التصور المتجهي لدوال الموجة: فضاء هلبرت

Vector Description of Waves: Hilbert space

نشأ التصور المتجهي لدالة الموجة من خلال ملاحظة إمكانية فتحها على دوال أساسية Basis Functions تؤلف مجموعة كاملة Complete Set.

$$\psi(x) = \sum_n e_n \psi_n$$

وفيها ψ_n هي مركبات $\psi(x)$. بينما e_n تلعب دور الدوال الأساسية حيث تؤلف $\{e_n\}$ مجموعة كاملة. وحيث أن

$$\psi_m = \int e_m \psi(x) dx$$

إن هذا النوع من العلاقات يوحي بأن $\psi(x)$ هي متجه يتألف من عدد n من المركبات التي تنفتح في فضاء متجهي جديد يمكن أن نسميه فضاء الحالة state space.

الآن نتذكر أن فتح المتجه $\vec{A}$ بدلالة مركباته والمجموعة الكاملة من المتجهات الأساسية (متجهات الوحدة i, j, k) يكون كما يلي

$$\vec{A} = iA_x + jA_y + kA_z$$

ونتذكر أيضا أن المركبات يمكن أن تكتب بالشكل التالي

$$A_x = i.\vec{A}$$

$$A_y = j.\vec{A}$$

$$A_z = k.\vec{A}$$

حيث أن الدوال الأساسية هي مجموعة كاملة من دوال متعامدة orthogonal.

ولغرض توظيف هذا التصور فعليا في حالة فضاء الحالة فإننا سوف نعطي الدالة ψ رمزاً جديداً هو $|\psi>$. كما سنعطي الدوال الأساسية رمزاً هو $|e_n>$. وقد سميت هذه رموز براكت وهي من كلمة bra-ket حيث يدعى $<\psi|$ برا بساي، بينما يدعى $|\psi>$ والعلاقة بينهما هي أن

$$<\psi| = (<\psi^*|)^T = (<\psi|)^+$$

لذلك يقال أن $<\psi|$ هو القرين الهرمايتي للمتجه[1] $|\psi>$.

علينا أن نتذكر أن جميع المتجهات والمتجهات الأساسية في فضاء الحالة هي دوال معقدة complex Functions في الحالة العامة وتحتوي على جزء حقيقي وآخر خيالي.

---

[1] رمزنا للقرين الهرمايتي بعلامة + لعدم توفر علامة الداكر.

وبهذا يصبح ممكنا كتابة المتجه $|\psi>$ كما يلي

$$|\psi>=\sum_n \psi_n |e_n>$$

من الواضح أن ψ_n هي مركبات متجه الحالة state vector $|\psi>$. وهي تعطى كما يلي

$$\psi_n = \int e_n^* \psi \, dx$$

حيث أن النجمة إشارة إلى القرين المعقد complex conjugate.

واضح أن هذه المركبات تمثل حاصل الضرب العددي للمتجه $|\psi>$ مع المتجهات الأساسية $|e_n>$ لذلك يمكن أن نكتبها بالصيغة الأنيقة

$$\psi_n = \sum_n < e_n |\psi>$$

تسمى الكمية $< e_n |\psi>$ المضروب العددي scalar product للمتجه $|\psi>$ والمتجه الأساسي $|e_n>$ وهو كمية غير متجهة طبعاً.

واضح أن

$$< e_n |\psi>=<\psi| e_n>^*$$

إن الشرط الدائم هنا هو أن تكون المتجهات الأساسية متعامدة ومقومة، أي

$$< e_m | e_n >= \delta_{mn}$$

بهذه الطريقة يمكن تأليف ما يسمى فضاء هلبرت: وهو فضاء متجهي لا نهائي الأبعاد متجهاته الأساسية دوال معقدة متعامدة تنفتح عليها المتجهات الأخرى.

ملاحظات:

1. المتجهات في فضاء هلبرت هي دوال معقدة عموما لذا فهي تعميم للمتجهات الديكارتية.
2. فضاء هلبرت عموما لا نهائي الأبعاد أساسياته دوال معقدة متعامدة مقومة Orthonormal لذا فهو تعميم للفضاء الديكارتي.
3. فضاء هلبرت هو فضاء متجهي خطي Linear تنطبق عليه جميع اشتراطات الخطية.

