاً : المصفوفة المصاحبة لـ  $x$  [ التمثيل المصفوفي لـ  $x$  ] :

$$(x)_{nm} = \int_0^a \psi_n^* x \psi_m dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi x}{a} dx$$

ولإيجاد هذا التكامل : نستخدم القانون :

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2} [\cos(A - B) - \cos(A + B)]$$

$$\begin{aligned} \therefore (x)_{nm} &= \frac{1}{a} \int_0^a x \left[ \cos \frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{a} \right] dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a x \cos \frac{(n-m)\pi x}{a} dx - \frac{1}{a} \int_0^a x \cos \frac{(n+m)\pi x}{a} dx \end{aligned}$$

ويمكن إيجاد هذين التكاملين بالتجزئ :

$$I = \int_0^a x \cos \frac{d\pi x}{a} dx = \frac{a}{\pi d} \int_0^a x d \left( \sin \frac{d\pi x}{a} \right) \quad | \quad d = n \pm m$$

$$= \frac{a}{\pi d} \left[ x \cdot \sin \frac{d\pi x}{a} \Big|_0^a - \int_0^a \sin \frac{d\pi x}{a} dx \right]$$

$$= \frac{a}{\pi d} \left[ \frac{a}{\pi d} \cos \frac{d\pi x}{a} \Big|_0^a \right] = \frac{a^2}{\pi^2 d^2} [\cos d\pi - \cos 0]$$

$$= \frac{a^2}{\pi^2 d^2} [(-1)^d - 1] = \begin{cases} \frac{-2a^2}{\pi^2 d^2} & (d \text{ فردي}) \\ 0 & (d \text{ زوجي}) \end{cases}$$

$\therefore (x)_{nm} = 0 \longrightarrow$  زوجي  $d = n \pm m$  حيث

(أي إذا كانت  $n, m$  كلاهما زوجي أو كلاهما فردي)

$$(x)_{nm} = \frac{-2a}{\pi^2} \left\{ \frac{1}{(n-m)^2} - \frac{1}{(n+m)^2} \right\} \rightarrow \text{فردي } d = n \pm m \text{ حيث}$$

$$= \frac{-2a}{\pi^2} \left\{ \frac{(n+m)^2 - (n-m)^2}{[(n-m)(n+m)]^2} \right\}$$

$$= \frac{-2a}{\pi^2} \left\{ \frac{n^2 + 2nm + m^2 - (n^2 - 2nm + m^2)}{(n^2 - m^2)^2} \right\}$$

$$= \frac{-2a}{\pi^2} \left\{ \frac{4nm}{(n^2 - m^2)^2} \right\} = - \frac{8anm}{\pi^2 (n^2 - m^2)^2}$$

ثانياً : المصفوفة المصاحبة لـ  $p_x$  :

$$\begin{aligned}(p_x)_{nm} &= \int_0^a \psi_n^* p_x \psi_m dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi n x}{a} \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \sin \frac{\pi m x}{a} dx \\ &= \frac{2\hbar}{ai} \cdot \frac{\pi m}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi n x}{a} \cos \frac{\pi m x}{a} dx\end{aligned}$$

ولإيجاد هذا التكامل نستخدم القانون :

$$\sin A \cos B = \frac{1}{2} [\sin(A+B) + \sin(A-B)]$$

$$\begin{aligned}\therefore (p_x)_{nm} &= \frac{\pi m \hbar}{ia^2} \int_0^a \left[ \sin \frac{(n+m)\pi x}{a} + \sin \frac{(n-m)\pi x}{a} \right] dx \\ &= \frac{\pi m \hbar}{ia^2} \left[ -\frac{\cos \frac{(n+m)\pi x}{a}}{\frac{(n+m)\pi}{a}} - \frac{\cos \frac{(n-m)\pi x}{a}}{\frac{(n-m)\pi}{a}} \right]_0^a \\ &= -\frac{m \hbar}{ia} \left[ -\frac{\cos \frac{(n+m)\pi x}{a}}{(n+m)} + \frac{\cos \frac{(n-m)\pi x}{a}}{(n-m)} \right]_0^a \\ &= -\frac{m \hbar}{ia} \left[ \frac{(-1)^{n+m} - 1}{(n+m)} + \frac{(-1)^{n-m} - 1}{(n-m)} \right]\end{aligned}$$

