الباب الأول

نظرية التمثيل في ميكانيكا الكم

Theory of Representation in Q.M.

نظرية التمثيل في ميكانيكا الكم

(Theory of Representation in Q.M.)

هناك عدة طرق لتمثيل أو وصف المسائل في ميكانيكا الكم ، وفي هذه الطرق أما أن تكون الدوال الموجية وكذلك المؤثرات معتمدة على الزمن أو غير معتمدة على الزمن .

وسوف ندرس هنا ثلاث طرق مختلفة لتمثيل الدوال الموجية والمؤثرات في ميكانيكا الكم وهي :

(1) تمثيل شرودنجر (schroedinger representation) .

(2) تمثيل هيزنبرج (Heisenberg representation) .

(3) تمثيل تبادل التفاعل (Interaction representation) .

[1] <u>تمثيل شرودنجر</u> : في هذا التمثيل تعتمد الدوال الموجية على الزمن وتتغير بتغيره أي أن $\psi = \psi(t)$ ، ويكون التغير الزمني (أو التطور الزمني) للدالة الموجية هو

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \qquad \text{\_\_\_\_\_\_} (1)$$

(وتعرف بمعادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن) .

أما المؤثرات في هذا التمثيل فهي لا تعتمد على الزمن صراحة أي أن

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$$

وإذا كان الهاملتونيان (مؤثر هاملتون) لا يعتمد على الزمن فإن تكامل المعادلة (1) يعطي :

$$\psi(t) = \psi(0) e^{-\frac{iH}{\hbar}t}$$

حيث $\psi(0)$ هي الدالة الموجية عند بداية الزمن $(t = 0)$.

[2] تمثيل هيزنبرج : في هذا التمثيل لا تعتمد الدوال الموجية على الزمن صراحة، أي أن $\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$ ، بينما تتغير المؤثرات في هذا التمثيل بتغير الزمن ، بمعنى أن : $\hat{A}_H = \hat{A}(t)$ ، أما الدالة الموجية فتعتمد هنا فقط على الإحداثيات بمعنى أن : $\psi_H = \psi(x) = \psi(x,0)$ ويعطي التغير الزمني (أو التطور الزمني) للمؤثر في هذا التمثيل بالمعادلة :

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H , \hat{H}\right] \qquad (2)$$

(وتعرف بمعادلة هيزنبرج) .

العلاقة بين تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج :

إذا كان $\hat{A}_H$ هو المؤثر في تمثيل هيزنبرج ، وكان $\hat{A}$ هو المؤثر في تمثيل شرودنجر فإن العلاقة بينهما هي :

$$\hat{A}_H = \hat{A}_H(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \qquad (3)$$

فمثلاً في تمثيل هيزنبرج فإن مؤثري الإزاحة وكمية الحركة يعطيان من :

$$\hat{x}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} x e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} , \quad \hat{p}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{p} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

أمثلة محلولة :

مثال (١) : إذا كانت العلاقة بين المؤثرات في تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج هي :

$$\hat{A}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

فاستنتج معادلة الحركة لهيزنبرج (أو معادلة التطور الزمني للمؤثرات) الصورة :

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H , \hat{H}\right]$$

الحـــل: حيث أن :

$$\hat{A}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\,\hat{A}\,e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

فبالتفاضل نجد أن :

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left[\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\right)+\frac{d\hat{A}}{dt}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\right]+e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\right)\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}+\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}\right)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$= \left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_H+\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}\right)_H$$

حيث أنه في تمثيل هيزنبرج :

$$\left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

وبكتابة : $\left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_H = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$, $\left(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}\right)_H = \hat{H}\hat{A}_H-\hat{A}_H\hat{H}$

$$\therefore \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}_H-\hat{A}_H\hat{H}\right) = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{A}_H\hat{H}-\hat{H}\hat{A}_H\right)$$

$$\therefore \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}+-\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]$$

وإذا لم يكن هناك إعتماد صريح على الزمن فإن $\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}=0$:

$$\therefore \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]$$

وهي معادلة التطور الزمني للمؤثر في تمثيل هيزنبرج (معادلة هيزنبرج) .

<u>مثال (٢)</u> : أثبت أن مؤثر هاملتون (الغير معتمد على الزمن) في تمثيل هيزنبرج $\left(\hat{H}_H\right)$ يكافئ مؤثر هاملتون في تمثيل شرودنجر $\left(\hat{H}\right)$.

<u>الحـــل :</u>

حيث أن العلاقة بين أي مؤثر في تمثيل هيزنبرج $\left(\hat{A}_H\right)$ والمؤثر فـــي تمثيـــل شرودنجر $\left(\hat{A}\right)$ هي :

$$\hat{A}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\,\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

فبتطبيق هذه العلاقة على المؤثر $\hat{H}$:

$$\therefore \hat{H}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{H}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = \hat{H}e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\cdot e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = \hat{H}$$

[حيث $\hat{H}e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{H}$ لأن أي مؤثر يتبادل مع أي قوة له $\hat{A}e^{\alpha\hat{A}} = e^{\alpha\hat{A}}\hat{A}$]

أي أن مؤثر هاملتون هو نفسه المؤثر $\hat{H}$ فـــي كـــلا التمثيلـــين (شـــرودنجر وهيزنبرج) .

ولهذا فإن الدليل H عادة ما يتم حذفه في مؤثر هاملتون في تمثيل هيزنبرج فيكتب $\hat{H}$ بدلاً من $\hat{H}_H$.

