13- القيمة المتوقعة للمؤثر expectation values of operators :

في كثير من الحالات نحتاج لتفاضل القيمة المتوقعة بالنسبة للزمن وهذا بالطبع يشمل المؤثر المدروس وذلك لإثبات بعض النتائج المهمة في ميكانيكا الكم ،ويتم ذلك وفق الخطوات التالية:

$$\langle A\rangle = \int \psi^* \hat{A}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}\int \psi^* \hat{A}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \int\left(\frac{d\psi^*}{dt}\hat{A}\psi dv + \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi + \int \psi^* \hat{A}\frac{d\psi}{dt}\right)dv$$

$$\hat{\mathrm{H}}\psi = \hat{E}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{\mathrm{H}}\psi \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathrm{H}}\psi$$

$$\text{and} \qquad \frac{\partial}{\partial t}\psi^* = \frac{-1}{i\hbar}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^*$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \int\left(\psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi + \frac{-1}{i\hbar}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^* \hat{A}\psi + \int \psi^* \hat{A}\frac{1}{i\hbar}\hat{\mathrm{H}}\psi\right)dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^* \hat{A}\hat{\mathrm{H}}\psi - \left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^* \hat{A}\psi\right)dv + \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\text{where} \qquad \int\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^* \hat{A}\psi dv = \int \psi^* \left(\hat{\mathrm{H}}\hat{A}\psi\right)dv$$

$$\text{then} \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^* \hat{A}\hat{\mathrm{H}}\psi - \psi^* \hat{\mathrm{H}}\hat{A}\psi\right)dv + \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^* \left[\hat{A}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{A}\right]\psi\right)dv + \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left(\int \psi^* \left[\hat{A}, \hat{\mathrm{H}}\right]\psi\right)dv + \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi dv$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}, \hat{\mathrm{H}}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{A}\right]$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{A}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{d\hat{A}}{dt}\right\rangle \rightsquigarrow$$

تبين القيمة المتوقعة للمؤثر اذا كان يتبع الزمن صراحة

$$\left\langle \frac{dA}{dt}\right\rangle = 0$$

$$\therefore \frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle \rightsquigarrow$$

اذا كان المؤثر لا يعتمد على الزمن صراحة

مبدأ ايرنفست — ehrenfest's (theorm) principle :-

تهدف هذه النظرية الى اختزال معادلات ميكانيك الكم الى شكلها الكلاسيكي اذا استبدلنا القيم التي تخص مؤثرات في ميكانيك الكم بما يقابلها في الميكانيك الكلاسيكي. مثلاً لدينا العلاقات الكلاسيكية التالية:-

$$m\frac{dr}{dt} = p \quad -(1)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\nabla V \quad -(2)$$, whene $V(r)$ = potential energy.

والآن لنحقق العلاقة الثانية ونجد:-

من خصائص المؤثرات

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

$$\frac{dp}{dt} = -\nabla V$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{P}_x]\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle[\overbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}^{A} + \overbrace{V(x)}^{B}, \overbrace{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}^{C}]\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \langle[V(x), \frac{\partial}{\partial x}]\rangle$$, whene $[\nabla^2, \frac{\partial}{\partial x}] = 0$ = تبادليين

$$\therefore \frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \int\left[\psi^*\left(V(x)\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{(V(x)\psi)}_{\text{حاصل ضرب دالتين}}\right]dx$$

$$= \int\left[\psi^*\left(V(x)\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \psi^*\left(V(x)\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi\right)\right]dx$$

$$= \int\left[\cancel{\psi^*\left(V(x)\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi} - \cancel{\psi^*\left(V(x)\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\psi} - \psi^*\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi\right]dx$$

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = -\int\psi^*\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi\,dx = -\left\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right\rangle$$

whene $[\nabla^2, \frac{\partial}{\partial x}] = 0$

بنفس الطريقة مطلوب كواجب بيتي اثبات انه:-

$$\boxed{m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = P_x}$$