الباب الثاني

ميكانيكا المصفوفات

Matrix Mechanics

ميكانيكا المصفوفات

التمثيل المصفوفي لهيزنبرج
Heisenberg Matrix Representation

مقدمه :

في عام ١٩٢٥ م أدخل هيزنبرج طريقة جديدة لوصف حالة الأنظمة الكمية ، وذلك بإستخدام المصفوفات (Matrices) ، حيث وصف حالة أي نظام (تمثله الدالة ψ) بمصفوفة ذات عمود واحد $\begin{bmatrix} \\ \\ \end{bmatrix}$ ، كما وصف الدالة المركبة المرافقة ψ^* بمصفوفة ذات صف واحد $[\quad\quad]$ ، 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 Ψ ، 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 :

$$< f > = \bar{f} = \int \Psi^* f \psi \, d\tau$$

وبالتعويض عن :

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

$$\therefore < f > = \bar{f} = \int (\sum_n a_n^* \psi_n^*) \ f \ (\sum_m a_m \psi_m) \ d\tau$$

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

حيث

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

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

يمكن كتابة f_{nm} على شكل مصفوفة ربعة كالآتي :

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

المعنى الطبيعي للعناصر المصفوفية :

تعبر 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 :

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

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

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 :

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

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 .

<u>خواص العناصر المصفوفية للكميات الطبيعية</u> :

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

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

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

الإثبات :

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

$$= \int \psi_n^* f \psi_m \, d\tau + \int \psi_n^* g \psi_m \, d\tau = f_{nm} + g_{nm}$$

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

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

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

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

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

$$\therefore (fg)_{nm} = \sum_k a_k \int \psi_n^* f \psi_k \, d\tau$$

$$= \sum_k a_k f_{nk} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_} (1)$$

ولإيجاد a_k :

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

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

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

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

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 $\hat{A}$:

$$\hat{A}\Psi = \lambda \Psi \qquad \_\_\_\_(1)$$

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

$$\Psi = \sum_n a_n \psi_n \qquad \_\_\_\_(2)$$

بالتعويض في (1) :

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

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

وبالضرب في ψ_m^* والتكامل على كل الفراغ نحصل على :

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

$$\therefore \quad \sum_n a_n \left[A_{mn} - \lambda \delta_{mn} \right] = 0 \qquad \_\_\_\_(3)$$

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

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 :

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

أي إذا كان :

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

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 λ) هي القيم الممكنة للكمية λ ، أي القيم الذاتية لهذه الكمية ، وعددها n قيمة .

ومجموعة قيم a_n التي تحقق المعادلة (3) عندما تساوى λ إحدى هذه القيم الذاتية ، تعين الدوال الذاتية المناظرة .

ملاحظات :

(١) من تعريف العناصر المصفوفية للكمية f :

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

وإذا كانت ψ_n هي الدوال الذاتية للكمية f ومن معادلة القيمة الذاتية :

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

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

حيث

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

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

أيضاً : فإن :

$$\boxed{f_{mm} = \lambda_m}$$

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

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

وبصفة عامة : في ميكانيكا الكم فإن مصفوفة أي كمية طبيعية f (مثل الطاقـة 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 الذاتيـة لــ $\hat{A}$ هي عناصر هذا القطر .

الإثبات :

في حالة المصفوفة القطرية فإن :

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

المعادلة العالمية (أو معادلة القيمة الذاتية) هي :

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

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

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

أي أن القيم الذاتية لــ 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) $Tr\,A = \sum_{i} <i|A|i>$

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

(iii) $Tr(AA^{+}) = \sum_{i}\sum_{j} |<i|A|j>|^{2}$

أمثلة محلولة :

مثال (١) : أثبت أن المؤثر الهيرميتي يصاحبه مصفوفة هيرميتية .

أو بمعنى آخر : التمثيل المصفوفي لمؤثر هيرميتي يكون هيرميتياً .