<u>مثال (٣) :</u>

(أ) إذا كان $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)$ ، وحيث $\hat{a}\hat{a}^{+}$ يحققان العلاقة التبادلية $\hat{a}^{+}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^{+} = 1$ ، فأثبت أن : $\hat{H}\hat{a} = \hat{a}\left(\hat{H} + \hbar\omega\right)$

(ب) إذا كان :

$\hat{a}(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\,\hat{a}(0)\,e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ ، أثبت أن : $\hat{a}(t) = \hat{a}(0)e^{i\omega t}$

الحــل :

(أ) حيث أن :

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)$$

$$\therefore \hat{H}\hat{a} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)\hat{a} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a}\right)$$

$$= \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^{+} - \hat{a}\hat{a}\hat{a}^{+}\right)$$

$$= \hbar\omega\left[\hat{a}\underbrace{\left(\hat{a}^{+}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^{+}\right)}_{1"} + \hat{a}\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)\right]$$

$$= \hbar\omega\left[\hat{a} + \hat{a}\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)\right]$$

$$= \hbar\omega\,\hat{a}\left[1 + \left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)\right] = \hat{a}\left[\hbar\omega + \underbrace{\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)}\right]$$

$$= \hat{a}\left[\hat{H} + \hbar\omega\right] \quad , \; \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \frac{1}{2}\right)$$ حيث :

(ب) :

$$\hat{a}(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\;\hat{a}(0)\,e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$= \left[1 + \frac{i\hat{H}t}{\hbar} + \frac{i^{2}}{2!}\frac{\hat{H}^{2}t^{2}}{\hbar^{2}} + \frac{i^{3}}{3!}\frac{\hat{H}^{3}t^{3}}{\hbar^{3}} + \ldots\right]\hat{a}(0)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$= \hat{a}(0)\left[1 + \frac{i\left(\hat{H} + \hbar\omega\right)t}{\hbar} + \frac{i^{2}}{2!}\frac{\left(\hat{H} + \hbar\omega\right)^{2}t^{2}}{\hbar^{2}} + \ldots\right]e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

حيث :

$$\hat{H}\hat{a}(0) = \hat{a}_0\left(\hat{H} + \hbar\omega\right)$$

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0)\cdot e^{\frac{i(\hat{H}+\hbar\omega)t}{\hbar}} \cdot e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = \hat{a}\,(0)e^{i\omega\hbar}$$

وهو المطلوب .

مثال (٤) : أثبت أنه إذا كانت المؤثرات $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ تحقق العلاقة التبادلية $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = i\hat{C}$ في تمثيل شرودنجر ، فإن هذه العلاقة تظل كما هي في تمثيل هيزنبرج .

الحل :

في تمثيل هيزنبرج فإن :

$$\hat{A}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \;,\; \hat{B}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{B}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$\therefore \left[\hat{A}_H,\hat{B}_H\right] = \hat{A}_H\hat{B}_H - \hat{B}_H\hat{A}_H$$

$$= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\cdot e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{B}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} - e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{B}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\cdot e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}\hat{B}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} - e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{B}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(i\hat{C}\right)e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = i\hat{C}_H$$

حيث :

$$\hat{C}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{C}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

وهو المطلوب .

مثال (٥) : باعتبار الإحداثي x كمؤثر في تمثيل شرودنجر ، استنتج المؤثر المناظر x_H في تمثيل هيزنبرج ، وذلك في حالتي :

(i) حركة الجسيم الحر .   (ii) المتذبذب التوافقي البسيط .

الحـل :

(i) **في حركة الجسيم الحر :**

تكون V = 0 ويكون الهاملتونيان :

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(1)$$

ويكون الإحداثي x في تمثيل هيزنبرج هو :

$$x_H=e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}xe^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

$$=x+\frac{it}{\hbar}\left[\hat{H},x\right]+\frac{1}{2!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2\left[\hat{H},[\hat{H},x]\ \right]+\ldots\ldots \qquad \text{\_\_\_}(2)$$

[وذلك لأن : $e^{k\hat{B}}\hat{A}e^{-k\hat{B}}=\hat{A}+k\left[\hat{B},\hat{A}\right]+\frac{k^2}{2!}\left[\hat{B}\,[\hat{B},\hat{A}]\ \right]+\ldots\ldots$]

ومن (1) :

$$\left[\hat{H},x\right]\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]\psi=\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]\psi$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi)-x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right\}$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\left\{x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+2\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right\}=\frac{-\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\therefore\ \left[\hat{H},x\right]=\frac{-\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

أيضاً فإن :

$$\left[\hat{H},\left[\hat{H},x\right]\ \right]=0 \quad ,\left[\hat{H},\left[\hat{H},\left[\hat{H},x\right]\ \right]\ \right]\ =0\ ,\ldots\ldots$$

بالتعويض في (2) :

$$x_H = x+\frac{it}{\hbar}\left(\frac{-\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)=x-\frac{it\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{\_\_\_\_}(3)$$

(ii) <u>للمتذبذب التوافقي البسيط</u> :

مؤثر هاملتون :

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$\left[\hat{H},x\right]=\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2,x\right]$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]+\frac{1}{2}m\omega^2\left[x^2,x\right]$$

ولكن :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]=2\frac{\partial}{\partial x} \qquad ,\ \left[x^2,x\right]=0$$

$$\therefore \left[\hat{H},x\right]=\frac{-\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}$$

أيضاً فإن :

$$\left[\hat{H},\left[\hat{H},x\right]\right]=\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2,\frac{-\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

$$=\frac{-\hbar^4}{2m^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},\frac{\partial}{\partial x}\right]-\frac{1}{2}\omega^2\hbar^2\left[x^2,\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

ولكن :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},\frac{\partial}{\partial x}\right]=0 \qquad , \quad \left[x^2,\frac{\partial}{\partial x}\right]=-2x$$

$$\therefore \left[\hat{H},\left[\hat{H},x\right]\right]=0-\frac{1}{2}\omega^2\hbar^2(-2x)=\hbar^2\omega^2 x$$

أيضاً فإن :

$$\left[\hat{H},\left[\hat{H}\left[\hat{H},x\right]\right]\right]=-\frac{\hbar^4\omega^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\ , \ \ldots\ldots\ldots$$

