

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 (schrodinger representation) .
- (2) تمثيل هيزنبرج (Heisenberg representation) .
- (3) تمثيل تبادل التفاعل ( Interaction representation ) .

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (1)$$

( 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

$$\psi(t) = \psi(0) e^{-\frac{iH}{\hbar}t} \quad \text{المعادلة (1) يعطي :}$$

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 :

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

( 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 :

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

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

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

أمثلة محلولة :

مثال (1) : 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 :

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

الحل : حيث أن :

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

فبالفاضل نجد أن :

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

حيث أنه في تمثيل هيزنبرج :

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

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

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

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

$$\therefore \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = 0 \quad \text{وإذا لم يكن هناك إعتداد صريح على الزمن فإن}$$

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

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

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

الحل :

حيث أن العلاقة بين أي مؤثر في تمثيل هيزنبرج  $(\hat{A}_H)$  والمؤثر في تمثيل شرودنجر  $(\hat{A})$  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  $\hat{H}$  في كلا التمثيلين ( شرودنجر وهيزنبرج ) .

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

مثال (٣) :

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

$$\hat{H}\hat{a} = \hat{a}(\hat{H} + \hbar\omega) : \text{ فاثبت أن } , \hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+ = 1 \text{ التبادلية}$$

(ب) إذا كان :

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

الحل :

(أ) حيث أن :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \\ \therefore \hat{H}\hat{a} &= \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \hat{a} = \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a} \right) \\ &= \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ \right) \\ &= \hbar\omega \left[ \hat{a} \underbrace{(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+)}_{1} + \hat{a} \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= \hbar\omega \left[ \hat{a} + \hat{a} \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= \hbar\omega \hat{a} \left[ 1 + \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \right] = \hat{a} \left[ \hbar\omega + \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= \hat{a} [\hat{H} + \hbar\omega] , \hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

حيث :

(ب)

$$\begin{aligned} \hat{a}(t) &= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{a}(0) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \\ &= \left[ 1 + \frac{i\hat{H}t}{\hbar} + \frac{i^2 \hat{H}^2 t^2}{2! \hbar^2} + \frac{i^3 \hat{H}^3 t^3}{3! \hbar^3} + \dots \right] \hat{a}(0) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \\ &= \hat{a}(0) \left[ 1 + \frac{i(\hat{H} + \hbar\omega)t}{\hbar} + \frac{i^2 (\hat{H} + \hbar\omega)^2 t^2}{2! \hbar^2} + \dots \right] e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \end{aligned}$$

حيث :

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

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

وهو المطلوب .

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

**الحل :**

في تمثيل هيزنبرج فإن :

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

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

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

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

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

حيث :

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

وهو المطلوب .

مثال (5) : باعتبار الإحداثي  $x$  كمؤثر في تمثيل شرودنجر ، استنتج المؤثر

المناظر  $x_H$  في تمثيل هيزنبرج ، وذلك في حالتني :

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

الحل :

(i) في حركة الجسم الحر :

تكون  $V = 0$  ويكون الهاملتونيان :

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

ويكون الإحداثي  $x$  في تمثيل هيزنبرج هو :

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

$$= x + \frac{it}{\hbar} [\hat{H}, x] + \frac{1}{2!} \left( \frac{it}{\hbar} \right)^2 [\hat{H}, [\hat{H}, x]] + \dots \quad (2)$$

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

ومن (1) :

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

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

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

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

أيضاً فإن :

$$[\hat{H}, [\hat{H}, x]] = 0, \quad [ \hat{H}, [ \hat{H}, [ \hat{H}, x ] ] ] = 0, \dots$$

بالتعويض في (2) :

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

(ii) للمتذبذب التوافقي البسيط :

مؤثر هاملتون :

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

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

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

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

ولكن :

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

أيضاً فإن :

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

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

ولكن :

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

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

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

أيضاً فإن :

بالتعويض في (2) :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## الباب الأول