الحل :

للمؤثر الهيرميتي 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 ψ هي دالة إختيارية ، فيمكننا كتابة : $\psi = \psi_1 + \psi_2$

حيث ψ_1 , ψ_2 دالتان إختياريتان .

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

$$\int \psi A^{*} \psi^{*}\, d\tau = \int (\psi_1 + \psi_2) A^{*} (\psi_1^{*} + \psi_2^{*})\, d\tau \qquad \text{\_\_\_\_}(2)$$

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

$$\therefore \int \left(\psi_1^* + \psi_2^*\right) A \left(\psi_1 + \psi_2\right) d\tau = \int \left(\psi_1 + \psi_2\right) A^* \left(\psi_1^* + \psi_2^*\right) d\tau$$

$$\therefore \int \psi_1^* A \,\psi_1 \,d\tau + \int \psi_1^* A \,\psi_2 \,d\tau + \int \psi_2^* A \,\psi_1 \,d\tau + \int \psi_2^* A \,\psi_2 \,d\tau$$

$$= \int \psi_1 A^* \psi_1^* d\tau + \int \psi_1 A^* \psi_2^* d\tau + \int \psi_2 A^* \psi_1^* d\tau + \int \psi_2 A^* \psi_2^* d\tau$$

$$\therefore \int \left(\psi_1^* A \,\psi_2 - \psi_1 A^* \psi_2^*\right) d\tau = \int \left(\psi_2 A^* \psi_1^* - \psi_2^* A \,\psi_1\right) d\tau$$

وبكتابة $\psi_1 = e^{ia} \psi_m \,,\, \psi_2 = e^{ib} \psi_n$ حيث $a \,,\, b$ ثابتان إختياريان

$$\therefore \quad \left[e^{i(b-a)} \int \psi_m^* A \psi_n - e^{i(a-b)} \int \psi_m A^* \psi_n^* \right] \, d\tau$$

$$= \left[e^{i(b-a)} \int \psi_n A^* \psi_m^* - e^{i(a-b)} \int \psi_n^* A \psi_m \right] d\tau$$

$$\therefore \quad e^{i(b-a)} \left[\int \psi_m^* A \psi_n - \int \psi_n A^* \psi_m^* \right] dt$$

$$= e^{i(a-b)} \left[\int \psi_m A^* \psi_n^* - \int \psi_n^* A \psi_m \right] d\tau$$

$$\therefore \quad e^{i(b-a)} \left[A_{mn} - A_{nm}^*\right] = e^{i(a-b)} \left[A_{mn}^* - A_{nm}\right]$$

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

$$A_{mn} - A_{nm}^* = 0 \qquad , \qquad A_{mn}^* - A_{nm} = 0$$

$$\therefore \quad A_{mn} = A_{nm}^* \qquad , \qquad A_{nm} = A_{mn}^* \qquad \_\_\_\_\_\_ (3)$$

وإذا كانت $m = n$:

$$\therefore \quad A_{nn} = A_{nn}^*$$

$\therefore \quad A_{nn} =$ كمية حقيقية $\qquad \_\_\_\_\_\_ (4)$

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

<u>**مثال (٢)**</u> : بإستخدام رموز ديراك ، أثبت أن :

$$Tr\, A = \sum_i < i |\, A \,| i >$$

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

أثبت أيضاً أن : $Tr\,AB = Tr\,BA$

<u>**الحل :**</u>

نعتبر قاعدة أخرى للفراغ $\langle j \,|$ ، فيكون أثر المصفوفة A في هذه القاعدة هو :

$$Tr\, A = \sum_j < j |\, A \,| j >$$

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

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

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

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) .

<u>**ثانياً :**</u>

$$Tr\,AB = \sum_i \langle i |AB| i \rangle = \sum_i \langle i |A| i \rangle \langle i |B| i \rangle$$

$$= \sum_i \langle i |B| i \rangle \langle i |A| i \rangle = \sum_i \langle i |BA| i \rangle$$

$$= Tr\,BA$$

وهو المطلوب ثانياً .