بالتعويض في (2) :

$$\therefore x_H = x+\frac{it}{\hbar}\left(\frac{-\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{1}{2!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2\left(\hbar^2\omega^2 x\right)+$$

$$+\frac{1}{3!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^3\left(\frac{-\hbar^4\omega^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)+\ldots$$

$$=x-i\hbar\left(\frac{t}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)-\frac{1}{2!}t^2\omega^2 x+\frac{i\hbar}{3!}\frac{t^3\omega^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}+\ldots\ldots$$

$$=x\left[\ 1-\frac{(t\omega)^2}{2!}+\frac{(\omega t)^4}{4!}-\ldots\ldots\ \right]-$$

$$-\frac{i\hbar}{m\omega}\left[\omega t-\frac{(\omega t)^3}{3!}+\ldots\ldots\right]\frac{\partial}{\partial x}$$

$$=x\cos\omega t-\frac{i\hbar}{m\omega}\sin\omega t\cdot\frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{——— (4)}$$

وإذا كان $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ فإن (4) ، (3) تصبحان :

$$x_H = x\cos\omega t+\frac{p}{m\omega}\sin\omega t$$ (للمتذبذب التوافقي)

$$x_H = x+\frac{\hat{p}t}{m}$$ (للحركة الحرة)

استخدام التحويل الواحدي في العلاقة بين تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج :

(مؤثر التطور – Evolution operator)

تعريف مؤثر التطور :

يعرف مؤثر التطور (أو مؤثر الإزاحة الزمنية Time displacement operator) $u(t,t_0)$ بالعلاقة : ـ

$$\psi(\bar{r},t)=u(t,t_0)\psi(\bar{r},t_0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(1)$$

وهذا يعني أن المؤثر $u(t,t_0)$ يزيح الدالة $\psi(\bar{r},t_0)$ أو ينقلها من الـزمن t_0 إلى زمن آخر t فيجعلها $\psi(\bar{r},t)$ ، ويقال أن المـؤثر $u(t,t_0)$ هـو مـؤثر الإزاحة الزمنية أو مؤثر التطور بين اللحظتين t_0,t حيث $t\geq t_0$ ويلاحـظ أن :

$$\psi(\bar{r},t_1)=u(t_1,t_0)\psi(\bar{r},t_0),\ \psi(\bar{r},t_2)$$
$$=u(t_2,t_1)\psi(\bar{r},t_1),\dots\dots\dots$$

أمثلة محلولة :

مثال (١) :

(أ) أثبت أن $\psi(\bar{r},t_0)$ هي الدالة الذاتية للمـؤثر $u(t,t_0)$ ، وأن القيمـة الذاتية المناظرة هي :

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon(t-t_0)}$$

(ب) أثبت أن المعادلة التفاضلية للمؤثر $u(t,t_0)$ هي :

$$i\hbar\frac{\partial u(t,t_0)}{\partial t}=\hat{H}u(t,t_0)$$

الحـل :

(أ) بكتابة $\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\phi(t)$ ، حيث : $\phi(t)=Ae^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}$

[الجزء المعتمد على الزمن من الدالة الموجية]

وبأخذ $Ae^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon t_0}$ فإن :

$$\phi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon(t-t_0)}$$

وبوضع : $\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r},t_0)$ فإن :

$$\psi(\vec{r},t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon(t-t_0)}\cdot\psi(\vec{r},t_0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(1)}$$

وبمقارنة هذه العلاقة بالعلاقة :

$$\psi(\vec{r},t)=u(t,t_0)\psi(\vec{r},t_0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(2)}$$

وبذلك فإن

$$u(t,t_0)\psi(\vec{r},t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon(t-t_0)}\psi(\vec{r},t_0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(3)}$$

وهذا يعني أن $\psi(\vec{r},t_0)$ هي الدالة الذاتية للمؤثر u وتناظر القيمة الذاتية $e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon(t-t_0)}$.

(ب) حيث أن ε تمثل القيمة الذاتية للمؤثر $\hat{H}$ $(\hat{H}\psi=\varepsilon\psi)$ فإنه يمكننا كتابة المؤثر $u(t,t_0)$ كالتالي :

$$u(t,t_0)=e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(4)}$$

وحيث أن $\psi(\vec{r},t)$ تحقق العلاقة : $i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$

$$\therefore\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u(t,t_0)\,\psi(\vec{r},t_0)=\hat{H}u(t,t_0)\,\psi(\vec{r},t_0)$$

وحيث أن $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t_0)$ لا تعتمد على الزمن(حيث أن t_0 هو الزمن في البداية)

$$\therefore \boxed{i\hbar \frac{\partial u(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H} u(t,t_0)}$$

وهي المعادلة التفاضلية للمؤثر $u(t,t_0)$.

مثال (٢) : أثبت الخواص الآتية لمؤثر التطور $u(t,t_0)$:

(i) $u(t_0, t_0) = \hat{I}$

(ii) $u(t,t_0) = u(t,t_1)\, u(t_1,t_0)$

(iii) إذا كان مترافق المؤثر $u(t,t_0)$ يعرف بالعلاقة :

$$u^+(t,t_0) = u(t_0,t)$$

فأثبت أن $\hat{u}^+\hat{u} = \hat{I}$ (أي أن $\hat{u}$ هو مؤثر واحدي)

وأن المعادلة التفاضلية لـ $\hat{u}^+$ هي : $-i\hbar \frac{\partial \hat{u}^+}{\partial t} = u^+\hat{H}$

الحـل :

(i)
$$u(t_0,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0 - t_0)} = e^{\hat{0}} = \hat{I}$$

(وذلك بوضع $t = t_0$ في العلاقة (4))

(ii) حيث أن :

$$\psi(\vec{r},t) = u(t,t_0)\, \psi(\vec{r},t_0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(1)}$$

أيضاً فإن :

$$\psi(\vec{r},t) = u(t,t_1)\, \psi(\vec{r},t_1)$$
$$= u(t,t_1) \cdot \left[u(t_1,t_0)\, \psi(\vec{r},t_0) \right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(2)}$$