$$\therefore (p_x)_{nm} = 0 \longrightarrow (n \pm m) \text{ زوجي}$$

وفي حالة  $(n \pm m)$  فردي فإن

$$\begin{aligned}(p_x)_{nm} &= -\frac{m \hbar}{ia} \left[ \frac{-2}{(n+m)} + \frac{-2}{(n-m)} \right] \\ &= \frac{2m \hbar}{ia} \left[ \frac{1}{n+m} + \frac{1}{n-m} \right] = \frac{2m \hbar}{ia} \left[ \frac{(n-m) + (n+m)}{n^2 - m^2} \right]\end{aligned}$$

$$= \frac{2m\hbar}{ia} \left[ \frac{2n}{n^2 - m^2} \right] = \frac{4\hbar nm}{ia(n^2 - m^2)}, \quad n \neq m$$

وفي حالة  $n = m$ :

$$\begin{aligned} (p_x)_{nm} &= \frac{4\pi\hbar m}{ia^2} \int_0^a \sin \frac{\pi mx}{a} \cos \frac{\pi mx}{a} dx \\ &= \frac{2\pi\hbar m}{ia^2} \int_0^a \sin \frac{2\pi mx}{a} dx = 0 \quad \left| \begin{array}{l} 2\sin x \cos x = \sin 2x \end{array} \right. \end{aligned}$$

ثالثاً : المصفوفة المصاحبة لـ  $p_x^2$  :

$$\begin{aligned} (p_x^2)_{nm} &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi nx}{a} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \sin \frac{\pi mx}{a} dx \\ &= \frac{-2\hbar^2}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi nx}{a} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \sin \frac{\pi mx}{a} \right) dx \\ &= \frac{2\hbar^2}{a} \cdot \frac{\pi^2 m^2}{a^2} \int_0^a \sin \frac{\pi nx}{a} \sin \frac{\pi mx}{a} dx \quad \text{--- (1)} \end{aligned}$$

ولإيجاد هذا التكامل نستخدم القانون :

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2} [\cos(A - B) - \cos(A + B)]$$

$$\therefore (p_x^2)_{nm} = \frac{\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^3} \int_0^a \left[ \cos \frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{a} \right] dx$$

عندما  $n \neq m$  : فإن هذا التكامل يتلاشى :

$$\therefore (p_x^2)_{nm} = 0$$

عندما  $n = m$  : فإن هذا التكامل يساوي ( باستخدام (1) ) :

$$\begin{aligned} (P_x^2)_{mm} &= \frac{2\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^3} \int_0^a \sin^2 \frac{\pi mx}{a} dx \\ &= \frac{2\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^3} \cdot \left[ \frac{a}{2} \right] = \frac{\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^2} \end{aligned}$$

وبذلك يمكن كتابة المصفوفة المناظرة بالصورة ( حيث  $m = 1, 2, \dots$  ) :

$$[P_x^2] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 4 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 9 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

ومن ذلك يتضح أن المصفوفة  $[P_x^2]$  هي مصفوفة قطرية ، عناصر قطرها هي مربعات الأعداد الطبيعية .

الخلاصة :

$$(x)_{nm} = -\frac{8a}{\pi^2} \left[ \frac{nm}{(n^2 - m^2)^2} \right]$$

$$(P_x)_{nm} = \frac{4\left(\frac{\hbar}{i}\right)}{a} \left[ \frac{nm}{(n^2 - m^2)} \right]$$

$$(P_x^2)_{nm} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} m^2$$

مثال (٧) : حل مسألة المتذبذب التوافقي البسيط باستخدام ميكانيكا المصفوفات .  
 لإثبات أن القيم الممكنة للطاقة ( القيم الذاتية ) للمتذبذب التوافقي البسيط هي

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

وذلك باستخدام ميكانيكا المصفوفات نتبع الآتي :

الطاقة الكلية للمتذبذب التوافقي البسيط هي :

$$E = \frac{P^2}{2m_0} + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 x^2$$

حيث  $m_0$  كتلة المتذبذب .

