المؤثرات Operators

كل الكميات التي يمكن قياسها تجريبياً مثل الموضع والزخم والطاقة تسمى بالكميات الملاحظة observables وتمثل هذه الكميات في الميكانيك الكمي بالمؤثرات.

والمؤثر هو الكمية التي إذا أثرت على دالة الموجة حولتها الى دالة موجة جديدة.

ويمكن التمييز بين الكمية الملاحظة A والكمية التي يمثلها المؤثر في الميكانيك الكمي بالرمز A_{op} او $\hat{A}$ وكما موضح الآتي:

① مؤثر الموضع $\hat{r}$

$$\hat{r} = r$$

or $$\hat{x} = x \;,\; \hat{y} = y \;,\; \hat{z} = z$$

② مؤثر الزخم $\hat{p}$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla$$

or $$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \;,\; \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \;,\; \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

③ مؤثر الزخم الزاوي $\hat{L}$

$$\hat{L} = -i\hbar\nabla \times r$$

④ مؤثر الطاقة الحركية $\hat{T}$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

⑤ مؤثر الطاقة الكلية (الهاملتونية) Hamiltonian Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

ومن معادلة شرودنجر TDSE

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + V(r)\,\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)$$

$$H\,\psi(r,t) = E\,\psi(r,t)$$

من الجدير بالذكر أن المؤثرات الكمية يجب أن تتصف بصفات معينة

ليكن $\hat{F}$ مؤثر operator

و ψ_1, ψ_2 دالتان مستمرتان بشرط الدالة (أحادية القيمة، محدودة، ومكن تفاضل مرتين) فيطلق على $\hat{F}$ مؤثراً خطياً إذا حقق الخطيان التاليين:

$$\hat{F}(\psi_1+\psi_2) = \hat{F}\psi_1 + \hat{F}\psi_2$$

$$\hat{F}(c\psi) = c\hat{F}\psi \qquad \text{where } c \text{ is Constant}$$

وعلى سبيل المثال ليكن $\hat{F}=\frac{d}{dx}$ نلاحظ انه خطي لكونه يحقق الشرطين اعلاه

$$\frac{d}{dx}(\psi_1(x)+\psi_2(x)) = \frac{d}{dx}\psi_1(x) + \frac{d}{dx}\psi_2(x)$$

ومن الجدير بالذكر انه ليست جميع المؤثرات خطية وليكن $\hat{F}=\sqrt{\ }$ نلاحظ

$$\sqrt{\psi_1+\psi_2} \neq \sqrt{\psi_1}+\sqrt{\psi_2}$$

كما أن المؤثرات تخضع للعمليات الجبرية (الجمع، الطرح، الضرب)

ليكن $\hat{F}$ ، $\hat{M}$ مؤثرين يؤثران على الدالة ψ :-

$$(\hat{F}+\hat{M})\psi = \hat{F}\psi + \hat{M}\psi$$

$$(\hat{F}-\hat{M})\psi = \hat{F}\psi - \hat{M}\psi$$

$$\hat{F}\hat{M}\psi = \hat{F}(\hat{M}\psi)$$

أي أن المؤثر $\hat{M}$ يؤثر على الدالة ψ والمؤثر $\hat{F}$ يؤثر على الناتج.

المؤثر المتبدل Commutator

لنفرض بأن المؤثرين $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ يؤثران بصورة متتالية على الدالة ψ فيتعلم على المؤثرين $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ بالتبادلين Commutator أذا حققا الشرط الاتي

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi \Rightarrow \hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = 0$$

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

$$\hat{C} = [\hat{A},\hat{B}] = 0 \qquad \text{وكتب باختصار}$$

Where $\hat{C}$ is Commutator

وأن هذه الصفة تؤدي الى امكانية ايجاد مجموعة كاملة من الدوال الذاتية المشتركة ψ_n لكل من $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ وهذا يعني امكانية تمثيلها رياضيا بدقة متناهية (آنيا)