بمقارنة (2) ، (1) نجد أن :

$$u(t,t_0) = u(t,t_1)\, u(t_1,t_0)$$

(iii) المؤثر $u^{+}(t,t_0)$ يعرف بالعلاقة : $u^{+}(t,t_0)=u(t,t_0)$

$$u^{+}(t,t_0)u(t,t_0)=u(t_0,t)u(t,t_0)=e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}(t_0-t)}\cdot e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

$$=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\cdot e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}=e^{\hat{0}}=\hat{I}$$

وهذا يعني أن $\hat{u}$ يشكل مؤثراً واحدياً ، بمعنى أن :

$u^{+}(t,t_0)=u^{-1}(t,t_0)$ ، حيث $u^{-1}(t,t_0)$ هو معكوس $u(t,t_0)$

ولإيجاد المعادلة التفاضلية لـــ $\hat{u}^{+}$:

حيث أن $i\hbar\dfrac{\partial u}{\partial t}=\hat{H}u$ فبأخذ مترافق الطرفين [من تعريف المترافق]

$$\therefore -i\hbar\frac{\partial u^{+}}{\partial t}=u^{+}\hat{H}$$

وهي المعادلة التفاضلية لـــ $\hat{u}^{+}$.

مثال (٣) : أثبت أن المعادلة التكاملية للمؤثر $u(t,t_0)$ هي :

$$u(t,t_0)=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)\,u(t_1,t_0)dt_1$$

وهي من صورة معادلة فولتيرا من النوع الثاني .

أوجد الحل العام لهذه المعادلة بطريقة التكرار (Iteration Method)

الحـــل :

من المعادلة التفاضلية للمؤثر $u(t,t_0)$

$$i\hbar\frac{\partial u(t,t_0)}{\partial t}=\hat{H}(t)\,u(t,t_0)$$

$$i\hbar\dot{u}(t,t_0)=\hat{H}(t)u(t,t_0)\quad\therefore\dot{u}(t,t_0)=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)u(t,t_0)$$

وبوضع $t = t_1$ فإن :

$$\dot{u}(t_1,t_0) = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t_1)\ u(t_1,t_0)$$

وبتكامل طرفي هذه المعادلة بالنسبة إلى t_1 من $t_1 = t_0$ إلى $t_1 = t$ فإن :

$$u(t_1,t_0)\Big|_{t_1=t_0}^{t_1=t} = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)\ u(t_1,t_0)dt_1$$

$$\therefore u(t,t_0) - u(t_0,t_0) = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)\ u(t_1,t_0)dt_1$$

وبضع $u(t_0,t_0) = 1$ فإن :

$$u(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)\,u(t_1,t_0)dt_1 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_}(1)$$

وهي المعادلة التكاملية للمؤثر $u(t,t_0)$.

<u>**ولإيجاد الحل العام لها :**</u> نعوض تحت علامة التكامل بقيمة $u(t_1,t_0)$ من المعادلة نفسها :

$$u(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t_1)\left[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t_1}H(t_2)u(t_2,t_0)dt_2\right]dt_1$$

$$= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t_1)\,dt_1 +$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}H(t_1)dt_1\int_{t_0}^{t_1}H(t_2)\,u(t_2,t_0)dt_2$$

وبالتعويض مرة ثانية عن قيمة $u(t_2,t_0)$ باستخدام المعادلة (1) نحصل على الآتي :

$$u(t,t_0)=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t_1)\,dt_1+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}H(t_1)dt_1\int_{t_0}^{t_1}H(t_2)$$

$$\left[1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t_2}H(t_3)u(t_3,t_0)dt_3\right]dt_2=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t_1)\,dt_1+$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}H(t_1)dt_1\int_{t_0}^{t_1}H(t_2)\,dt_2$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3\int_{t_0}^{t}H(t_1)dt_1\int_{t_0}^{t_1}H(t_2)\,dt_2\int_{t_0}^{t_2}H(t_3)u(t_3,t_0)dt_3$$

وباستمرار هذه العملية (تكراراها) حيث نعوض عن $u(t_3,t_0)$ تحت علامة التكامل ، وهكذا فإننا نحصل على مفكوك لا نهائي للمؤثر $u(t,t_0)$ بالصورة : ـــ

$$u(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}u_n(t,t_0) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(2)}$$

حيث :

$$u_n(t,t_0)=\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}H(t_1)\,dt_1\int_{t_0}^{t_1}H(t_2)dt_2$$

$$\int_{t_0}^{t_2}H(t_3)\,dt_3\ldots\int_{t_0}^{t_{n-1}}H(t_n)\,dt_n\ldots \qquad \text{\_\_\_\_(3)}$$

يعرف المفكوك (2) مع التكامل (3) بمفكوك دايسون (Dayson's expansion) وفيه يكتب المؤثر $u(t,t_0)$ على صورة متسلسلة تمكننا من إيجاد صيغة تقريبية له، فإذا أخذنا عدد n من الحدود فإننا نحصل على تقريب من رتبة n للمؤثر $u(t,t_0)$ (order approximation n^{th})

ويلاحظ أن التكامل في (3) مأخوذ على كل الفترة الزمنية (t_0,t) مع وجــود الشرط أن t_i تكون دائماً سابقة لـ t_{i-1} أي أن $t_i \geq t_{i-1}$ ففــي حالــة $i=1$ فإن $t_1 \geq t_0$ ، وهكذا .

<u>استخدام مؤثر التطور في العلاقة بين تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج :</u>

نلاحظ أنه عند بداية الزمن $(t=t_0)$ أو في اللحظة الإبتدائيــة فــإن الــدوال الموجية والمؤثرات تتطابق في كل من تمثيلي شرودنجر وهيزنبــرج ، بحيــث يمكننا كتابة :

$$\psi_H = \psi_S(t_0), \quad \hat{A}_S = \hat{A}_H(t_0)$$

وإذا كان $u(t=t_0)$ هو مؤثر التطور بين اللحظتين $t=t_0$ ، فإنه يمكنــا كتابة :

$$\psi_S(t) = u(t,t_0)\psi_S(t_0)$$

بالتالي فإن :

$$\boxed{\psi_S(t) = u(t,t_0)\psi_H}$$

وهي علاقة الانتقال للدالة الموجية من تمثيل شرودنجر إلى تمثيــل هيزنبــرج باستخدام مؤثر التطور .

