بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه قم

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد فیزیک گرایش اتمی مولکولی

عنوان:

بررسی دینامیک جبری انتقال ذره در مقیاس نانو

استاد راهنما:

دکتر حسن پهلوانی

نگارنده:

فاطمه آرزومندی

زمستان ۱۳۸۹

حمد و سپاس خدای را که توفیق کسب دانش و معرفت را به ما عطا فرمود . در این جا بر خود لازم می دانم که از تمامی اساتید بزرگوار، به ویژه اساتید دوره کارشناسی ارشد که مرا در تحصیل علم و معرفت و فضائل اخلاقی یاری نموده اند تقدیر و تشکر کنم .

از استاد گرامی و بزرگوار جناب آقای دکتر پهلوانی که راهنمایی اینجانب را در انجام تحقیق، پژوهش و نگارش این پایان نامه تقبل نموده اند نهایت تشکر و سپاسگزاری را دارم. همچنین جا دارد که از جناب آقای دکتر رزمی و جناب آقای دکتر اتفاقی به خاطر قبول داوری این پایان نامه و نماینده محترم تحصیلات تکمیلی کمال تشکر و قدردانی را نمایم.

چکیده:

بررسی نوسانات یک ذره کوانتومی باردار (الکترون) در یک پتانسیل دوره ای (بلور) تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان از پدیده های جالب در مکانیک کوانتومی است. نوساناتی که از تغییر مکان تابع موج این ذره بوجود می آید به نوسانات بلوخ معروف است. در تقریب مدل بستگی قوی این ویژه حالت ها جایگزیده اند و به حالت های وانیر- استارک معروفند. طبیعت این حالت ها اثر ژرفی در خواص الکترونیکی جامدات در مقیاس نانو دارد. بنابراین دانستن قوانین حاکم بر رفتار ذرات کوانتومی باردار و چگونگی حرکت آنها در نانو ساختارها از مهم ترین موضوعات تحقیقاتی روز در مقیاس نانو و علم نانو الکترونیک است. دینامیک کوانتومی یک ذره باردار در زنجیره نامتناهی از چاه های کوانتومی یک بعدی در تقریب مدل بستگی قوی تحت تأثیر میدان خارجی اختیاری وابسته به زمان بر اساس روش جبر دینامیکی بررسی شده است. از آنجایی که در مقیاس نانو با تعداد متناهی از تله های کوانتومی سروکار داریم و عبور الکترون از این تله ها توسط تونل زنی کوانتومی امکان پذیر است بنابراین خاصیت موجی ذره در این سامانه ها دارای اهمیت است. بر اساس روش های عملگری در مکانیک کوانتومی، حرکت یک ذره باردار کوانتومی در یک سامانه متناهی تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان با استفاده از شرایط مرزی دیریکله بررسی شده است. نهایتا برای سامانه فوق، با استفاده از شرایط مرزی تناوبی توانسته ایم یک مدل جبری برای حلقه کوانتومی پیدا کنیم و با تجزیه و تحلیل کردن ساختار جبری مربوطه تحول زمانی حلقه کوانتومی را تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان محاسبه کنیم.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