وفي صورة مصفوفات فإن :

$$[E] = \frac{1}{2m_0} [p^2] + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 [x^2] \quad (1)$$

حيث  $[x^2], [p^2]$  المصفوفتان المناظرتان للمؤثرين  $x^2, p^2$  ، حيث ترتبط  $p, x$  بقاعدة التبادل في صورتها المصفوفية :

$$[px - xp] = \frac{\hbar}{i} I \quad (2)$$

ويكون المطلوب هو حساب العناصر المصفوفية ، أو إيجاد التمثيل المصفوفي

لكل من  $x^2, p^2$  أي  $[x^2], [p^2]$  .

(١) إيجاد  $[x^2]$

نوجد أولاً التمثيل المصفوفي للمؤثر  $x$  :

$$x_{mn} = \int \psi_m^* x \psi_n dx$$

حيث  $\psi_n$  هي الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط وتعطي بالعلاقة :

$$\psi_n = N_n e^{-\frac{1}{2}z^2} H_n(z)$$

حيث :

$$N_n = \left[ \frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right]^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}$$

$$x_0 = \frac{1}{\alpha}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad z = \alpha x$$

هيرميت  $H_n(z) = H_n(\alpha x) = H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$  هي كثيرة حدود هيرميت التي تحقق معادلة هيرميت :  $H_n'' - 2zH_n' + 2nH_n = 0$  ، وتحقق العلاقة التكرارية

$$zH_n = nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1}$$

$$x\psi_n = N_n x H_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} = N_n x_0 \underbrace{zH_n}_{\left| x = \frac{z}{\alpha} = z x_0 \right.}} e^{-\frac{1}{2}z^2}$$

$$= N_n x_0 \left[ nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1} \right] e^{-\frac{1}{2}z^2}$$

$$= x_0 \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}} \left[ nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1} \right] e^{-\frac{1}{2}z^2}$$

$$= x_0 \left[ nH_{n-1} e^{-\frac{1}{2}z^2} \frac{\frac{1}{\sqrt{2n}}}{\sqrt{2^{n-1} (n-1)! x_0 \sqrt{\pi}}} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}H_{n+1} e^{-\frac{1}{2}z^2} \cdot \frac{\sqrt{2(n+1)}}{\sqrt{2^{n-1} (n+1)! x_0 \sqrt{\pi}}} \right]$$

$$= x_0 \left[ \psi_{n-1} \sqrt{\frac{n}{2}} + \psi_{n+1} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \right] \quad \text{_____ (1)}$$

ويصبح العنصر المصفوفي  $X_{mn}$  :

$$\begin{aligned} X_{mn} &= \int \psi_m^* X \psi_n dx \\ &= X_0 \left[ \sqrt{\frac{n}{2}} \int \psi_m^* \psi_{n-1} dx + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \int \psi_m^* \psi_{n+1} dx \right] \\ &= X_0 \left[ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right] \quad \text{_____ (2)} \end{aligned}$$

$$X_{n-1,n} = X_0 \sqrt{\frac{n}{2}} \quad \text{عندما } m = n-1$$

$$X_{n+1,n} = X_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad \text{عندما } m = n+1$$

وللقيم الأخرى فإن :  $X_{mn} = 0$  ، ونلاحظ أن :

$$X_{mn} = [X] = \begin{pmatrix} X_{00} & X_{01} & X_{02} & \dots \\ X_{10} & X_{11} & X_{12} & \dots \\ X_{20} & X_{21} & X_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & X_{01} & 0 & \dots \\ X_{10} & 0 & X_{12} & \dots \\ 0 & X_{21} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$= X_0 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \dots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & \dots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

المصفوفات المناظرة لـ  $X^2$  :

$$(X^2)_{mn} = (X^2)_{nm} = \sum_k X_{nk} X_{km}$$

عندما  $n = m$

$$\therefore (X^2)_{nm} = X_{n,n-1} \cdot X_{n-1,n} + X_{n,n+1} \cdot X_{n+1,n}$$

عندما  $n = m + 2$

$$(X^2)_{nm} = \sum_k X_{nk} X_{k,n-2} = X_{n,n-1} \cdot X_{n-1,n-2}$$

عندما  $n = m - 2$

$$(X^2)_{nm} = \sum_k X_{nk} X_{k,n+2} = X_{n,n+1} \cdot X_{n+1,n+2}$$

$$\therefore X_{nm}^2 = [X^2] = \begin{pmatrix} X_{01}X_{10} & 0 & X_{01}X_{12} & \dots \\ 0 & X_{10}X_{01} + X_{12}X_{21} & 0 & \dots \\ X_{21}X_{10} & 0 & X_{21}X_{12} + X_{23}X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