أيضاً : بالضرب في المترافق $u^+(t=t_0)$ فإن :

$$u^+(t=t_0)\psi_S(t) = u^+(t,t_0)\,u(t,t_0)\psi_H$$

ولكن : $u^+u=I$

$$\therefore \boxed{\psi_H = u^+(t,t_0)\psi_S(t)}$$

وهي علاقة الانتقال للدالة الموجية من تمثيل هيزنبرج إلى تمثيــل شــرودنجر باستخدام مؤثر التطور .

وبالنسبة للمؤثرات :

إذا كان $\hat{A}_S , \hat{A}_H$ هما المؤثران في كل من تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج

$$\therefore \hat{A}_H = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_S e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = \hat{u}^+(t)\hat{A}_S \hat{u}(t)$$

وذلك حيث أن : $\hat{u}(t,t_0) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}(t-t_0)}$

فعندما $t_0 = 0$ فإن : $\hat{u}(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ ويكون $\hat{u}^+(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}}$

ويعرف التحويل $\hat{A}_H = \hat{u}^+(t)\hat{A}_S \hat{u}(t)$ بالتحويل الواحدي للمؤثر $\hat{A}_S$

وبالعكس فإن التحويل الواحدي للمؤثر $\hat{A}_H$ هو :

$$\therefore \hat{A}_S = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_H e^{\frac{iHt}{\hbar}} = \hat{u}(t)\hat{A}_H \hat{u}^+(t)$$

البرهان :

بضرب العلاقة $\hat{A}_H = \hat{u}^+\hat{A}_S \hat{u}$ من اليسار في $\hat{u}$ ومن اليمين في $\hat{u}^+$:

$$\therefore \hat{u}\,\hat{A}_H \hat{u}^+ = \hat{u}\,\hat{u}^+\hat{A}_S \hat{u}\hat{u}^+ = \hat{A}_S$$

حيث $\hat{u}\hat{u}^+ = I$

وبذلك يمكننا كتابة التحويل الواحدي للمؤثرين $\hat{A}_S , \hat{A}_H$ في تمثيل شرودنجر وهيزنبرج بالصورة :

$$\boxed{\hat{A}_H = \hat{u}^+\hat{A}_S \hat{u}} \ ، \ \boxed{\hat{A}_S = \hat{u}\,\hat{A}_H \hat{u}^+}$$

وهي المعادلات التي تعطينا الإنتقال بين المؤثرات في كلا التمثيلين .

ملخص :

باستخدام مؤثر التطور فإن العلاقة بين الدوال والمؤثرات في تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج هي :

$$\text{(i)} \quad \psi_S(t) = u(t,t_0)\psi_H \quad ، \quad \psi_H = u^+(t,t_0)\psi_S(t)$$

$$\text{(ii)} \quad \hat{A}_S = \hat{u}(t)\hat{A}_H \hat{u}^+(t) \quad ، \quad \hat{A}_H = \hat{u}^+(t)\hat{A}_S \hat{u}(t)$$

مثال :

باستخدام التحويل الواحدي $\hat{A}_H = \hat{u}^+(t)\hat{A}_S\,\hat{u}(t)$ في تمثيل هيزنبرج ، كيف تحصل على معادلة الحركة (أو معادلة التطور الزمني للمؤثر) في هذا التمثيل بالصورة :

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}\right) + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H, \hat{H}\right]$$

حيث :

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = \left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_H$$

الحل :

حيث أن $\hat{A}_H = \hat{u}^+\hat{A}_S\,\hat{u}$ فبالضرب في $i\hbar$ والإشتقاق بالنسبة للزمن نحصل على :

$$i\hbar\frac{d\hat{A}_H}{dt} = i\hbar\, u^+\left[\hat{A}_S\frac{d\hat{u}}{dt} + \frac{d\hat{A}_S}{dt}\hat{u}\right] + i\hbar\frac{d\hat{u}^+}{dt}\hat{A}_S\,\hat{u}$$

ولكن :

$$i\hbar\frac{d\hat{u}}{dt} = \hat{H}_S\hat{u} \quad , \quad -i\hbar\frac{d\hat{u}^+}{dt} = \hat{u}^+\hat{H}_S$$

$$\therefore\ i\hbar\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \hat{u}^+\,\hat{A}_S\hat{H}_S\,\hat{u} + i\hbar\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_H - \hat{u}^+\hat{H}_S\hat{A}_S\,\hat{u}$$

حيث :

$$\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_H = \hat{u}^+\frac{d\hat{A}_S}{dt}\hat{u}$$

ولما كان $\hat{u}\hat{u}^+ = \hat{I}$

$$\therefore\ i\hbar\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \underbrace{\hat{u}^+\,\hat{A}_S}\underbrace{\hat{u}\hat{u}^+}\underbrace{\hat{H}_S\,\hat{u}} + i\hbar\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_H - \underbrace{\hat{u}^+\hat{H}_S}\underbrace{\hat{u}\hat{u}^+}\underbrace{\hat{A}_S\,\hat{u}}$$

$$= \hat{A}_H\hat{H}_H + i\hbar\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} - \hat{H}_H\hat{A}_H$$

$$= i\hbar\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \left(\hat{A}_H\hat{H}_H - \hat{H}_H\hat{A}_H\right)$$

$$= i\hbar\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \left[\hat{A}_H, \hat{H}\right] \qquad \Big|\ \hat{H}_H = \hat{H}$$

وبالقسمة على $i\hbar$:

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H, \hat{H}\right]$$

وهو المطلوب .