پیش گفتار..... ۱

فصل اول: محاسبه عملگر تحول زمانی در سامانه های کوانتومی

۱-۱. مقدمه..... ۵

۱-۲. عملگر تحول زمانی..... ۵

۱-۳. پتانسیل های وابسته به زمان..... ۷

۱-۳-۱. تصویر بر هم کنش..... ۸

۱-۴. اختلال وابسته به زمان..... ۱۱

۱-۴-۱. سری دایسون..... ۱۱

۱-۴-۲.احتمال گذار..... ۱۳

۱-۵. بررسی دینامیک یک سامانه کوانتومی به روش های جبری..... ۱۴

۱-۵-۱. جبر خطی (جبر لی)..... ۱۴

۱-۵-۱-۱. محاسبه عملگر تحول زمانی..... ۱۶

۱-۵-۱-۲. محاسبه عملگر تحول زمانی با استفاده از روش تجزیه..... ۱۷

۱-۵-۲. جبر چند جمله ای (غیر خطی)..... ۱۹

فصل دوم: بررسی دینامیک نوسانات بلوخ به روش جبری

۲-۱. مدل بستگی قوی..... ۲۴

۲-۲. آرایه یک بعدی از اتم ها..... ۲۷

۲-۳. عملگر تحول زمانی..... ۲۹

۲-۴. بررسی تحول سامانه تحت تأثیر میدان ثابت و متغیر..... ۳۵

۲-۵. وابستگی زمانی مقادیر چشمداشتی..... ۳۷

فصل سوم: بررسی ساختار جبری و انتقال ذره در یک آرایه متناهی از چاه های کوانتومی

۳-۱. معرفی مدل متناهی..... ۴۲

۳-۲. جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته..... ۴۴

۳-۳. نمایش جبر $su(2)$ برای حالت های ویژه $N=2$..... ۵۲

۳-۴. نمایش جبر $su(2)$ برای حالت $N=3$..... ۵۳

۳-۵. عملگر تحول زمانی..... ۵۴

۳-۵-۱. عملگر تحول زمانی برای حالت های ویژه $N=2,3$..... ۵۴

۳-۵-۲. عملگر تحول زمانی برای حالت های $N\geq 4$..... ۵۶

فصل چهارم: بررسی دینامیک جبری ذره در یک آرایه دوره ای (حلقه کوانتومی) از چاه های کوانتومی

۴-۱. ساختار جبری یک حلقه کوانتومی..... ۶۴

۴-۲. تحول زمانی سامانه..... ۶۸

۴-۳. بررسی تحول سامانه تحت تأثیر میدان های مختلف..... ۷۵

فصل پنجم: بحث و نتیجه گیری

۵-۱.بحث و نتیجه گیری..... ۸۰

منابع..... ۸۳

پیش گفتار

یکی از مسایل جالب و مهم تحقیقاتی در مکانیک کوانتومی بررسی دینامیک یک ذره باردار کوانتومی در یک پتانسیل دوره ای (بلور) است [۲-۱]. وقتی چنین ذره ای تحت تأثیر یک میدان خارجی (وابسته به زمان و مستقل از زمان) قرار گیرد، باعث می گردد ذره در حالت های جایگزیده ای معروف به حالت های وانیر- استارک[۱] قرار گیرد و در این مکان شروع به نوسان (نوسانات بلوخ[۲]) کند [۴-۳]. این حالت های تک الکترونی نقش اساسی و اثر ژرفی در انتقال و خواص انتقال الکترونی در جامدات دارند، بنابراین شناخت این حالت ها برای مدل های معرفی شده زیر ضروری است. چنین حالت هایی (نوسانات) به طور تجربی وتئوری برای اتم های سرد در شبکه های اپتیکی و شبکه های فوتونیک دیده شده اند [۱۲- ۵].

در این جا صحبت بر سر انتقال یک الکترون یا در حالت کلی یک تک ذره باردار کوانتومی بین تعداد نامتناهی تله های کوانتومی درتقریب مدل بستگی قوی[۳] و تحت تأثیر یک میدان خارجی وابسته به زمان می باشد. در این زمینه کارهای زیادی برای حالتی که سامانه مورد نظر از تعداد نامتناهی تله های کوانتومی در نظر گرفته شده انجام شده است، از جمله می توان به کارهای کرش[۴] و همکاران اشاره کرد[۱۳]. که آنها دینامیک یک ذره باردار را در یک زنجیره نامتناهی کوانتومی یک بعدی معروف به نوسانات بلوخ در تقریب مدل بستگی قوی و تحت تأثیر یک میدان خارجی اختیاری وابسته به زمان بررسی کردند[۱۳].