(٢) إيجاد  $[p]^2$

نوجد أولاً  $[p]$  ، فمن معادلة حركة المتذبذب التوافقي البسيط

$$\ddot{x} = -\omega^2 x \quad \text{وحلها العام } x = x_0 e^{i\omega t}$$

ويمكن كتابتها في صورة مصفوفات :

$$x_{mn} = x_0 e^{i\omega_{mn}t}$$

$$\therefore \dot{x}_{mn} = i\omega_{mn} x_{mn} \quad \text{_____ (1)}$$

$$\therefore p_{mn} = m_0 \dot{x}_{mn} = im_0 \omega_{mn} x_{mn} \quad \text{_____ (2)}$$

حيث  $m_0$  كتلة المتذبذب ، وحيث :

$$x_{mn} = x_0 \left[ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$$

عندما  $m = n - 1$

$$W_{n-1,n} = -W \quad , \quad X_{n-1,n} = X_0 \sqrt{\frac{n}{2}}$$

بكتابة :

فمن (1) :

$$\dot{X}_{n-1,n} = iW_{n-1,n} X_{n-1,n} = -iW X_0 \sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$\therefore P_{n-1,n} = m_0 \dot{X}_{n-1,n} = -iW m_0 X_0 \sqrt{\frac{n}{2}}$$

عندما  $m = n + 1$

بكتابة :

$$W_{n+1,n} = W \quad , \quad X_{n+1,n} = X_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$\therefore \dot{X}_{n+1,n} = iW_{n+1,n} X_{n+1,n} = iW X_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$\therefore P_{n+1,n} = m_0 \dot{X}_{n+1,n} = iW m_0 X_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

وللقيم الأخرى فإن :  $P_{mn} = 0$

$$P_{mn} = [p] = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} & \dots \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} & \dots \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & p_{01} & 0 & \dots \\ p_{10} & 0 & p_{12} & \dots \\ 0 & p_{21} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$= W m_0 X_0 \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \dots \\ i\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & -i\sqrt{\frac{2}{2}} & \dots \\ 0 & i\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

: المصفوفة  $[p^2]$

$$(p^2)_{mn} = (p^2)_{nm} = \sum_k P_{nk} P_{km}$$

$$\therefore (p^2)_{n,n-1} = -m_0^2 \omega^2 (x^2)_{n,n-1}$$

$$P_{n,n-1} = -i m_0 \omega X_{n,n-1}$$

$$(p^2)_{n,n+1} = -m_0^2 \omega^2 (x^2)_{n,n+1}$$

$$P_{n,n+1} = i m_0 \omega X_{n,n+1}$$

$$\therefore [p^2] = m_0^2 \omega^2 \begin{pmatrix} X_{01} X_{10} & 0 & -X_{01} X_{12} & \dots \\ 0 & X_{10} X_{01} + X_{12} X_{21} & 0 & \dots \\ -X_{21} X_{10} & 0 & X_{21} X_{12} + X_{23} X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

والآن : العناصر المصفوفية لطاقة المتذبذب الكلية :

$$[E] = E_{nm} = \frac{1}{2m_0} [p^2] + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 [x^2]$$

$$= \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \begin{pmatrix} X_{01} X_{10} & 0 & -X_{01} X_{12} & \dots \\ 0 & X_{10} X_{01} + X_{12} X_{21} & 0 & \dots \\ -X_{21} X_{10} & 0 & X_{21} X_{12} + X_{23} X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} +$$

$$+ \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \begin{pmatrix} X_{01} X_{10} & 0 & X_{01} X_{12} & \dots \\ 0 & X_{10} X_{01} + X_{12} X_{21} & 0 & \dots \\ X_{21} X_{10} & 0 & X_{21} X_{12} + X_{23} X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 &= m_0 w^2 \begin{pmatrix} X_{01} X_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & X_{10} X_{01} + X_{12} X_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & X_{21} X_{12} + X_{23} X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \\
 &= m_0 w^2 \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{2}} \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} \sqrt{\frac{2}{2}} + \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{3}{2}} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \\
 &= m_0 w^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad \text{--- (I)}
 \end{aligned}$$

$[px - xp] = \frac{\hbar}{i} [I]$  وبتطبيق قاعدة التبادل في صورتها المصفوفية

حيث I مصفوفة الوحدة .