[3] تمثيل تبادل الفعل (Interaction representation) :

هو تمثيل وسطي بين التمثيلين السابقين (شرودنجر وهيزنبرج) ، وفي هذا التمثيل فإن مؤثر هاملتون لنظام يتكون من عدد من الجسيمات تتبادل الفعل (أو تتفاعل) مع بعضها بأخذ الصورة $\hat{H}_I = \hat{H}_0 + H'_I$

حيث $\hat{H}_0$ هو الجزء الذي لا يعتمد على الزمن من مؤثر هاملتون ، H'_I هو الجزء المعتمد على الزمن ويعبر عن تبادل الفعل بين الجسيمات ، ويعرف بالإضطراب (Perturbation) .

في تمثيل تبادل الفعل : فإن الدالة الموجية (أو دالة الحالة) هي ψ_I وترتبط بالدالة الموجية في تمثيل شرودنجر $\psi_S(t)$ بالعلاقة :

$$\psi_I = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}\psi_S(t) \qquad \_\_\_\_\_\_ (1)$$

كما أن المؤثر في هذا التمثيل $\hat{A}_I$ يرتبط بالمؤثر في تمثيل شرودنجر $\hat{A}_S$ بالعلاقة :

$$\hat{A}_I = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}\hat{A}_S e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \qquad \_\_\_\_\_\_ (2)$$

كذلك فإن الهاملتونيان المضطرب في تمثيل تبادل الفعل $\left(H_I'\right)$ يرتبط بالهاملتونيان المضطرب في تمثيل شرودنجر $\left(H_S'\right)$ بالعلاقة :

$$\hat{H}_I' = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{H}_S' e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_}(3)$$

أمثلة محلولة :

مثال (١) :

أثبت أنه في تمثيل تبادل الفعل فإن الدالة الموجية ψ_I تخضع للمعادلة

$$i\hbar \frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \hat{H}_I' \psi_I$$

(معادلة التطور الزمني للدالة ψ_I) ، وبينما يخضع المؤثر $\hat{A}_I$ للمعادلة

$$\frac{d\hat{A}_I}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_I, \hat{H}_0\right]$$

(معادلة الحركة أو التطور الزمني للمؤثر $\hat{A}_I$) .

الحـل :

حيث أن

$$\psi_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \psi_S(t)$$

فبالتفاضل :

$$\frac{d\psi_I}{dt} = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \cdot \frac{d\psi_S(t)}{dt} + \frac{iH_0}{\hbar} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \psi_S(t)$$

وبالضرب في $i\hbar$:

$$i\hbar \frac{d\psi_I}{dt} = i\hbar\, e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \frac{d\psi_S(t)}{dt} - H_0\, e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \psi_S(t) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(1)$$

ولكن من معادلة شرودنجر :

$$i\hbar\frac{d\psi_S(t)}{dt}=\hat{H}_S\,\psi_S(t)=\left(\hat{H}_0+H'_S\right)\psi_S(t)$$

حيث مؤثر هاملتون للنظام في تمثيل شرودنجر هو : $\hat{H}_S=\hat{H}_0+H'_S$

بالتعويض في (1) :

$$\therefore\ i\hbar\frac{d\psi_I}{dt}=e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(H_0+H'_S\right)\psi_S(t)-H_0\,e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\psi_S(t)$$

$$=e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\hat{H}'_S\psi_S(t)$$

ولكن : $\psi_S(t)=e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}\psi_I$

$$\therefore\ i\hbar\frac{d\psi_I}{dt}=e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\hat{H}'_S\,e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}\psi_I=\hat{H}'_I\psi_I$$

حيث $\hat{H}'_I=e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\hat{H}'_S\,e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}$

وبذلك فإن معادلة التطور الزمني للدالة ψ_I :

$$\boxed{i\hbar\frac{d\psi_I}{dt}\hat{H}'_I\,\psi_I}$$

<u>ولإيجاد معادلة التطور الزمني للمؤثر</u> $\hat{A}_I$:

حيث أن : $\hat{A}_I=e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\hat{A}_S\,e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$

$$\therefore\ \frac{d\hat{A}_I}{dt}=e^{\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}}\left[\hat{A}_S\,e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(\frac{-i\hat{H}_0}{\hbar}\right)+\frac{d\hat{A}_S}{dt}e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\right]+$$

$$+e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(\frac{iH_0}{\hbar}\right)\hat{A}_S\,e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar}e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(H_0\hat{A}_S - \hat{A}_S H_0\right)e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$$

$$= \left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_I + \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_0\hat{A}_S - \hat{A}_S\hat{H}_0\right)_I$$

حيث أنه في تمثيل تبادل الفعل فإن :

$$\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_I = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$$

وبكتابة : $\left(\frac{d\hat{A}_S}{dt}\right)_I = \frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t}$ ، $\left(\hat{H}_0\hat{A}_S - \hat{A}_S\hat{H}_0\right)_I = \hat{H}_0\hat{A}_I - \hat{A}_I\hat{H}_0$

$$\therefore \frac{d\hat{A}_I}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_0\hat{A}_I - \hat{A}_I\hat{H}_0\right)$$

$$= \frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}\left(\hat{A}_I\hat{H}_0 - \hat{H}_0\hat{A}_I\right)$$

$$= \frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}\left[\hat{A}_I, \hat{H}_0\right] = \frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_I, \hat{H}_0\right]$$

وهي معادلة التطور الزمني للمؤثر $\hat{A}_I$ في تمثيل تبادل الفعل .

<u>مثال (٢) :</u>

باستخدام المؤثر الواحدي $\hat{u}_0(t)$ المعرف بالعلاقة $\hat{u}_0(t) = e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$ حيث $\hat{H}_0$ هي الجزء اللامضطرب (Unperturbed part) من مؤثر هاملتون

(i) أوجد معادلتي التطور (التغير الزمني) لكل من الدالة الموجية والمؤثرات في تمثيل تبادل الفعل .

(ii) بين كيف تكامل المعادلة التفاضلية الخاصة بالدالة الموجية ، وأوجد حلاً مناسباً للمعادلة التكاملية الناتجة .