یکی دیگر از مسائل جالب توجه در این زمینه ها یک سامانه متناهی در تقریب مدل بستگی قوی با شرایط مرزی بسته (دیریکله) است. نشان داده شده است جبر حاکم بر این مدل یک جبر چند جمله ای پارافرمیونی تغییر شکل یافته است [۱۴]. در این مورد، ذره در مکانی که تعدادی چاه کوانتومی با شماره های (۱تا N) وجود دارد، تحت تأثیر یک میدان خارجی وابسته به زمان حرکت می کند، به طوری که امکان تونل زنی ذره در هر چاه i ($1 \le i \le N$)، به چپ و راست برابر با پیش بینی مدل بستگی قوی است، اما نکته این است، که امکان تونل زنی آن برای حالت $i=1$ به

---

[۱] Wannier-Stark
[۲] Bloch oscillation
[۳] Tight-Binding
[۴] Korsch

چپ و $i = N$ به راست وجود ندارد. به عنوان مثالی از این مدل می توان به اتم های به دام افتاده در یک شبکه اپتیکی اشاره کرد. چنین مدلی را می توان در مورد پدیده های انتقال و رفتار کوانتومی ذرات به کار برد و خواص ترابردی را در مقیاس نانو به دست آورد. برای این منظور با هامیلتونی چنین سامانه ای می توان، یک سیم کوانتومی در تقریب مدل بستگی قوی که تحت تأثیر یک میدان خارجی اختیاری وابسته به زمان قرار می گیرد را مدل سازی کرد. یک سیم کوانتومی، یک زنجیره خطی از اتم ها است که معمولا بین دو اتصال فلزی (منبع پتانسیل خارجی وابسته به زمان) قرار می گیرد. در مقیاس نانو، طبیعت موجی مکانیک کوانتومی الکترون هایی که از منبع تابش می شوند دارای اهمیت است.

در سال های اخیر با پیشرفت نانو تکنولوژی مطالعات زیادی روی ساختارهای حلقه کوانتومی انجام شده است، مطالعه حلقه های کوانتومی به خاطر کاربردهای الکتریکی [۱۵,۱۶]، اپتیکی [۱۷] و مغناطیسی[۱۸,۱۹] جالب توجه است، به خصوص خواص الکترونیکی حلقه کوانتومی آن را از دیگر ساختارها مجزا ساخته است. از طرفی مطالعه حلقه های کوانتومی در بعد مزوسکوپیکی در حضور میدان های خارجی یک سری از پدیده های جالب توجه در فیزیک نظیر اثر آهارونوف- بوهم [۲۰,۲۱]، اثرکوانتومی هال[۲۲] و فازبری [۲۳] را نشان می دهد.

ما در این پایان نامه بر اساس روش های عملگری در مکانیک کوانتومی برای حرکت یک ذره باردار کوانتومی در یک سامانه متناهی که از تعداد مشخصی چاه های کوانتومی با شماره های ۱ تا N ساخته شده است وقتی تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان قرار می گیرد با استفاده از شرایط مرزی دوره ای در تقریب مدل بستگی قوی (حلقه کوانتومی) به یک مدل جبری دست یافتیم. همچنین بر اساس ساختار جبری به دست آمده، دینامیک جبری مدل مورد بررسی قرار داده شده است و می توان جریان کوانتومی حاصل از حرکت ذره باردار را برای حلقه کوانتومی تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان محاسبه کرد.

اخیرا با پیشرفت های نانوتکنولوژی سیمای کوچک سازی قطعات الکترونیکی مورد توجه واقع شده است که منشأ آن مطالعه ساختارهای گسسته است، نظیر یک آرایه ای از نقطه های کوانتومی، سیم ها و حلقه ها در مقیاس اتمی. معمولا این کارها بر اساس حل معادله شرودینگر تک الکترونی برای یک سامانه در چارچوب مدل بستگی قوی است[۲۴].

در فصل اول این پایان نامه به محاسبه عملگر تحول زمانی در سامانه های کوانتومی وابسته به زمان پرداخته شده است و جبر لی و جبر چند جمله ای به طور اجمالی مرور شده است.