مثال (٣) :

(أ) أثبت أن

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

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

(ب) أثبت أن $Tr\left(A^+A\right)$ هو كمية محددة موجبة (Positive definite)

وأن $Tr\left(A^+A\right)=0$ فقط إذا كان $A=0$.

الحل :

(أ)

$$\sum_{i,j}\left|\langle i|A|j\rangle\right|^2 = \sum_i\sum_j\langle i|A|j\rangle\langle i|A|j\rangle^*$$

$$= \sum_i\sum_j\langle i|A|j\rangle\langle j|A^+|i\rangle$$

حيث $\langle i|A|j\rangle^* = \langle j|A^+|i\rangle$

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

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

(ب)

$$Tr\left(A^+A\right) = \sum_i\langle i|A^+A|i\rangle$$

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

أي أن $Tr\left(A^+A\right)$ 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 متجها كيت إختياريان ، فأثبت أن :

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

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

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

الحل :

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

$$\therefore\ Tr\ A=\sum_i\langle i|A|i\rangle=\sum_i\langle i|\psi\rangle\langle\phi|i\rangle$$

$$=\sum_i\langle\phi|i\rangle\langle i|\psi\rangle=\langle\phi|\psi\rangle$$

وهو المطلوب .

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

$$\therefore\quad \langle\psi_i|A^+=\lambda_i^*\langle\psi_i|$$

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

وحيث أن A هو مؤثر واحدي ، فإن $A^+A=1$

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

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

الكمية $\langle\psi_i|\psi_i\rangle$ هي المعيار **(norm)** حيث $\langle\psi_i|\psi_i\rangle\neq0$ 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 .

<u>مثال (٥)</u> : 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 :

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

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

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

حيث $[\mathrm{I}]$ هو مصفوفة الوحدة

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

<u>الإثبات</u> :

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

$$(px - xp)_{nm} = \frac{\hbar}{i}\int \psi_n^* \left(\frac{\partial}{\partial x} x - x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_m \, dx$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int \left[\psi_n^* \frac{\partial}{\partial x}(x\psi_m)dx - \psi_n^* x \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int \left[\psi_n^* x \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx + \psi_n^* \psi_m \, dx - \psi_n^* x \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx\right]$$

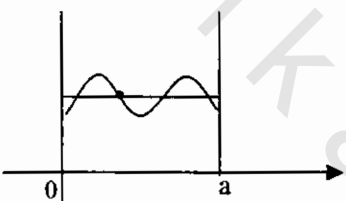
$$= \frac{\hbar}{i}\int \psi_n^* \psi_m \, dx = \frac{\hbar}{i}\delta_{nm}$$

$$\therefore\ [px-xp]=\begin{bmatrix}\frac{\hbar}{i} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{\hbar}{i} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{\hbar}{i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{bmatrix}=\frac{\hbar}{i}[\mathrm{I}]$$

وهو المطلوب .

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

في حالة جسيم يتحرك في صندوق أبعاده $0\le x\le a$ 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 $x\,,\,p_x\,,\,p_x^2$ 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 :

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

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

$$=\frac{1}{a}\int_0^a x\cos\frac{(n-m)\pi x}{a}dx-\frac{1}{a}\int_0^a x\cos\frac{(n+m)\pi x}{a}dx$$

ويمكن إيجاد هذين التكاملين بالتجزئ :

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

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

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

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

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

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

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

$$(p_x)_{nm} = \int_0^a \psi_n^* p_x \psi_m \, dx = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi nx}{a}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\sin\frac{\pi mx}{a}\,dx$$

$$= \frac{2\hbar}{ai}\cdot\frac{\pi m}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi nx}{a}\cos\frac{\pi mx}{a}\,dx$$

ولإيجاد هذا التكامل نستخدم القانون :