الحـل :

(i) إذا كان ψ_I , ψ_S هما الدالة الموجية في تمثيلي تبادل الفعل وشرودنجر

$$\therefore \psi_S = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \psi_I = \hat{u}_0(t)\psi_I \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(1)}$$

أيضاً فإن :

$$\hat{A}_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{A}_S e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} = \hat{u}_0^+(t)\hat{A}_S\hat{u}_0(t) \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(2)}$$

أيضاً :

$$\hat{A}_S = \hat{u}_0(t)\hat{A}_I\hat{u}_0^+(t)$$

وكذلك فإن مؤثر الإضطراب (perturbation operator) في تمثيل تبادل الفعل $\hat{H}'_I$ فإنه يرتبط بالمؤثر المناظر في تمثيل شرودنجر $\hat{H}'_S$ بالعلاقة :

$$\hat{H}'_I = \hat{u}_0^+(t)\ \hat{H}'_S\hat{u}_0(t)$$

حيث مؤثر هاملتون هو : في تمثيل شرودنجر : $\hat{H}_S = \hat{H}_0 + \hat{H}'_S$

وفي تمثيل تبادل الفعل : $\hat{H}_I = \hat{H}_0 + \hat{H}'_I$

والآن : **<u>لإيجاد معادلة التطور للدالة الموجية</u>** :

من معادلة شرودنجر :

$$i\hbar\frac{d\psi_S}{dt} = H_S\psi_S = (H_0 + H'_S)\psi_S$$

$$\therefore i\hbar\frac{d(u_0\psi_I)}{dt} = [H_0 + H'_S](u_0\psi_I)$$

$$\therefore i\hbar u_0\frac{d\psi_I}{dt} + i\hbar\frac{du_0}{dt}\psi_I = H_0 u_0\psi_I + H'_S u_0\psi_I \qquad \text{\_\_\_\_(3)}$$

وحيث أن : $i\hbar\frac{du_0}{dt} = H_0 u_0$ [المعادلة التفاضلية للمؤثر u_0] وأن :

$$H'_I = u_0^+\ H'_S u_0$$

فضرب (3) في $\hat{u}_0^+$ من اليسار :

$$\therefore i\hbar u_0^+ u_0 \frac{d\psi_I}{dt} + u_0^+ H_0 u_0 \psi_I$$

$$= u_0^+ H_0 u_0 \psi_I + u_0^+ H_S' u_0 \psi_I$$

$$\therefore i\hbar \frac{d\psi_I}{dt} = H_I' \psi_I \qquad \text{(4)}$$

ولإيجاد معادلة التطور للمؤثرات :

من (2) :

$$\hat{A}_I = \hat{u}_0^+ \hat{A}_S \hat{u}_0$$

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_I}{dt} = i\hbar \left\{ u_0^+ \left(\hat{A}_S \frac{du_0}{dt} + \frac{dA_S}{dt} u_0 \right) + \frac{du_0^+}{dt} A_S u_0 \right\}$$

$$= i\hbar u_0^+ \hat{A}_S \frac{du_0}{dt} + i\hbar u_0^+ \frac{dA_S}{dt} u_0 + i\hbar \frac{du_0^+}{dt} A_S u_0$$

ولكن :

$$-i\hbar \frac{du_0^+}{dt} = u_0^+ \hat{H}_0 \quad , \quad i\hbar \frac{du_0}{dt} = \hat{H}_0 \hat{u}_0$$

وأيضاً :

$$u_0 u_0^+ = 1 \quad , \quad u_0^+ \frac{dA_S}{dt} u_0 = \left(\frac{dA_S}{dt} \right)_I$$

$$\therefore i\hbar \frac{d\hat{A}_I}{dt} = u_0^+ \hat{A}_S H_0 u_0 + i\hbar \left(\frac{dA_S}{dt} \right)_I - u_0^+ \hat{H}_0 \hat{A}_S \hat{u}_0$$

$$= u_0^+ A_S \underbrace{u_0 u_0^+} H_0 u_0 + i\hbar \left(\frac{dA_S}{dt} \right)_I - u_0^+ H_0 \underbrace{u_0 u_0^+} A_S u_0$$

$$= i\hbar\left(\frac{dA_S}{dt}\right)_I + (\hat{A}_I)(\hat{H}_0) - (\hat{H}_0)(\hat{A}_I)$$

$$= i\hbar\left(\frac{dA_S}{dt}\right)_I + [\hat{A}_I, \hat{H}_0] \qquad \left| \begin{array}{l} \hat{A}_I = \hat{u}_0^+ A_S \hat{u}_0 \\ \hat{H}_0 = \hat{u}_0^+ H_0 \hat{u}_0 \end{array} \right.$$

بالقسمة على $i\hbar$:

$$\therefore \frac{d\hat{A}_I}{dt} = \left(\frac{dA_S}{dt}\right)_I + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_I, \hat{H}_0]$$

$$\therefore \frac{d\hat{A}_I}{dt} = \left(\frac{\partial A_I}{\partial t}\right) + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_I, \hat{H}_0] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (5)}$$

وهي معادلة التطور للمؤثرات .

(ii) **<u>لتكامل المعادلة التفاضلية (4)</u>** :

$$i\hbar \frac{d\psi_I}{dt} = H'_I \psi_I \qquad \therefore \frac{d\psi_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} H'_I \psi_I$$

نجرى عملية التكامل بالنسبة للزمن t_1 من $t_1 = 0$ إلى $t_1 = t$

$$\therefore \psi_I(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_I(t_1)\psi_I(t_1)dt_1 + \psi_I(0)$$

$$\therefore \psi_I(t) = \psi_I(0) + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_I(t_1)\psi_I(t_1)dt_1 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_ (6)}$$

وهي المعادلة التكاملية للدالة $\psi_I(t)$.