در فصل دوم دینامیک جبری یک ذره باردار را در یک زنجیره نامتناهی کوانتومی یک بعدی در تقریب مدل بستگی قوی تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان مطالعه شده است. همچنین با توجه به روابط جابجایی و جبر بین عملگرهای موجود در سامانه، تحول زمانی سامانه مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل سوم ساختار جبری یک زنجیره متناهی از اتم ها در تقریب مدل بستگی قوی با شرایط مرزی بسته (دیریکله) تحت تأثیر میدان خارجی اختیاری مطالعه شد و نتیجه گیری شد که جبر مربوط به این سامانه یک جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته است. در فصل چهارم ساختار جبری یک حلقه کوانتومی در تقریب مدل بستگی قوی تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان به دست آمد و بر اساس آن تحول سامانه به طور دقیق حاصل شد. نهایتا در فصل پنجم نتیجه گیری و کاربردها ارائه گردیده است.

فصل اول

محاسبه عملگر تحول زمانی در سامانه های کوانتومی

۱–۱ مقدمه

در مکانیک کوانتومی و اپتیک کوانتومی، سامانه های با هامیلتونی وابسته به زمان، به خاطر کاربردهای فراوان دارای اهمیت است. بنابراین در این فصل به بعضی از روش ها برای محاسبه عملگر تحول زمانی در سامانه های کوانتومی وابسته به زمان پرداخته می شود.

۱–۲ عملگر تحول زمانی

معادله تحول شرودینگر بر حسب عملگر تحول زمانی برای هامیلتونی های وابسته به زمان به صورت زیر است :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) \qquad (۱–۱)$$

با ضرب طرفین این معادله درکت مستقل از زمان $|\alpha,t_0\rangle$ از راست خواهیم داشت، یعنی

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t,t_0)}{\partial t} |\alpha,t_0\rangle = \hat{H}(t,t_0)\, \hat{U}(t,t_0) |\alpha,t_0\rangle \qquad (۲–۱)$$

با جایگذاری تعریف $|\alpha,t_0;t\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle$ در معادله (۱-۲)، معادله شرودینگر زیر حاصل می گردد

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle = \hat{H}(t,t_0)\,|\alpha,t_0;t\rangle \qquad (۱-۳)$$

هرگاه عملگر $\hat{H}(t,t_0)$ و نحوه وابستگی زمانی آن مشخص باشد و همچنین با معلوم بودن نحوه عمل $\hat{U}(t,t_0)$ روی حالت اولیه $|\alpha,t_0\rangle$ می توان تحول سامانه را مورد بررسی قرار داد. در مسائل مکانیک کوانتومی وابستگی زمانی عملگر هامیلتونی بر اساس سه حالت زیر است که با استفاده از هر کدام می توان عملگر تحول زمانی را به دست آورد :

حالت اول :

در سامانه هایی که عملگر هامیلتونی مستقل از زمان باشد. بدین معنی که با تغییر پارامتر t، عملگر $\hat{H}$ ثابت بماند. مثالی از این نوع هامیلتونی، هامیلتونی بر هم کنش گشتاور مغناطیسی اسپینی با میدان مغناطیسی مستقل از زمان است. در چنین حالتی، حل (۱-۱) به شکل زیر است

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) \qquad (۱-۴)$$

برای اثبات آن، تابع نمایی را به صورت زیر بسط می دهیم

$$\exp\left(\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) = 1 - \frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} + \left(\frac{(-i)^2}{2}\right)\left(\frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right)^2 + \cdots \qquad (۱-۵)$$

از آنجا که مشتق زمانی این بسط عبارت است از

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp\left(\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) = \frac{-i\hat{H}}{\hbar} + \left(\frac{(-i)^2}{2}\right)2\left(\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)^2(t-t_0) + \cdots \qquad (۱-۶)$$

واضح است که عبارت (۱-۴) در معادله ی دیفرانسیل (۱-۱) صدق می کند.