$$\therefore (px)_{mn} - (xp)_{mn} = \frac{\hbar}{i} [I]$$

$$\begin{aligned}
 \therefore i m_0 w \begin{pmatrix} -X_{01} X_{10} & 0 & -X_{01} X_{12} & \dots \\ 0 & X_{10} X_{01} - X_{12} X_{21} & 0 & \dots \\ X_{21} X_{10} & 0 & X_{12} X_{21} - X_{23} X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} - \\
 - i m_0 w \begin{pmatrix} X_{01} X_{10} & 0 & -X_{01} X_{12} & \dots \\ 0 & -(X_{10} X_{01} - X_{12} X_{21}) & 0 & \dots \\ X_{21} X_{10} & 0 & -(X_{12} X_{21} + X_{23} X_{32}) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} [I]
 \end{aligned}$$

$$\therefore 2im_0 w \begin{pmatrix} -X_{01} X_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & X_{10} X_{01} - X_{12} X_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & X_{12} X_{21} - X_{23} X_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} [I]$$

$$\therefore 2im_0 w \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} [I]$$

$$\therefore 2im_0 w \left(-\frac{1}{2}\right) [I] = \frac{\hbar}{i} [I]$$

$$\therefore -im_0 w = \frac{\hbar}{i} \quad \therefore \boxed{m_0 w = \hbar} \quad \therefore m_0 w^2 = \hbar w \quad \text{(II)}$$

: (I), (II) من

$$\therefore [E] = \hbar w \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

وتكون العناصر القطرية لمصفوفة طاقة المتذبذب هي :

$$\frac{1}{2} \hbar w \quad , \quad \frac{3}{2} \hbar w \quad , \quad \frac{5}{2} \hbar w \quad , \quad \dots$$

$$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar w$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{حيث}$$

وهو المطلوب .

مثال (٨) : للمتذبذب التوافقي البسيط حيث الهاملتونيان :

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 x^2$$

$$xH - Hx = \frac{i\hbar}{m_0} p \quad \text{وحيث :}$$

أثبت أن

$$\langle k | x | \ell \rangle = \frac{i\hbar}{m_0 (E_\ell - E_k)} \langle k | p | \ell \rangle \quad (1)$$

وأن

$$\langle \ell | xp + px | \ell \rangle = 0 \quad (2)$$

الحل :

$$xH - Hx = \frac{i\hbar}{m_0} p \quad \text{لإثبات (i) : من العلاقة :}$$

بأخذ العنصر المصفوفي لكلاً الطرفين بين الحالتين  $k, \ell$  للمتذبذب

$$\therefore \langle k | xH - Hx | \ell \rangle = \frac{i\hbar}{m_0} \langle k | p | \ell \rangle$$

$$\therefore \langle k | xH | \ell \rangle - \langle k | Hx | \ell \rangle = \frac{i\hbar}{m_0} \langle k | p | \ell \rangle$$

$$\therefore E_\ell \langle k | x | \ell \rangle - E_k \langle k | x | \ell \rangle = \frac{i\hbar}{m_0} \langle k | p | \ell \rangle$$

$$\therefore (E_\ell - E_k) \langle k | x | \ell \rangle = \frac{i\hbar}{m_0} \langle k | p | \ell \rangle$$

$$\therefore \langle k | x | \ell \rangle = \frac{i\hbar}{m_0 (E_\ell - E_k)} \langle k | p | \ell \rangle \quad (1)$$

$$\text{إثبات (ii) : من العلاقة } xH - Hx = \frac{i\hbar}{m_0} p$$

$$\therefore p = \frac{m_0}{i\hbar} (xH - Hx)$$

$$\begin{aligned} \therefore \langle k | xp + px | \ell \rangle &= \frac{m_0}{i\hbar} \langle k | x(xH - Hx) + (xH - Hx)x | \ell \rangle \\ &= \frac{m_0}{i\hbar} \langle k | x^2H - xHx + xHx - Hx^2 | \ell \rangle \\ &= \frac{m_0}{i\hbar} \langle k | x^2H - Hx^2 | \ell \rangle \\ &= \frac{m_0}{i\hbar} (E_\ell - E_k) \langle k | x^2 | \ell \rangle \end{aligned}$$

وبوضع  $k = \ell$

$$\therefore \langle \ell | xp + px | \ell \rangle = \frac{m_0}{i\hbar} (E_\ell - E_\ell) \langle \ell | x^2 | \ell \rangle = 0$$

وهو المطلوب .