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

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

$$= \frac{\pi m\hbar}{ia^2}\left[-\frac{\cos\frac{(n+m)\pi x}{a}}{\frac{(n+m)\pi}{a}} - \frac{\cos\frac{(n-m)\pi x}{a}}{\frac{(n-m)\pi}{a}}\right]_0^a$$

$$= -\frac{m\hbar}{ia}\left[-\frac{\cos\frac{(n+m)\pi x}{a}}{(n+m)} + \frac{\cos\frac{(n-m)\pi x}{a}}{(n-m)}\right]_0^a$$

$$= -\frac{m\hbar}{ia}\left[\frac{(-1)^{n+m}-1}{(n+m)} + \frac{(-1)^{n-m}-1}{(n-m)}\right]$$

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

وفي حالة $(n\pm m)$ فردي فإن

$$(p_x)_{nm} = -\frac{m\hbar}{ia}\left[\frac{-2}{(n+m)}+\frac{-2}{(n-m)}\right]$$

$$= \frac{2m\hbar}{ia}\left[\frac{1}{n+m}+\frac{1}{n-m}\right] = \frac{2m\hbar}{ia}\left[\frac{(n-m)+(n+m)}{n^2-m^2}\right]$$

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

وفي حالة $n = m$:

$$(p_x)_{mm} = \frac{4\pi\hbar m}{ia^2}\int_0^a \sin\frac{\pi mx}{a}\cos\frac{\pi mx}{a}dx$$

$$= \frac{2\pi\hbar m}{ia^2}\int_0^a \sin\frac{2\pi mx}{a}dx = 0 \qquad \Big|\ 2\sin x\ \cos x = \sin 2x$$

ثالثاً : المصفوفة المصاحبة لـ p_x^2 :

$$(p_x^2)_{nm} = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi nx}{a}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \sin\frac{\pi mx}{a}dx$$

$$= \frac{-2\hbar^2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi nx}{a}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\sin\frac{\pi mx}{a}\right)dx$$

$$= \frac{2\hbar^2}{a}\cdot\frac{\pi^2 m^2}{a^2}\int_0^a \sin\frac{\pi nx}{a}\,\sin\frac{\pi mx}{a}dx \qquad \_\_\_\_ (1)$$

ولإيجاد هذا التكامل نستخدم القانون :

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

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

<u>عندما $n \neq m$</u> : فإن هذا التكامل يتلاشى :

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

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

$$\left(p_x^2\right)_{mm} = \frac{2\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^3} \int_0^a \sin^2 \frac{\pi m x}{a} dx$$

$$= \frac{2\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^3} \cdot \left[\frac{a}{2}\right] == \frac{\hbar^2 \pi^2 m^2}{a^2}$$

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

$$\left[p_x^2\right] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 4 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 9 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

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

الخلاصة :

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

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

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

<u>مثال (٧)</u> : حل مسألة المتذبذب التوافقي البسيط بإستخدام ميكانيكا المصفوفات .

لإثبات أن القيم الممكنة للطاقة (القيم الذاتية) للمتذبذب التوافقي البسيط هي

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

وذلك بإستخدام ميكانيكا المصفوفات نتبع الآتي :

الطاقة الكلية المتذبذب التوافقي البسيط هي :

$$E=p^2/2m_0+\frac{1}{2}m_0 w^2 x^2$$

حيث m_0 كتلة المتذبذب .

وفي صورة مصفوفات فإن :

$$[E]=\frac{1}{2m_0}[p^2]+\frac{1}{2}m_0 w^2[x^2] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(1)$$

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

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

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 ψ_n هي الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط وتعطي بالعلاقة :

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

حيث :

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

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

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

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

$$x\psi_n = N_n x H_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} = N_n x_0 \underbrace{zH_n} e^{-\frac{1}{2}z^2} \quad \Big| \; x = \frac{z}{\alpha} = z x_0$$

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

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

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

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

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

ويصبح العنصر المصفوفي x_{mn} :

$$x_{mn} = \int \psi_m^* \, x \psi_n \, dx$$
$$= x_0 \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \int \psi_m^* \, \psi_{n-1} \, dx + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \int \psi_m^* \, \psi_{n+1} \, dx \right]$$
$$= x_0 \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \, \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \, \delta_{m,n+1} \right] \qquad \text{——— (2)}$$