حالت دوم :

در بعضی از سامانه های مکانیک کوانتومی عملگر هامیلتونی $\hat{H}(t)$ وابسته به زمان است ولی $\hat{H}(t)$ها در زمانهای مختلف جابجا می شوند یعنی $\left[\hat{H}(t),\hat{H}(t')\right]=0$. به عنوان مثال می توان

حالتی را در نظر گرفت که گشتاور مغناطیسی اسپینی تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار دارد که شدت آن با زمان تغییر می کند، اما امتداد آن بدون تغییر می ماند. در این حالت عملگر تحول زمانی در معادله (۱-۱) به شکل زیر به دست می آید

$$\hat{U}(t) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} \hat{H}(t')\ dt'\right] \qquad (۷-۱)$$

حالت سوم :

سامانه های کوانتومی که در آن ها، عملگر هامیلتونی در زمان های مختلف با یکدیگر جابجا نمی شوند یعنی $\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] \neq 0$. اگر به همان مثال گشتاور مغناطیسی اسپینی بر گردیم در این مورد امتداد میدان مغناطیسی هم با زمان تغییر می کند. در چنین صورتی حل صوری (فرمال) عبارت است از

$$\hat{U}(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\ \hat{H}(t_1)\,\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n) \qquad (۸-۱)$$

پس از آن که ف . ج . دایسون[۱] بسطی به این شکل را، در حل اختلالی نظریه ی میدان های کوانتومی به دست آورد، این بسط به عنوان سری دایسون نامیده شد.

۱-۳ پتانسیل های وابسته به زمان

هامیلتونی وابسته به زمان $\hat{H}(t)$ را طوری در نظر می گیرند که بتوان آن را به دو قسمت زیر تقسیم کرد

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \qquad (۹-۱)$$

که در آن $\hat{H}_0$ صریحا وابسته به زمان نیست. فرض می کنیم مسأله $\hat{V}(t) = 0$ به طور دقیق قابل حل باشد، به این معنی که ویژه حالت های $|n\rangle$ و ویژه مقادیر E_n که به شکل زیر

$$\hat{H}_0\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \qquad (۱۰-۱)$$

[۱] Dyson

تعریف می شوند ، کاملا شناخته شده باشند. اگر فرض شود که در حالت اولیه فقط یکی از ویژه حالت های $\hat{H}_0$ مثلا $|i\rangle$ اشغال شده باشد، با اعمال پتانسیل خارجی $\hat{V}(t)$ به این سامانه با گذشت زمان، حالت های دیگری به جز $|i\rangle$ نیز اشغال خواهند شد، یعنی عملگر $\hat{V}(t)$ سبب گذار به حالت هایی غیر از $|i\rangle$ است.

از آن جایی که عملگر هامیلتونی وابسته به زمان است، عملگر تحول زمانی را نمی توان به شکل ساده $e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}}$ نوشت. در این جا مسأله اساسی این است که با چه احتمالی می توان سامانه را در حالت $|n\rangle$ با $n \neq i$ یافت؟ و یا به طور کلی تر چگونه می توان تغییر زمانی یک حالت دلخواه را مطالعه کرد. برای این منظور فرض کنید در $t = 0$ حالت یک سامانه فیزیکی با

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(0)\,|n\rangle \qquad (۱۱-۱)$$

داده شود. حال برای $t > 0$ ، $c_n(t)$ را می توان به نحوی پیدا کرد که

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \sum_n c_n(t)\, e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}\,|n\rangle \qquad (۱۲-۱)$$

باشد. معادله (۱-۱۲) حالت یک سامانه فیزیکی در تصویر شرودینگر را بیان می کند.

اگر $\hat{V}(t)$ صفر باشد، $c_n(t)$ برابر $c_n(0)$ خواهد شد. همانگونه که در ادامه بحث خواهد شد، این جداسازی زمانی مناسب است که $c_n(t)$ بتواند در یک معادله دیفرانسیل نسبتا ساده صدق کند و احتمال یافتن $|n\rangle$، با محاسبه $|c_n(t)|^2$ به دست آید.