مثال (٩) :

المصفوفات المصاحبة لمؤثرات كمية الحركة الزاوية  $(L^2, \hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_y)$

[١] المصفوفات المصاحبة للمؤثرين  $L^2, \hat{L}_z$  :

وجدنا فيما سبق (الجزء الأول) أن الدوال  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  هي دوال ذاتية

أنية لكل من المؤثرين  $L^2, \hat{L}_z$  ، فباستخدام الخاصية العيارية التعامدية للدوال

$Y_{\ell,m}$  ، يمكننا كتابة العناصر المصفوفية للمؤثرين  $L^2, \hat{L}_z$  بالصورة :

$$\begin{aligned}
 (L^2)_{\ell,m;\ell',m'} &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell,m}^* L^2 Y_{\ell',m'} \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= \hbar^2 \ell(\ell+1) \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell,m}^* Y_{\ell',m'} \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= \hbar^2 \ell(\ell+1) \cdot \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (L_z)_{\ell,m;\ell',m'} &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell,m}^* L_z Y_{\ell',m'} \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= m\hbar \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell,m}^* Y_{\ell',m'} \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= m\hbar \cdot \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}
 \end{aligned}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

ويلاحظ أن قيم  $m$  هي :

حالات خاصة : في التمثيل  $m$ - (  $m$ -representation ) ، حيث  $\ell = \ell'$

نأخذ الحالتين  $\ell = 1$  ،  $\ell = 2$

$\ell = 1$  :

$$L^2 = \hbar^2 \begin{array}{c|ccc} \boxed{m} & 1 & 0 & -1 \\ \hline \left[ \begin{array}{ccc} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{array} \right] & & & \\ \hline m' & & & \end{array} \begin{array}{l} m' \\ 1 \downarrow \\ 0 \\ -1 \end{array}$$

$$L_z = \hbar^2 \begin{array}{c|ccc} \boxed{m} & 1 & 0 & -1 \\ \hline \left[ \begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array} \right] & & & \\ \hline m' & & & \end{array} \begin{array}{l} m' \\ 1 \downarrow \\ 0 \\ -1 \end{array}$$

$\ell = 2$ :

$$L^2 = \hbar^2 \begin{array}{c|ccccc} m & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \hline & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{array} \begin{array}{l} m' \\ 2\downarrow \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array}$$

$$L_z = \hbar^2 \begin{array}{c|ccccc} m & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \hline & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{array} \begin{array}{l} m' \\ 2\downarrow \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array}$$

ومن هذا يتضح أن هذه المصفوفات هي مصفوفات قطرية ، وتكون عناصرها القطرية هي القيم الذاتية للمؤثرات التي تصفها تلك المصفوفات .

ففي حالة  $\ell = 2$  مثلاً : القيم الذاتية للمؤثر  $L^2$  هي :

$$6\hbar^2, 6\hbar^2, 6\hbar^2, 6\hbar^2, 6\hbar^2$$

القيم الذاتية للمؤثر  $L_z$  هي :

$$2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$$

[٢] المصفوفات المصاحبة للمؤثرين  $L_x, L_y$  :

لا يمكن إيجاد المصفوفات المصاحبة للمؤثرين  $L_x, L_y$  بطريقة مباشرة ولكننا نستخدم المؤثرات السلمية  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$  ونوجد المصفوفتان المصاحبتان للمؤثرين  $L_+, L_-$  كالآتي :

$$\begin{aligned} L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + L_z^2 - i(L_yL_x - L_xL_y) \\ &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + L_z^2 - i(-i\hbar L_z) = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \end{aligned}$$

وحيث أن [ الجزء الأول ] :

$$L^2 Y_{\ell,m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell,m}$$

$$L_z Y_{\ell,m} = m\hbar Y_{\ell,m}$$

$$\therefore L^2 Y_{\ell,m} = L_+ L_- Y_{\ell,m} + m^2 \hbar^2 Y_{\ell,m} - m\hbar^2 Y_{\ell,m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell,m}$$

$$\therefore L_+ L_- Y_{\ell,m} = \hbar^2 [ \ell(\ell + 1) - m(m - 1) ] Y_{\ell,m}$$