<u>عندما $m = n - 1$</u>

$$x_{n-1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}$$

<u>عندما $m = n + 1$</u>

$$x_{n+1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

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

$$x_{mn} = [x] = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & \cdots \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & \cdots \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & x_{01} & 0 & \cdots \\ x_{10} & 0 & x_{12} & \cdots \\ 0 & x_{21} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

$$= x_0 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \cdots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & \cdots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

<u>المصفوفات المناظرة لــ</u> 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 $n=m-2$:

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

$$\therefore x^2_{nm} = \left[x^2\right] = \begin{pmatrix} x_{01}x_{10} & 0 & x_{01}x_{12} & \cdots \\ 0 & x_{10}x_{01}+x_{12}x_{21} & 0 & \cdots \\ x_{21}x_{10} & 0 & x_{21}x_{12}+x_{23}x_{32} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

(٢) إيجاد $[p]^2$:

نوجد أولاً $[p]$ ، فمن معادلة حركة المتذبذب التوافقي البسيط $\ddot{x} = -w^2 x$ وحلها العام $x = x_0 e^{iwt}$.

ويمكن كتابتها في صورة مصفوفات :

$$x_{mn} = x_0 e^{iw_{mn}t}$$

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

$$\therefore \quad p_{mn} = m_0 \dot{x}_{mn} = i m_0 w_{mn}\ x_{mn} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

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 $m=n-1$

بكتابة :

$$w_{n-1,n}=-w \quad , \quad x_{n-1,n}=x_0\sqrt{\frac{n}{2}}$$

فمن (١) :

$$\dot{x}_{n-1,n}=i\,w_{n-1,n}\,x_{n-1,n}=-i\,w\,x_0\sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$\therefore \quad p_{n-1,n}=m_0\,\dot{x}_{n-1,n}=-i\,w\,m_0\,x_0\sqrt{\frac{n}{2}}$$

عندما $m=n+1$

بكتابة :

$$w_{n+1,n}=w \quad , \quad x_{n+1,n}=x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$\therefore \ \dot{x}_{n+1,n}=i\,w_{n+1,n}\,x_{n+1,n}=i\,w\,x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$\therefore \quad p_{n+1,n}=m_0\,\dot{x}_{n+1,n}=\ i\,w\,m_0\,x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

وللقيم الأخرى فإن : $p_{mn}=0$

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

$$=w\,m_0\,x_0\begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \cdots \\ i\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & -i\sqrt{\frac{2}{2}} & \cdots \\ 0 & i\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

المصفوفة $[p^2]$:

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

$$\therefore (p^2)_{n,n-1} = -m_0^2 w^2 (x^2)_{n,n-1} \qquad \Big| \qquad p_{n,n-1} = -i\, m_0\, w\, x_{n,n-1}$$

$$(p^2)_{n,n+1} = -m_0^2 w^2 (x^2)_{n,n+1} \qquad \Big| \qquad p_{n,n+1} = i\, m_0\, w\, x_{n,n+1}$$

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

والآن : العناصر المصفوفية لطاقة المتذبذب الكلية :

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

$$= \frac{1}{2} m_0 w^2 \begin{pmatrix} x_{01}x_{10} & 0 & -x_{01}x_{12} & \cdots \\ 0 & x_{10}x_{01}+x_{12}x_{21} & 0 & \cdots \\ -x_{21}x_{10} & 0 & x_{21}x_{12}+x_{23}x_{32} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} +$$

$$+ \frac{1}{2} m_0 w^2 \begin{pmatrix} x_{01}x_{10} & 0 & x_{01}x_{12} & \cdots \\ 0 & x_{10}x_{01}+x_{12}x_{21} & 0 & \cdots \\ x_{21}x_{10} & 0 & x_{21}x_{12}+x_{23}x_{32} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

$$= m_0 w^2 \begin{pmatrix} x_{01}\,x_{10} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & x_{10}\,x_{01} + x_{12}\,x_{21} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & x_{21}\,x_{12} + x_{23}\,x_{32} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

$$= m_0 w^2 \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{2}}\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}}\sqrt{\frac{2}{2}} + \sqrt{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{3}{2}} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

$$= m_0 w^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \qquad \text{———} \ (\mathrm{I})$$

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

حيث I مصفوفة الوحدة .