۱-۳-۱ تصویر بر هم کنش

فرض کنید حالت اولیه یک سامانه فیزیکی در $t = t_0$ برابر $|\alpha\rangle$ باشد، معمولا در اغلب موارد t_0 را صفر اختیار می کنند.

حال اگر در زمان دیگری حالت این سامانه در تصویر شرودینگر $|\alpha, t_0; t\rangle_S$ باشد که در آن شاخص S بیانگر حالت سامانه در تصویر شرودینگر باشد می توان عبارتی به صورت زیر تعریف کرد :

$$|\alpha,t_0;t\rangle_I = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ |\alpha,t_0;t\rangle_S \qquad (۱۳-۱)$$

که در آن اندیس I بیانگر حالتی است که وضعیت فیزیکی سامانه را در تصویر بر هم کنش نمایش دهد و در $t = 0$، همان حالت شرودینگر است. در تصویر بر هم کنش عملگرها به صورت زیر تعریف می شوند

$$\hat{V}_I(t) = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ \hat{V}(t) \ e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \qquad (۱۴-۱)$$

که در آن $\hat{V}$ بدون شاخص پایین، پتانسیل وابسته به زمان سامانه در تصویر شرودینگر است. همچنین در مکانیک کوانتومی ارتباط بین تصویر شرودینگر و تصویر هایزنبرگ به شکل زیر است

$$|\alpha\rangle_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \ |\alpha,t_0=0;t\rangle_S \qquad (۱۵-۱)$$

و همچنین

$$\hat{A}_H = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \ \hat{A}_S \ e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \qquad (۱۶-۱)$$

حال می توان معادله دیفرانسیل بنیادی که وابستگی زمانی حالت سامانه در تصویر بر هم کنش را مشخص می کند، استخراج کرد. با جایگذاری رابطه (۱-۱۳) در این معادله خواهیم داشت :

$$\begin{aligned} i\hbar \ \frac{\partial}{\partial t} \ |\alpha,t_0;t\rangle_I &= i\hbar \ \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ |\alpha,t_0;t\rangle_S \right) \\ &= -\hat{H}_0 \ e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ |\alpha,t_0;t\rangle_S + e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ \left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)|\alpha,t_0;t\rangle_S \\ &= e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ \hat{V}(t) \ e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \ |\alpha,t_0;t\rangle_S \end{aligned} \qquad (۱۷-۱)$$

با استفاده از (۱-۱۳) و (۱-۱۴) عبارت زیر نتیجه می شود

$$i\hbar \ \frac{\partial}{\partial t} \ |\alpha,t_0;t\rangle_I = \hat{V}_I(t) \ |\alpha,t_0;t\rangle_I \qquad (۱۸-۱)$$

با مقایسه دو رابطه (۱–۱۷) و (۱–۱۸) نتیجه می شود که این معادله، معادله شرودینگر گونه ای است که در آن $\hat{V}_I(t)$ جایگزین $\hat{H}(t)$ شده است. ازبسیاری جهات، تصویر بر هم کنش یا تصویر دیراک یک حالت میانی بین تصویر شرودینگر و تصویر هایزنبرگ است.

در تصویر بر هم کنش نیز می توان حالت $|\alpha, t_0; t\rangle$ را بر حسب حالت های پایه $|n\rangle$ به شکل زیر بسط داد

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n c_n(t)\,|n\rangle \qquad (۱–۱۹)$$

با جایگذاری در معادله (۱–۱۸) و ضرب طرفین آن در $\langle n|$ خواهیم داشت

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_m \langle n|\hat{V}_I(t)|m\rangle \langle m|\alpha, t_0; t\rangle_I \qquad (۱–۲۰)$$

با استفاده از رابطه (۱–۱۴) طرف دوم این رابطه را می توان به شکل زیر نوشت

$$\langle n|\, e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}\, \hat{V}(t)\, e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}\, |m\rangle = V_{nm}(t)\, e^{i\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}} \qquad (۱–۲۱)$$