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

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

حيث A_n ، B_n تمثل قيم ثابتة وتمثل القيم المسموحة الخاصة للدالة ψ_n

ومن الأمثلة على المؤثرات التي تبادلية

$$[\hat{x}, \hat{V}_x] = 0 \quad , [\hat{x}, \hat{y}] = 0 \quad , [\hat{P}_x, \hat{P}_y] = 0 , [\hat{P}_x, \hat{T}] = 0$$

أما إذا كان المؤثران $\hat{A}, \hat{B}$ غير تبادليين فإن:-

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

وهذا يعني أنه لا يمكن قياس $\hat{A}, \hat{B}$ آنياً وبدقة متناهية وهذا يتوافق مع مبدأ اللادقة (اللاتحديد) Heisenberg Uncertainty principle

ومن الأمثلة على المؤثرات غير التبادلية:-

$$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right] \neq 0 , [\hat{H}, \hat{P}_x] \neq 0 , [\hat{V}(x), \hat{P}_x] \neq 0 , [\hat{x}, \hat{P}_x] \neq 0$$

وأهم النتائج الرياضية للمؤثر التبادلي Commutator هي:-

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

2 $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$

3 $[\hat{A}, \hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$

4 $[\hat{A}+\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$

5 $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$

6 $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$

7 $[\hat{A}^2, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A} + \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A}$

8 $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$

9 $[\hat{A}, b] = 0$

Where $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ Linear operators and b is a Constant

Ex: Evaluate $\left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^n}{\partial x^n}\right]$?

Sol:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^n}{\partial x^n}\right]\psi = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi - \frac{\partial^n}{\partial x^n}\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}}\psi_n - \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}}\psi_n = 0 \quad \text{Commute}$$

Ex: Evaluate $\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]$?

Sol

$$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]\psi = \frac{d}{dx}x^2\psi - x^2\frac{d}{dx}\psi = 2x\psi + x^2\frac{d\psi}{dx} - x^2\frac{d\psi}{dx}$$

$$\therefore \left[\frac{d}{dx}, x^2\right] = 2x$$

Ex: Evaluate $\left[\hat{x}^n, \hat{p}_x\right]$?

Sol

$$\left[\hat{x}^n, \hat{p}_x\right]\psi = \hat{x}^n\hat{p}_x\psi - \hat{p}_x\hat{x}^n\psi \quad \text{but } \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$= -i\hbar\left(x^n\frac{\partial}{\partial x}\psi - \frac{\partial}{\partial x}x^n\psi\right)$$

$$= -i\hbar\left(x^n\frac{\partial\psi}{\partial x} - nx^{n-1}\psi - x^n\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = i\hbar n x^{n-1}\psi$$

$$\therefore \left[\hat{x}^n, \hat{p}_x\right] = i\hbar n x^{n-1}$$

Ex: Prove that $\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$?

Sol: $\because \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V \Rightarrow \left[\hat{H}, \hat{x}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{x}\right]$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{x}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right] + \left[\hat{V}, \hat{x}\right] \quad \cdots ①$$

but: $\left[\hat{V}, \hat{x}\right]\psi = Vx\psi - xV\psi = 0 \Rightarrow \left[\hat{V}, \hat{x}\right] = 0 \quad \cdots ②$

and $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right] = \left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right]\hat{p} + \hat{p}\left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right] \quad \cdots ③$

$$\left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right]\psi = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}x\psi - x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -\frac{i\hbar}{2m}\psi \Rightarrow \left[\frac{\hat{p}}{2m}, \hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{2m} \quad \cdots ④$$

④ in ③ $\Rightarrow$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{2m}\hat{p} - \hat{p}\frac{i\hbar}{2m} = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p} \quad \cdots ⑤$$

② and ⑤ in ① $\Rightarrow$

$$\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

H.W. ① Evaluate $[\hat{P}_x^n, \hat{x}^n]$, $[\hat{H}, \hat{P}_x]$ for the Harmonic oscillator and $[\hat{P}_x, \hat{T}]$ and what is the physical meaning of the results ?

② Evaluate $[\hat{H}, \hat{T}]$ for a free particle ?