بالضرب في  $Y_{\ell,m}^*$  والتكامل نحصل على :

$$\underbrace{\int Y_{\ell,m'}^* L_+ L_- Y_{\ell,m} d\tau}_{\delta_{m'm}} = \hbar^2 [ \ell(\ell + 1) - m(m - 1) ] \underbrace{\int Y_{\ell,m'}^* Y_{\ell,m} d\tau}_{\delta_{m'm}}$$

$$\therefore (L_+ L_-)_{m'm} = \hbar^2 [ \ell(\ell + 1) - m(m - 1) ] \delta_{m'm}$$

حيث العنصر المصفوفي :

$$(L_+ L_-)_{m'm} = \int Y_{\ell,m'}^* L_+ L_- Y_{\ell,m} d\tau$$

$$\delta_{m'm} = \int Y_{\ell,m'}^* Y_{\ell,m} d\tau$$

وباستخدام قاعدة حاصل ضرب مصفوفتين :

$$\sum_k (L_+)_{m'k} \cdot (L_-)_{km} = (L_+ L_-)_{m'm}$$

$$\therefore \sum_k (L_+)_{m'k} \cdot (L_-)_{km} = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m-1)] \delta_{m'm}$$

والآن :

$$\begin{aligned} (L_-)_{km} &= (L_x - iL_y)_{km} = (L_x - iL_y)_{mk}^* \\ &= (L_x + iL_y)_{mk} = (L_+)_{mk} \end{aligned}$$

[ من الخاصية الهرميتية للعناصر المصفوفة  $A_{nm} = A_{mn}^*$  ]

$$\therefore \sum_k (L_+)_{m'k} \cdot (L_+)_{mk} = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m-1)] \delta_{m'm} \quad (1)$$

ومن خواص المؤثر السلمي ، وجدنا في الجزء الأول أن :

المؤثر  $\hat{L}_\pm$  ينشئ دالة جديدة من الدالة  $Y_{\ell,m}$  وذلك برفع أو خفض القيمة الذاتية  $m$  .

$$\therefore L_\pm Y_{\ell,m} = C_\pm Y_{\ell,m\pm 1}$$

حيث  $C_+ = C_m$  ،  $C_- = C'_m$

ولذلك يطلق على المؤثر  $\hat{L}_\pm$  أحياناً أسم مؤثر الرفع والخفض . ( raising and Lowering operator )

$$\therefore L_+ Y_{\ell,m} = C_m Y_{\ell,m+1}$$

$$L_- Y_{\ell,m} = C'_m Y_{\ell,m-1}$$

$$\therefore (L_+)_{m'k} = \int Y_{\ell m'}^* \underbrace{L_+ Y_{\ell k}}_{Y_{\ell,k+1}} d\tau = C_k \int Y_{\ell m'}^* \underbrace{Y_{\ell,k+1}}_{Y_{\ell,k+1}} d\tau = C_k \delta_{m',k+1}$$

وبالمثل فإن :

$$(L_+)_{mk} = \int Y_{\ell m}^* \underbrace{L_+ Y_{\ell k}} d\tau = C_k \int Y_{\ell m}^* \underbrace{Y_{\ell, k+1}} d\tau = C_k \delta_{m, k+1}$$

بالتعويض في (1) :

$$\begin{aligned} \sum_k C_k^2 \delta_{m', k+1} \delta_{m, k+1} &= \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m-1)] \delta_{m'm} \\ &= \hbar^2 [\ell^2 + \ell - m^2 + m] \delta_{m'm} \\ &= \hbar^2 [(\ell+m)(\ell-m+1)] \delta_{m'm} \quad (2) \end{aligned}$$

هذه المعادلة تساوي صفرًا بالتطابق فيما عدا  $m = k+1$  ،  $m = m'$  (أو  $k = m-1$ ) ، وفي هذه الحالة :

$$\begin{aligned} C_{m-1}^2 &= \hbar^2 [(\ell+m)(\ell-m+1)] \\ \therefore C_{m-1} &= \hbar \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} = \hbar \sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)} \end{aligned}$$

وبكتابة  $m-1 \rightarrow m$  فإن :

$$C_m = \hbar \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}$$

أي أن :

$$L_+ Y_{\ell, m} = C_m Y_{\ell, m+1} = \hbar \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)} Y_{\ell, m+1}$$

