صياغة مصفوفية للميكانيك الكمي   Matrix Formulation of Quantum Mechanics

لا شك ان الطالب لديه الكثير من المعلومات عن المصفوفات وكيفية التعامل معها ومع العمليات الحسابية من عمليات الجمع والطرح والضرب والقسمة ...... الخ

وما يهمنا في الميكانيك الكمي اهم صفات المصفوفات وهي الصفة الهرميتية والصفة الواحدية :

تعرف المصفوفة الهرميتية بانها تلك المصفوفة التي تساوي مصفوفتها الهرميتية المقابله (المساعدة)، تكون المصفوفة A مصفوفة هرميتية اذا حققت العلاقة التالية

$$A = A^{\dagger}$$

$$A^{\dagger}_{nm} = A^{*}_{mn}$$

المصفوفة الواحديه هي المصفوفة الذي مقلوبها يساوي مساعدها (مرافقها) الهرميتي، تكون المصفوفه A مصفوفة واحديه اذا كان

$$A^{-1} = A^{\dagger}$$

$$AA^{\dagger} = \mathbb{I}$$

في طريقة شودنجر فان الصفة الهرميتية لاي مؤثر توصف بالعلاقة

$$\int \Psi^{*}\, \hat{A}\, \Psi dr = \int [\hat{A}^{*}\Psi^{*}]\Psi dr = \int [\hat{A}\Psi]^{*}\Psi dr$$

وهذا يبين ان المؤثر $\hat{A}$ مسموح له ان يعمل على الدالة Ψ^{*} وكذلك على الدالة Ψ اذ تم جعله اولا مرافق معقد . في حالة ضرب المصفوفات $(\chi^{*})(\hat{A})(\Psi)$ فعلينا ان نضرب اولا المصفوفتين $(\chi^{*})(\hat{A})$ والناتج يمثل مصفوفة ذات عمود واحد مع المصفوفة الاخيرة (Ψ) او نضرب المصفوفتين $(\hat{A})(\Psi)$ ثم نضرب الناتج مع (χ^{*}) والنتيجه متساوية

الصفة الهرميتية للمؤثر $\hat{A}$ تسمح لنا بضرب (χ^*) من جهة اليسار بعد استبدال $\hat{A}$ بمرافقه المعقد $\hat{A}^\dagger$

$$(\chi^*)(\hat{A})(\Psi) = \{(\hat{A}^\dagger)(\chi)\}^\dagger(\Psi) = \{(\hat{A})(\chi)\}^\dagger(\Psi)$$

اذا كانت محددة المصفوفة A لا تساوي صفر فان عناصر المقلوب يمكن الحصول عليها من

$$[\mathrm{a_{kl}}]^{-1} = (-1)^{\mathrm{l+k}} \frac{(\mathrm{cofactor})_{\mathrm{lk}}}{|\mathrm{A}|}$$

سؤال: أعطيت المصفوفة $A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 0 \\ 1 & -1 & 3 \\ 4 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ جد مقلوب المصفوفة A ؟

$$ans = A^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{31} & -\frac{3}{31} & \frac{9}{31} \\ \frac{11}{31} & \frac{2}{31} & -\frac{6}{31} \\ \frac{4}{31} & \frac{12}{31} & -\frac{6}{31} \end{pmatrix}$$

المؤثرات كمصفوفات Operators as Matrices

مؤثرات الميكانيك الكمي كما هو معروف هي مؤثرات خطية ولكونها تحمل هذه الصفة يمكن تمثيلها بمصفوفات (اي ان هناك امكانية لتمثيل مختلف المعادلات والمؤثرات في الميكانيك الكمي بلغة المصفوفات)

لنختار الدوال الاساسية $S_n(\vec{r})$ للمؤثر $\hat{A}$ ، افترض ان تأثير المؤثر $\hat{F}$ على واحدة من الدوال $S_n(\vec{r})$ يولد دالة اخرى $\chi_n(\vec{r})$

$$\hat{F}\, S_n(\vec{r}) = \chi_n(\vec{r})$$

يمكن توسيع الدالة الجديدة $\chi_n(\vec{r})$ بدلالة $S_n(\vec{r})$ لان الخيرة تمثل مجموعه كاملة

$$\chi_n(\vec{r}) = \sum_m f_{mn}\, S_m(\vec{r})$$

f_{mn} هي عوامل متوقعه (Projections coefficients)