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

$$\therefore i\,m_0\,w \begin{pmatrix} -x_{01}\,x_{10} & 0 & -x_{01}\,x_{12} & \cdots \\ 0 & x_{10}\,x_{01} - x_{12}\,x_{21} & 0 & \cdots \\ x_{21}\,x_{10} & 0 & x_{12}\,x_{21} - x_{23}\,x_{32} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} -$$

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

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

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

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

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

من $(\mathrm{II}),(\mathrm{I})$:

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

وتكون العناصر القطرية لمصفوفة طاقة المتذبذب هي :

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

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

حيث $n = 0, 1, 2, \cdots\cdots$

وهو المطلوب .

مثال (٨) : للمتذبذب التوافقي البسيط حيث الهاملتونيان :

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

وحيث :

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

أثبت أن

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

وأن

$$\langle \ell | xp + px | \ell \rangle = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_(2)}$$

الحل :

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

بأخذ العنصر المصفوفي لكلاً الطرفين بين الحالتين k, ℓ للمتذبذب

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

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

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

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

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

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

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

$$\therefore \langle k \,|\, xp + px \,|\, \ell \rangle = \frac{m_0}{i\hbar}\langle k \,|\, x(xH - Hx) + (xH - Hx)x \,|\, \ell \rangle$$

$$= \frac{m_0}{i\hbar}\langle k \,|\, x^2 H - xHx + xHx - Hx^2 \,|\, \ell \rangle$$

$$= \frac{m_0}{i\hbar}\langle k \,|\, x^2 H - Hx^2 \,|\, \ell \rangle$$

$$= \frac{m_0}{i\hbar}(E_\ell - E_k)\langle k \,|\, x^2 \,|\, \ell \rangle$$

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 $(\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_y)$

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

وجدنا فيما سبق (الجزء الأول) أن الدوال $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ هـي دوال ذاتيـة آنية لكل من المؤثرين $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ ، فبأستخدام الخاصية العيارية التعامدية للـدوال $Y_{\ell,m}$ ، يمكننا كتابة العناصر المصفوفية للمؤثرين $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ بالصورة :

$$(L^2)_{\ell,m;\,\ell',m'} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{\ell,m} L^2 Y_{\ell',m'} \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$= \hbar^2\, \ell(\ell+1) \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{\ell,m} Y_{\ell',m'} \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$= \hbar^2\, \ell(\ell+1)\cdot \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$$

$$(L_z)_{\ell,m;\,\ell',m'} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{\ell,m} L_z Y_{\ell',m'} \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$= m\hbar \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{\ell,m} Y_{\ell',m'} \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$= m\hbar \cdot \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$$

ويلاحظ أن قيم m هي : $m = 0, \pm1, \pm2, \cdots, \pm\ell$

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

نأخذ الحالتين $\ell = 2$, $\ell = 1$

$\ell = 1$:

$$\begin{array}{cc} \boxed{m \quad 1 \quad 0 \quad -1} & m' \\ L^2 = \hbar^2 \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} 1\downarrow \\ 0 \\ -1 \end{array} \end{array}$$

$$\begin{array}{cc} \boxed{m \quad 1 \quad 0 \quad -1} & m' \\ L_z = \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} 1\downarrow \\ 0 \\ -1 \end{array} \end{array}$$