سپس با توجه به تعریف زیر

$$c_n(t) = \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I \qquad (۱–۲۲)$$

معادله (۱–۲۰) تبدیل به معادله دیفرانسیل زیر می شود

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = \sum_m V_{nm}(t)\, e^{i\omega_{nm} t}\, c_m(t) \qquad (۱–۲۳)$$

که در آن

$$\omega_{nm} \equiv \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} = -\omega_{mn} \qquad (۱–۲۴)$$

معادله دیفرانسیل (۱–۲۳) را می توان به شکل ماتریسی زیر نیز نوشت

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dot{c}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}\, e^{\,i\omega_{12}t} & & \cdots \\ V_{21}\, e^{\,i\omega_{21}t} & V_{22} & & \cdots \\ & & V_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (۱-۲۵)$$

معادله (۱-۲۳)، یک معادله اساسی است که با استفاده از آن می توان وابستگی زمانی احتمال حالت $|n\rangle$ را برای یک سامانه کوانتومی وابسته به زمان به دست آورد.

۱-۴ اختلال وابسته به زمان

در حالت کلی به جز چند مسئله نظیر مسئله دو حالتی وابسته به زمان و بعضی از روش های جبری، معمولا حل دقیقی برای معادله دیفرانسیل (۱-۲۵) وجود ندارد، لذا باید به روش های تقریبی پرداخت. یکی از این روش های تقریبی سری دایسون است.

۱-۴-۱ سری دایسون

سری دایسون به شکل زیر تعریف می شود

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \cdots \qquad (۱-۲۶)$$

که در آن $c_n^{(1)}$ و $c_n^{(2)}$ و ... به معنی دامنه های مرتبه ی اول ، مرتبه ی دوم و ... وابسته به زمان هستند ، که این وابستگی ناشی از حضور پتانسیل خارجی وابسته به زمان است.
برای حل این مسأله، همانند آنچه در نظریه اختلال مستقل از زمان داریم، از روش تکرار استفاده می کنیم. اگر در ابتدا فقط حالت i پر شده باشد، آن گاه c_n را در طرف راست معادله دیفرانسیل (۱-۲۵) با $c_n^{(0)} = \delta_{ni}$ (مستقل از t) تقریب می زنیم و آن را به مشتق زمانی $c_n^{(1)}$ ربط می دهیم، سپس برای به دست آوردن $c_n^{(1)}$ از معادله دیفرانسیل انتگرال می گیریم. دوباره برای به دست آوردن معادله دیفرانسیلی برای $c_n^{(2)}$ ، $c_n^{(1)}$ را در سمت راست معادله دیفرانسیل (۱-۲۵) وارد می کنیم. (در سال ۱۹۲۷دیراک این روش را برای توسعه نظریه اختلال وابسته به زمان به کار برد.)

با این روش می توان یک بسط اختلالی برای $\hat{U}_I(t,t_0)$ یافت و در انتهای کار عناصر ماتریس $\hat{U}_I$ را به $c_n(t)$ مرتبط کرد.

عملگر تحول زمانی در تصویر بر هم کنش به صورت زیر تعریف می شود:

$$|\alpha,t_0;t\rangle_I = \hat{U}_I(t,t_0)\ |\alpha,t_0;t_0\rangle_I \qquad (۱-۲۷)$$

با استفاده از این رابطه، معادله دیفرانسیل (۱-۱۸) در تصویر بر هم کنش معادل می شود با

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}_I(t,t_0) = \hat{V}_I(t)\,\hat{U}_I(t,t_0) \qquad (۱-۲۸)$$

این معادله دیفرانسیل عملگری را باید تحت شرط اولیه زیر حل کرد

$$\hat{U}_I(t,t_0)|_{t=t_0} = 1 \qquad (۱-۲۹)$$

با استفاده از شرط اولیه (۱-۲۹) حل معادله دیفرانسیل (۱-۲۸) به شکل زیر است

$$\hat{U}_I(t,t_0) = 1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{V}_I(t')\ \hat{U}_I(t',t_0)\ dt' \qquad (۱-۳۰)$$