قيمة هذه العوامل تعطى من الضرب اللاتجاهي للدوال $S_m(\vec{r})$ و $\chi_n(\vec{r})$

$$f_{mn} = < S_m(\vec{r}) | \chi_n(\vec{r}) >$$

$$= \int S_m(\vec{r})^* \ \chi_n(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$= \int S_m(\vec{r})^* \hat{F} \ S_m(\vec{r}) d\hat{r}$$

يمكن ان نكتب الضرب اللاتجاهي (وعموما معقد) كمصفوفة مربعة

$$f_{mn} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \dots\dots . . f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & . . \dots \dots f_{2n} \\ \dots & \dots \dots \dots & \dots \dots \dots \\ \dots & \dots \dots \dots & \dots \dots \dots . \\ \dots & \dots \dots \dots & \dots \dots \dots . \\ f_{m1} & f_{m2} & \dots . . f_{mn} \end{pmatrix}$$

اذا كانت المصفوفة قطرية اي ان كل عناصرها تساوي صفر ما عدا تلك التي تقع على القطر الرئيسي فان المقادير التي على القطر هي قيم ذاتية للمؤثر $\hat{F}$ واذا كانت لدينا مصفوفة المؤثر $\hat{F}$ فاننا نستطيع اجاد القيم الذاتية لهذا المؤثر من خلال جعل مصفوفته قطريه.

لنفرض انه لدينا دالة لا على التعيين (دالة اعتباط) $\Psi(\bar{r})$ ووسعنا هذه الدالة بدلالة الدوال الاساسية $S_n(\vec{r})$

$$\Psi(\bar{r}) = \sum_n C_n \ S_n(\vec{r})$$

$$\chi(\vec{r}) = \hat{F} \ \Psi(\bar{r})$$

$$= \hat{F} \ \sum_n C_n \ S_n(\vec{r})$$

$$= \sum_m \sum_n f_{mn}\, C_n\ S_n(\vec{r})$$

وان الدالة $\chi(\vec{r})$ يتم توصيفها بواسطة f_{mn} و C_n بالكامل ، ان عملية الجمع المزدوجه تكتب على شكل مصفوفة بالشكل التالي

$$\begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \chi(\vec{r}) \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & F & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ C_n \end{bmatrix}$$

فعل مصفوفة F على المتجه $\Psi(\bar{r})$ ينتج متجه على شكل عمود $\chi(\vec{r})$.

لنرى عملية الضرب اللااتجاهي لحالتين

$$\Psi(\bar{r}) = \sum_n C_n\ S_n(\vec{r})$$

$$\chi(\vec{r}) = \sum_n d_n\ S_n(\vec{r})$$

$$<\ \chi(\vec{r})\ ,\Psi(\bar{r}) >= (d_1^*\ \ d_2^*\ \ d_3^* \ldots\ldots d_n^*) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_n \end{pmatrix}$$

$$<\ \chi(\vec{r})\ ,\Psi(\bar{r}) >= \sum_n d_n^*\ C_n$$

اما ضرب الدالة العامة في نفسها فيكون

$$< \Psi(\vec{r}) \ ,\Psi(\bar{r}) > = \ (C_1^* \ \ C_2^* \ \ C_3^* \ldots\ldots\ldots C_n^*) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ C_n \end{pmatrix}$$

$$< \Psi(\vec{r}) \ ,\Psi(\bar{r}) > = \sum_n |C_n|^2 = 1$$

القيمة المتوقعه لاي مؤثر $\hat{F}$ لنظام في الحالة $\Psi(\vec{r})$ تكتب بالشكل التالي

$$< \Psi(\vec{r}) \ ,\hat{F}\Psi(\bar{r}) >= (C_1^* \ \ C_2^* \ \ C_3^* \ldots\ldots\ldots C_n^*) \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \ldots\ldots\ldots f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & \ldots\ldots\ldots f_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ f_{m1} & f_{m2} & \ldots\ldots f_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ C_n \end{pmatrix}$$

حاصل الضرب غير المتجهي f_{mn} عادة يسمى عناصر مصفوفة $\hat{F}$ بين الحالتين S_m و S_n