معادلة القيمة المخصوصة

تصبح معادلة القيمة المخصوصة بالترميز الجديد في فضاء هلبرت كما يلي

$$A|\psi_n>=\alpha|\psi_n>$$

والآن لو أخذنا المضروب العددي مع $<\psi_m|$ فإننا نحصل على

$$\begin{aligned}<\psi_m|A|\psi_n> &= \alpha<\psi_m|\psi_n> \\ &= \alpha\,\delta_{mn}\end{aligned}$$

من هذا يتبين أن الإجراءات في فضاء هلبرت هي مصفوفات مربعة square matrix.

يسمى العدد $<\psi_m|A|\psi_n>$ عنصر المصفوفة matrix element. ويمكن أن نكتب جميع عناصر المصفوفة الممثلة للإجراء كما يلي

$$\begin{aligned}<\psi_m|A|\psi_n> &= A_{mn} \\ &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & . & . & . \\ . & . & A_{23} & . & . \\ . & . & . & . & . \\ A_{41} & . & A_{43} & . & . \\ . & . & . & . & A_{mm} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

كما يتبين أن المتجه $|\psi>$ هو مصفوفة عمودية يمكننا كتابتها بدلالة عناصرها كما يلي

$$|\psi> = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ . \\ . \\ \\ \end{pmatrix}$$

إن القرين الهرمايتي $<\psi|$ هو مصفوفة أفقية عناصرها هي

$$<\psi| = \left(\psi^*{}_1 \quad \psi_2^* \quad . \quad . \quad .\right)$$

وهكذا يكون

$$<\psi|\psi> = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + ...$$

فتح المتجهات بدلالة مركباتها

إذا توفرت لدينا مجموعة كاملة من المتجهات الأسسية $\{i\}$ فإن بالمكان فتح المتجه $|\psi>$ بدلالة مركباته كما يلي

$$|\psi> = \sum_i \psi_i|i>$$

حيث أن

$$\psi_i = <i|\psi>$$

وبذلك يكون

$$|\psi>=\sum_i |i><i|\psi>$$

أي أن

$$\sum_i |i><i|=1$$

يسمى هذا شرط الكمال completeness condition.

القيمة المتوقعة لإجراء

هي الكمية

$$<A>=<\psi|A|\psi>$$

أما إذا أخذنا $<\psi_m|A|\psi_n>=A_{mn}$ فإن هذا يمثل عنصر مصفوفة كما ذكرنا وهو يمثل قيمة الاجراء عندما يعمل بين الحالتين. أي يمثل الفارق بين قيمة الاجراء عند الحالين.

باستخدام شرط الكمال يمكن أن نبرهن أن

$$<\psi|A|\psi>=\sum_i\sum_j \psi_i^+ A_{ij}\psi_j$$

الاجراءات الهرمايتية Hermitian Operators

وقد سميت بذلك تقديرا لجهود الرياضياتي هرمايت. فإذا كان

$$<\psi|A\phi>=<A\psi|\phi>$$

فإن A يعتبر إجراءا هرمايتياً.

وبما أن $<A\psi|=<\psi|A^+$ فإن كون الاجراء A هرمايتياً يعني لا بد أن يكون:

$$A^+=A$$

مبرهنة(1):

تكون القيم المخصوصة للإجراءات الهرمايتية دوما حقيقية.

البرهان: ليكن

$$A|\psi>=\alpha|\psi>$$

فإذا كان A هرمايتيا فإن $<\psi|A\phi>=<A\psi|\phi>$ وهذا معناه أن

$$\alpha=\alpha^*$$

وهذا معناه ان القيمة المخصوصة حقيقية.

مبرهنة(2):

الاجراءات الهرمايتية التي لها قيم مخصوصة مختلفة تكون متعامدة دائما.

البرهان:

خذ

$$A|\psi_1>=\alpha_1|\psi_1>$$
$$A|\psi_2>=\alpha_2|\psi_2>$$
$$\alpha_1\neq\alpha_2$$

وخذ المضروب العددي مع $<\psi_2|$ ليكون

$$<\psi_2|A|\psi_1>=\alpha_1<\psi_2|\psi_1>=\alpha_2<\psi_2|\psi_1>$$

أي أن

$$(\alpha_1-\alpha_2)<\psi_2|\psi_1>=0$$

وهذا يعني أن المتجهين متعامدين

$$<\psi_2|\psi_1>=0$$