به طوری که انتگرال ظاهر شده در معادله (۱-۳۰) را می توان با روش تکرار به دست آورد یعنی

$$\begin{aligned}\hat{U}_I(t,t_0) &= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{V}_I(t')\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}\hat{V}_I(t'')\,\hat{U}_I(t'',t_0)\ dt''\right]dt' \\ &= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\ \hat{V}_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{V}_I(t')\ \hat{V}_I(t'') + \cdots + \\ &\quad \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\cdots\times\int_{t_0}^{t^{(n-1)}}dt^{(n)}\ \hat{V}_I(t')\,\hat{V}_I(t'')\cdots\hat{V}_I(t^{(n)})\end{aligned} \qquad (۱-۳۱)$$

پس از آن که فریمن جی . دایسون این روش را در الکترودینامیک کوانتومی (QED) هموردا به کار بست، این سری را به نام سری دایسون می شناسیم.

اگر از مسئله همگرایی در این سری صرفنظر کنیم، می توان $\hat{U}_I(t,t_0)$ را تا هر مرتبه ی معینی از نظریه اختلال محاسبه کرد.

۱-۴-۲ احتمال گذار

با استفاده از $\hat{U}_I(t,t_0)$ به دست آمده در معادله (۱-۳۱) می توان تحول زمانی هرحالت را پیشگویی کرد. برای مثال اگر حالت اولیه در $t=0$ یکی از ویژه حالت های انرژی $\hat{H}_0$ باشد آن گاه برای به دست آوردن حالت اولیه در زمانهای بعد، کافی است آن را در $\hat{U}_I(t,t_0)$ ضرب کرد یعنی

$$\left|i,t_0=0;t\right\rangle_I=\hat{U}_I(t,0)\left|i\right\rangle=\sum_n\left|n\right\rangle\left\langle n\right|\hat{U}_I(t,0)\left|i\right\rangle \qquad (۱-۳۲)$$

قبلا عملگر تحول زمان $\hat{U}(t,t_0)$ را در تصویر شرودینگر معرفی شد. اینک در ادامه ارتباط بین $\hat{U}(t,t_0)$ و $\hat{U}_I(t,t_0)$ را جستجو می کنیم. برای این منظور از معادله (۱-۱۳) به شکل زیر استفاده می کنیم

$$\left|\alpha,t_0;t\right\rangle_I=e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}\left|\alpha,t_0;t\right\rangle_S \qquad (۱-۳۳)$$

این معادله با استفاده از معادله (۱-۲۷) به صورت زیر تبدیل می شود :

$$\begin{aligned}\left|\alpha,t_0;t\right\rangle_I&=e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}\hat{U}(t,t_0)\left|\alpha,t_0;t_0\right\rangle_S\\&=e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}\hat{U}(t,t_0)\;e^{-i\frac{\hat{H}_0 t_0}{\hbar}}\left|\alpha,t_0;t_0\right\rangle_I\end{aligned} \qquad (۱-۳۴)$$

بنابراین خواهیم داشت

$$\hat{U}_I(t,t_0)=e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}\hat{U}(t,t_0)\;e^{-i\frac{\hat{H}_0 t_0}{\hbar}} \qquad (۱-۳۵)$$

عناصر ماتریسی $\hat{U}_I(t,t_0)$ بین ویژه حالت های انرژی $\hat{H}_0$ به شکل زیر است

$$\left\langle n\right|\hat{U}_I(t,t_0)\left|i\right\rangle=e^{i\frac{(E_n t-E_i t_0)}{\hbar}}\left\langle n\right|\hat{U}(t,t_0)\left|i\right\rangle \qquad (۱-۳۶)$$

که در آن $\left\langle n\right|\hat{U}(t,0)\left|i\right\rangle$ به عنوان دامنه گذار تعریف شده بود. ولی $\left\langle n\right|\hat{U}_I(t,0)\left|i\right\rangle$ دامنه گذاری که قبلا معرفی شد نیست. اما در هر حال