مصفوفات المؤثرات للمتذبذب التوافقي

مصفوفة الهاملتونين:

$$\hat{H} \ = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\ kx^2$$

$$\hat{H} \ \ \Psi_n(x) = E_n \ \ \Psi_n(x)$$

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

$$H_{mn} = < \ \Psi_m(x)\big|\hat{H}\big|\ \Psi_n(x) > = \ (n + \tfrac{1}{2})\,\hbar w\ \delta_{mn}$$

وان المصفوفة تكتب كالتالي

$$H = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\ \hbar w & 0 & 0 & 0 & 0 \ \ldots\ldots. \\ 0 & \frac{3}{2}\ \hbar w & 0 & 0 & 0 \ \ldots\ldots\ldots. \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\ \hbar w & . & \ldots\ldots\ldots\ldots.\ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots\ldots..\ldots\ldots. & & \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar w \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots. \\ & & & & \end{bmatrix}$$

مصفوفة الهاملتون للمتذبذب التوافقي هي مصفوفة قطريه

<u>مصفوفة مؤثر مركبة الزخم $\hat{p}_x$</u>

ان مؤثر مركبة الزخم باتجاه المحور x تعطى بالعلاقة $\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ ، أما القيمة الذاتية فتحسب من

$$\left(\hat{P}_x\right)_{mn} =< \ \Psi_m(x)\big|\hat{P}\big|\ \Psi_n(x) >$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x)\hat{P}_x\ \Psi_n(x)dx$$

وبتمثيل ξ أذ ان $\xi = \sqrt{\alpha}\,x$ وكذلك متعدد حدود هرمت $H_n(\ \xi\ )$

$$\left(\hat{P}_x\right)_{mn} = \frac{\hbar}{i} A_m^*\ A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2}\ H_m(\ \xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left[e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)\right] dx$$

وباستخدام علاقات متعدد حدود هرمت $2\,\xi\, H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2\mathrm{n}H_{n-1}(\xi)$ نحصل عل

$$(\hat{P}_x)_{mn} = \frac{\hbar}{i} A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} n \;\; H_m(\xi) H_{n-1}(\xi)\, \mathrm{d}\xi$$
$$- \frac{\hbar}{2i} A_m^* A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \;\; H_m(\xi) H_{n+1}(\xi)\, \mathrm{d}\xi$$

نلاحظ التكامل الاول يساوي صفر مالم $n - 1 = m$ وبذلك يكون التكامل الاول

$$(\hat{P}_x)_{m,m+1} = \frac{\hbar}{i} A_m^* A_{m+1}(m+1) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \;\; H_m(\xi) H_m(\xi)\, \mathrm{d}\xi$$

$$(\hat{P}_x)_{m,m+1} = \frac{\hbar}{i} A_m^* A_{m+1}(m+1)\;\; 2^m m! \sqrt{\pi}$$

$$(\hat{P}_x)_{m,m+1} = \frac{\hbar}{i}(m+1) \left[\frac{1}{2^m m!} \left(\frac{\propto}{\pi}\right)^{1/2}\right]^{1/2} \left[\frac{1}{2^{m+1}(m+1)!} \left(\frac{\propto}{\pi}\right)^{1/2}\right]^{1/2} \;\; 2^m m! \sqrt{\pi}$$

وبتبسيط هذه المعادلة نحصل على النتيجه التاله

$$(\hat{P}_x)_{m,m+1} = \hbar \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2} \left(-i\sqrt{m+1}\right)$$

وبنفس الطريقة فالتكامل الثاني يساوي صفر مالم $n + 1 = m$ وبذلك يكون التكامل الثاني

$$(\hat{P}_x)_{m,m-1} = \hbar \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2} \left(i\sqrt{m}\right)$$

وبالتالي تكون النتيجة

$$\hat{P}_x = \hbar \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2} \begin{cases} (-i\sqrt{m+1} \\ i\sqrt{m} \end{cases}$$

وستكون المصفوفة مساوية الى

$$\hat{P}_x = \hbar \left(\frac{\propto}{2}\right)^{1/2} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & -i\sqrt{4} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & -i\sqrt{m} & 0 & \\ & i\sqrt{m} & 0 & -i\sqrt{m+1} & \\ & 0 & i\sqrt{m+1} & 0 & \end{bmatrix}$$