نظرية التمثيل في ميكانيكا الكم

استخدام التحويل الواحد في العلاقة بين تمثيلي شروينجر وهيزنبرج :

### ( مؤثر التطور - Evolution operator )

تعريف مؤثر التطور :

يعرف مؤثر التطور ( أو مؤثر الإزاحة الزمنية Time displacement operator

بـ  $U(t, t_0)$  بالعلاقة : -

$$\psi(\vec{r}, t) = U(t, t_0) \psi(\vec{r}, t_0) \quad (1)$$

وهذا يعني أن المؤثر  $U(t, t_0)$  يزيح الدالة  $\psi(\vec{r}, t_0)$  أو ينقلها من الزمن  $t_0$  إلى زمن آخر  $t$  فيجعلها  $\psi(\vec{r}, t)$  ، ويقال أن المؤثر  $U(t, t_0)$  هو مؤثر الإزاحة الزمنية أو مؤثر التطور بين اللحظتين  $t_0, t$  حيث  $t \geq t_0$  ويلاحظ أن :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t_1) &= U(t_1, t_0) \psi(\vec{r}, t_0), \psi(\vec{r}, t_2) \\ &= U(t_2, t_1) \psi(\vec{r}, t_1), \dots \end{aligned}$$

### أمثلة محلولة :

مثال (1) :

(أ) أثبت أن  $\psi(\vec{r}, t_0)$  هي الدالة الذاتية للمؤثر  $U(t, t_0)$  ، وأن القيمة

الذاتية المناظرة هي :

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

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

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

الحل :

(أ) بكتابة  $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\phi(t)$  ، حيث  $\phi(t) = Ae^{\frac{i\epsilon t}{\hbar}}$  :  
 [ الجزء المعتمد على الزمن من الدالة الموجية ]

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

$\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon(t-t_0)}$   
 وبوضع  $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t_0)$  فإن :

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

وبمقارنة هذه العلاقة بالعلاقة :

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

وبذلك فإن

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

وهذا يعني أن  $\psi(\vec{r}, t_0)$  هي الدالة الذاتية للمؤثر  $u$  وتناظر القيمة الذاتية

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

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

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

وحيث أن  $\psi(\vec{r}, t)$  تحقق العلاقة :

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

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

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

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

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

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

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

(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)

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

الحل :

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

وذلك بوضع  $t = t_0$  في العلاقة (4)

(ii) حيث أن :

$$\psi(\vec{x}, t) = u(t, t_0) \psi(\vec{x}, t_0) \quad (1)$$

أيضاً فإن :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= u(t, t_1) \psi(\vec{x}, t_1) \\ &= u(t, t_1) \cdot [u(t_1, t_0) \psi(\vec{x}, t_0)] \quad (2) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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)

**الحل :**

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 :

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

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

ولإيجاد الحل العام لها : 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 :

$$\begin{aligned}
 u(t, t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 + \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} H(t_2) \\
 &\left[ 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t_2} H(t_3) u(t_3, t_0) dt_3 \right] dt_2 = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 + \\
 &+ \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} H(t_2) dt_2 \\
 &+ \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} H(t_2) dt_2 \int_{t_0}^{t_2} H(t_3) u(t_3, t_0) dt_3
 \end{aligned}$$

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

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

حيث :

$$\begin{aligned}
 u_n(t, t_0) &= \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} H(t_2) dt_2 \\
 &\int_{t_0}^{t_2} H(t_3) dt_3 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_n) dt_n \dots \quad (3)
 \end{aligned}$$

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

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

استخدام مؤثر التطور في العلاقة بين تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج :

نلاحظ أنه عند بداية الزمن  $(t=t_0)$  أو في اللحظة الابتدائية فإن الدوال الموجية والمؤثرات تتطابق في كل من تمثيلي شرودنجر وهيزنبرج ، بحيث 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 يمكننا كتابة :

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

بالتالي فإن :

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

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

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

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

ولكن :  $u^+u = I$

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

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

وبالنسبة للمؤثرات :

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

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

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

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  $\hat{u}^+$  :

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

$$\text{حيث } \hat{u} \hat{u}^+ = I$$

وبذلك يمكننا كتابة التحويل الواحدي للمؤثرين  $\hat{A}_S, \hat{A}_H$  في تمثيل شروندجر

وهيزنبرج بالصورة :

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

وهي المعادلات التي تعطينا الانتقال بين المؤثرات في كلا التمثيلين .