$\ell = 2:$

$$\begin{array}{rl} & \boxed{\begin{array}{cccccc} m & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \end{array}} \quad m' \\ L^2 = \hbar^2 & \left[\begin{array}{ccccc} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{array}\right] \begin{array}{c} 2\downarrow \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array} \end{array}$$

$$\begin{array}{rl} & \boxed{\begin{array}{cccccc} m & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \end{array}} \quad m' \\ L_z = \hbar^2 & \left[\begin{array}{ccccc} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{array}\right] \begin{array}{c} 2\downarrow \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array} \end{array}$$

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 $L_\pm = L_x \pm i L_y$ ونوجد المصفوفتان المصاحبتان للمؤثرين L_+ , L_- كالآتي :

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + L_z^2 - i(L_yL_x - L_xL_y)$$
$$= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + L_z^2 - i(-i\hbar L_z) = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z$$

وحيث أن [الجزء الأول] :

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

بالضرب في $Y^*_{\ell,m'}$ والتكامل نحصل على :

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

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

حيث العنصر المصفوفي :

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

وبإستخدام قاعدة حاصل ضرب مصفوفتين :

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

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

والآن :

$$(L_-)_{km} = (L_x - iL_y)_{km} = (L_x - iL_y)^*_{mk}$$
$$= (L_x + iL_y)_{mk} = (L_+)_{mk}$$

[من الخاصية الهيرميتية للعناصر المصفوفة $A_{nm} = A^*_{mn}$]

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

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 .

$$\therefore \quad L_\pm Y_{\ell,m} = C_\pm Y_{\ell,m\pm1}$$

حيث $C_+ = C_m \; , \; C_- = C'_m$

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

$$\therefore \quad L_+ Y_{\ell,m} = C_m Y_{\ell,m+1}$$
$$L_- Y_{\ell,m} = C'_m Y_{\ell,m-1}$$

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

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) :

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

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

$$C_{m-1}^2 = \hbar^2 \left[(\ell+m)(\ell-m+1)\right]$$

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

وبكتابة $m-1 \to m$ 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

$L_+ = L_x + i L_y$ و $L_- = L_x - i L_y$ هما :

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

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

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

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

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

$\delta_{m',m\pm1} = 1$ عندما $m' = m \pm 1$

$$\therefore \boxed{(L_x \pm i L_y)_{m\pm1,m} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)\,(\ell \pm m + 1)}}$$

وفي التمثيل $- m$ **حيث** $\ell = \ell'$: فإنه يمكن إيجـاد المصـفوفات المصـاحبة للمؤثرين L_+ , L_- لقيم ℓ المختلفة ، حيث $m = 0 \;,\; \pm 1 , \cdots\cdots , \pm \ell$.

عندما $\ell = 1$:

$$\begin{array}{cc} \boxed{m \quad 1 \quad 0 \quad -1} & m' \\ L_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{matrix} 1 \downarrow \\ 0 \\ -1 \end{matrix} \end{array}$$

$$L_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}$$

عندما $\ell = 2$:

$$\begin{array}{c|ccccc|c} & m: 2 & 1 & 0 & -1 & -2 & m' \\ \end{array}$$

$$L_+ = \hbar \begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccccc} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} 2\downarrow \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array}$$

$$L_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

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

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

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 الصفرية .

$$\therefore \; L_z = \hbar \begin{array}{c|cc|c} \boxed{m} & +\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \boxed{m} \\ \hline & \frac{1}{2} & 0 & +\frac{1}{2} \\ & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{array} = \hbar/2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

أيضاً لإيجاد L_x, L_y :

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

$$\therefore \; L_+ + iL_y = \hbar \begin{array}{c|cc|c} \boxed{m} & +\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \boxed{m+1} \\ \hline & 0 & 1 & +\frac{1}{2} \\ & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{array} = \hbar\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{———} (1)$$

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

$$\therefore\; L_x - iL_y = \hbar \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \boxed{m}+\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\;\boxed{m-1} \end{array} \\ \left[\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{———} \quad (2)$$

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 أستخدامها في الجزء الأول بدون برهان .