وبالمثل يمكن إثبات أن :

$$L_- Y_{\ell, m} = C'_m Y_{\ell, m-1} = \hbar \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} Y_{\ell, m-1}$$

وتكون المصفوفتان المصاحبتان للمؤثرين

$$L_- = L_x - iL_y \text{ و } L_+ = L_x + iL_y \text{ هما :}$$

$$\left| \int Y_{\ell, m'} L_+ Y_{\ell, m} d\tau = C_m \int Y_{\ell, m'} Y_{\ell, m+1} d\tau = C_m \delta_{m', m+1} \right.$$

$$(1) (L_x + iL_y)_{m'm} = C_m \delta_{m', m+1}$$

$$= \hbar \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} \delta_{m', m+1}$$

$$(2) (L_x - iL_y)_{m'm} = C'_m \delta_{m', m-1}$$

$$= \hbar \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} \delta_{m', m-1}$$

$$\left| m' = m \pm 1 \text{ عندما } \delta_{m', m \pm 1} = 1 \right.$$

$$\therefore (L_x \pm iL_y)_{m \pm 1, m} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)}$$

وفي التمثيل  $m - \ell$  حيث  $\ell = \ell'$  فإنه يمكن إيجاد المصفوفات المصاحبة

للمؤثرين  $L_+, L_-$  لقيم  $\ell$  المختلفة ، حيث  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$  .

عندما  $\ell = 1$  :

	$m$	1	0	-1	$m'$
$L_+ = \hbar$	0	$\sqrt{2}$	0		1 ↓
	0	0	$\sqrt{2}$		0
	0	0	0		-1
$L_- = \hbar$	0	0	0		
	$\sqrt{2}$	0	0		
	0	$\sqrt{2}$	0		

عندما  $l = 2$  :

$$L_+ = \hbar \begin{array}{c|ccccc} m & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \hline & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \begin{array}{l} m' \\ 2 \downarrow \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array}$$

$$L_- = \hbar \begin{array}{c|ccccc} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{array}$$

ملحوظة : يمكن إيجاد المصفوفات المناظرة لـ  $L_x, L_y$  من المصفوفات المناظرة لـ  $L_+, L_-$  وذلك كالآتي :

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) , \quad L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

فبالتعويض عن  $L_+, L_-$  نحصل على  $L_x, L_y$  :

$$\therefore L_x Y_{\ell, m} = \frac{\hbar}{2} \left[ \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} Y_{\ell, m+1} + \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} Y_{\ell, m-1} \right]$$

$$L_y Y_{\ell, m} = \frac{\hbar}{2i} \left[ \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} Y_{\ell, m+1} - \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} Y_{\ell, m-1} \right]$$

مثال تطبيقي :

أوجد المصفوفات  $L_x, L_y, L_z$  في الحالة الخاصة ، عندما

$$\ell = \frac{1}{2}, m = \pm \frac{1}{2}$$

وذلك بالصورة :

$$L_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, L_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, L_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

الحل :

حيث أن  $(L_z)_{mm} = m\hbar$  للعناصر غير الصفريية .

$$\therefore L_z = \hbar \begin{bmatrix} \boxed{m} + \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \boxed{m} & \\ & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} = \hbar/2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

أيضاً لإيجاد  $L_x, L_y$

$$(L_+)_{m+1,m} = (L_x + iL_y)_{m+1,m} = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} - m\right) \left(\frac{3}{2} + m\right)}$$

$$\therefore L_x + iL_y = \hbar \begin{bmatrix} \boxed{m} + \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \boxed{m+1} & \\ & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{--- (1)}$$

$$(L_-)_{m-1,m} = (L_x - iL_y)_{m-1,m} = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} + m\right) \left(\frac{3}{2} - m\right)}$$

$$\therefore L_x - iL_y = \hbar \begin{bmatrix} m + \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & m - 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

من (2) ، (1) بالجمع :

$$L_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

وبضرب (1) في  $(-i)$  ، (2) في  $(i)$  والجمع :

$$L_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\therefore L_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, L_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, L_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

هذه المصفوفات هامة جداً عند دراستنا لموضوع كمية الحركة الزاوية اللفية ( اللف ) ، وقد سبق استخدامها في الجزء الأول بدون برهان .