ملخص :

باستخدام مؤثر التطور فإن العلاقة بين الدوال والمؤثرات في تمثيلي

شروندجر وهيزنبرج هي :

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

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

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 :

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

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

حيث :

الحل :

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

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

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

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

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

حيث :

ولما كان  $\hat{u}\hat{u}^+ = \hat{I}$

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

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

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

$$= i\hbar \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + [\hat{A}_H, \hat{H}] \quad | \hat{H}_H = \hat{H}$$

وبالقسمة على  $i\hbar$  :

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

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

$$(\text{أو تتفاعل}) \text{ مع بعضها بأخذ الصورة } \hat{H}_I = \hat{H}_0 + H'_I$$

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  $\psi_I$  وترتبط بالدالة الموجية في تمثيل شرودنجر  $\psi_S(t)$  بالعلاقة :

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

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

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

كذلك فإن الهاملتونيان المضطرب في تمثيل تبادل الفعل ( $H'_I$ ) يرتبط بالهاملتونيان المضطرب في تمثيل شرودنجر ( $H'_S$ ) بالعلاقة :

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

أمثلة محلولة :

مثال (1) :

أثبت أنه في تمثيل تبادل الفعل فإن الدالة الموجية  $\psi_I$  تخضع للمعادلة

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

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

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

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

الحل :

حيث أن

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

فبالتفاضل :

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

وبالتضرب في  $i\hbar$  :

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

ولكن من معادلة شرودنجر :

$$i\hbar \frac{d\psi_s(t)}{dt} = \hat{H}_s \psi_s(t) = (\hat{H}_0 + H'_s) \psi_s(t)$$

حيث مؤثر هاميلتون للنظام في تمثيل شرودنجر هو :  $\hat{H}_s = \hat{H}_0 + H'_s$  بالتعويض في (1) :

$$\therefore i\hbar \frac{d\psi_I}{dt} = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} (H_0 + H'_s) \psi_s(t) - H_0 e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \psi_s(t)$$

$$= e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{H}'_s \psi_s(t)$$

$$\psi_s(t) = e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \psi_I \quad \text{ولكن :}$$

$$\therefore i\hbar \frac{d\psi_I}{dt} = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{H}'_s e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \psi_I = \hat{H}'_I \psi_I$$

$$\hat{H}'_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{H}'_s e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \quad \text{حيث}$$

وبذلك فإن معادلة التطور الزمني للدالة  $\psi_I$  :

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

ولإيجاد معادلة التطور الزمني للمؤثر  $\hat{A}_I$  :

$$\hat{A}_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{A}_s e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \quad \text{حيث أن :}$$

$$\therefore \frac{d\hat{A}_I}{dt} = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \left[ \hat{A}_s e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \left( \frac{-i\hat{H}_0}{\hbar} \right) + \frac{d\hat{A}_s}{dt} e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \right] +$$

$$+ e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \left( \frac{iH_0}{\hbar} \right) \hat{A}_s e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \left( \frac{d\hat{A}_S}{dt} \right) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} (H_0 \hat{A}_S - \hat{A}_S H_0) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$$

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

حيث أنه في تمثيل تبادل الفعل فإن :

$$\left( \frac{d\hat{A}_S}{dt} \right)_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \left( \frac{d\hat{A}_S}{dt} \right) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$$

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

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

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

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

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

مثال (٢) :

باستخدام المؤثر الواحدي  $\hat{u}_0(t)$  المعرف بالعلاقة  $\hat{u}_0(t) = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$

حيث  $\hat{H}_0$  هي الجزء اللامضطرب (Unperturbed part) من مؤثر هاملتون

(i) أوجد معادلتى 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 .