وبوضع : $\psi_I(t) = u_0^+ \psi_S(t)$ حيث $\psi_S(t)$ هي الدالة في تمثيل شرودنجر ، $u_0^+ = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}$

وكذلك باستخدام : $H'_I = u_0^+ H'_S u_0$ ، واعتبار أن $\psi_I(0) = \psi_S(0)$

[الدوال الموجية تتساوى في بداية الزمن في كل التمثيلات]

$$\therefore u_0^+(t)\,\psi_s(t)$$

$$=\psi_s(0)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t u_0^+(t_1)H_s'(t_1)\underbrace{u_0(t_1)\cdot u_0^+}(t_1)\psi_s(t_1)dt_1$$

وبضرب طرفي هذه المعادلة من اليسار في $u_0(t)$ ، حيث : $u_0=e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}$

واستخدام العلاقة $u_0\,u^+=1$

$$\therefore \psi_s(t)=u_0(t)\,\psi_s(0)+$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t u_0(t)u_0^+(t_1)H_s'(t_1)\,\psi_s(t_1)dt_1$$

$$=u_0(t)\,\psi_s(0)+$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H_s'(t_1)\,\psi_s(t_1)\,dt_1 \qquad (7)$$

حيث :

$$u_0(t,t_1)=u_0(t)u_0^+(t_1)=e^{-\frac{iH_0}{\hbar}(t-t_1)}$$

المعادلة (7) هي معادلة تكاملية من صورة معادلة فولتيرا من النوع الثاني

(Volterra Integral Equation of second kind)

حيث تظهر فيها الدالة $\psi_s(t)$ في الطرفين وتحت علامة التكامل في الطرف الأيمن .

ولإيجاد الحل العام لهذه المعادلة :

نستخدم طريقة التكرار (Iteration Method) كالآتي :

بالتعويض عن $\psi_S(t_1)$ تحت علامة التكامل بالقيمة المعطاه من نفس المعادلة نحصل على :

$$\psi_S(t)=u_0(t)\,\psi_S(0)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_S(t_1)dt_1\Big[u_0(t_1)\psi_S(t_0)+$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\int_0^{t_1} u_0(t_1,t_2)\,H'_S(t_2)\psi_S(t_2)dt_2\Big]$$

$$=\left[u_0(t)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_S(t_1)u_0(t_1)dt_1\right]\psi_S(0)+$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_S(t_1)dt_1\int_0^{t_1} u_0(t_1,t_2)\,H'_S(t_2)\psi_S(t_2)dt_2$$

وبوضع :

$$\frac{1}{i\hbar}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_S(t_1)u_0(t_1)dt_1=u^{(1)}(t)$$

$$\therefore\ \psi_S(t)=\left[u_0(t)+u^{(1)}(t)\right]\psi_S(0)+$$

$$+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_S(t_1)\,dt_1\ *$$

$$*\int_0^{t_1} u_0(t_1,t_2)\,H'_S(t_2)\,\psi_S(t_2)dt_2$$

وبالتعويض من جديد عن $\psi_S(t_2)$ تحت علامة التكامل بقيمتها المعطاه من نفس المعادلة نحصل على الآتي :

$$\psi_s(t)=\left[u_0(t)+u^{(1)}(t)\right]\psi_s(0)+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_s(t_1)\,dt_1\,*$$

$$*\int_0^{t_1} u_0(t_1,t_2)\,H'_s(t_2)\,\psi_s(t_2)dt_2\,*$$

$$*\left[u_0(t_2)\psi_s(0)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^{t_2} u_0(t_2,t_3)\,H'_s(t_3)\,\psi_s(t_3)dt_3\right]$$

وبوضع :

$$\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_s(t_1)\,dt_1\int_0^{t_1} u_0(t_1,t_2)\,H'_s(t_2)\,u_0(t_2)dt_2$$

$$=u^{(2)}(t)$$

$$\therefore \psi_s(t)=\left[u_0(t_0)+u^{(1)}(t)+u^{(2)}(t)\right]\ \psi_s(0)+$$

$$+\frac{1}{(i\hbar)^3}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_s(t_1)\,dt_1\,*$$

$$*\int_0^{t_1} u_0(t_1,t_2)\,H'_s(t_2)\ dt_2\int_0^{t_2} u_0(t_2,t_3)\,H'_s(t_3)\,\psi_s(t_3)dt_3$$

وهكذا يمكننا تكرار هذه العملية بالتعويض عن $\psi_s(t_3)$ تحت التكامل ، ووضع :

$$u^{(r)}(t)=\frac{1}{(i\hbar)^r}\int_0^t u_0(t,t_1)\,H'_s(t_1)\ dt_1\int_0^{t_1}\ldots dt_2\ldots$$

$$\int_0^{t_{r-1}} u_0(t_{r-1},t_r)\,H'_s(t_r)\,u_0(t_r)dt_r$$

فإنه بوجه علم يمكننا كتابة :

$$\therefore \psi_s(t)=\left[u_0(t)+\sum_{r=1}^{\infty}u^{(r)}(t)\right]\psi_s(0)=u(t)\psi_s(0)$$

حيث :

$$u(t)=u_0(t)+\sum_{r=1}^{\infty}u^{(r)}(t)$$

$$\therefore \psi_s^{(r)}(t)=u_0(t)\psi_s(0)+\sum_{r=1}^{\infty}u^{(r)}(t)\psi_s(0)$$

وهي الصورة العامة للدالة الموجية $\psi_s(t)$ كمجموع عدد لا نهائي من الحدود .

وإذا أخذنا الحد الأول فقط فإننا نحصل على ما يسمى بالتقريب الصفري

(zero approximation)

$$\psi_s^{(0)}(t)=u_0(t)\,\psi_s(0)$$

وإذا أخذنا $r=1$: نحصل على ما يسمى بالتقريب الأول

(first approximation)

$$\psi_s^{(1)}(t)=u_0(t)\,\psi_s(0)+u^{(1)}(t)\,\psi_s(0)$$

وإذا أخذنا $r=2$: نحصل على ما يسمى بالتقريب الثاني

(second approximation)

$$\psi_s^{(2)}(t)=u_0(t)\,\psi_s(0)+u^{(1)}(t)\,\psi_s(0)+u^{(2)}(t)\,\psi_s(0)$$

وهكذا ....