الحل :

(i) إذا كان  $\psi_I, \psi_S$  هما الدالة الموجية في تمثيلي تبادل الفعل

وشروندجر

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

أيضاً فإن :

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

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

وكذلك فإن مؤثر الإضطراب (perturbation operator) في تمثيل تبادل

الفعل  $\hat{H}'_I$  فإنه يرتبط بالمؤثر المناظر في تمثيل شروندجر  $\hat{H}'_S$  بالعلاقة :

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

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

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

والآن : لإيجاد معادلة التطور للدالة الموجية :

من معادلة شروندجر :

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

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

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

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 :

$$\begin{aligned} \therefore i\hbar u_0^+ u_0 \frac{d\psi_I}{dt} + u_0^+ H_0 u_0 \psi_I \\ = u_0^+ H_0 u_0 \psi_I + u_0^+ H'_S u_0 \psi_I \end{aligned}$$

$$\therefore i\hbar \frac{d\psi_I}{dt} = H'_S \psi_I \quad (4)$$

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 :

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

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

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

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

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

بالقسمة على  $i\hbar$  :

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

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

وهي معادلة التطور للمؤثرات .

(ii) لتكامل المعادلة التفاضلية (4) :

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

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

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

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

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

وبوضع :  $\psi_I(t) = u_0^+ \psi_S(t)$  حيث  $\psi_S(t)$  هي الدالة في تمثيل

$$u_0^+ = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \text{ ، شروندجر ،}$$

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 ]

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

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

$u_0 = e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}$  : وبضرب طرفي هذه المعادلة من اليسار في  $u_0(t)$  ، حيث ،  
 واستخدام العلاقة  $u_0 u^+ = 1$

$$\begin{aligned} \therefore \psi_s(t) &= u_0(t) \psi_s(0) + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t u_0(t) u_0^+(t_1) H'_s(t_1) \psi_s(t_1) dt_1 \\ &= u_0(t) \psi_s(0) + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t u_0(t, t_1) H'_s(t_1) \psi_s(t_1) dt_1 \quad \text{--- (7)} \end{aligned}$$

حيث :

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

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 :

$$\begin{aligned} \psi_s(t) &= u_0(t) \psi_s(0) + \frac{1}{i\hbar_0} \int_0^t u_0(t, t_1) H'_s(t_1) dt_1 \left[ u_0(t_1) \psi_s(t_0) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{i\hbar_0} \int_0^{t_1} u_0(t_1, t_2) H'_s(t_2) \psi_s(t_2) dt_2 \right] \\ &= \left[ u_0(t) + \frac{1}{i\hbar_0} \int_0^t u_0(t, t_1) H'_s(t_1) u_0(t_1) dt_1 \right] \psi_s(0) + \\ &\quad + \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^t u_0(t, t_1) H'_s(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} u_0(t_1, t_2) H'_s(t_2) \psi_s(t_2) dt_2 \end{aligned}$$

وبوضع :

$$\frac{1}{i\hbar_0} \int_0^t u_0(t, t_1) H'_s(t_1) u_0(t_1) dt_1 = u^{(1)}(t)$$

$$\begin{aligned} \therefore \psi_s(t) &= \left[ u_0(t) + u^{(1)}(t) \right] \psi_s(0) + \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t u_0(t, t_1) H'_s(t_1) dt_1 * \\ &\quad * \int_0^{t_1} u_0(t_1, t_2) H'_s(t_2) \psi_s(t_2) dt_2 \end{aligned}$$

وبالتعويض من جديد عن  $\psi_s(t_2)$  تحت علامة التكامل بقيمتها المعطاه من

نفس المعادلة نحصل على الآتي :

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

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

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

ويوضع :

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

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

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

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

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

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

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

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

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 .....