بسم الله الرحمن الرحیم

وزارت علوم،تحقیقات وفناوری

دانشگاه بین المللی امام خمینی(ره)

دانشکده علوم پایه،گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت درجهء کارشناسی ارشددر

رشتهء فیزیک اتمی ومولکولی

عنوان:

اختلال وابسته به زمان وقاعده طلایی فرمی درنمایش ویگنر

استادراهنما:

دکترالهه نحوی فرد

استادمشاور:

دکترمحمدرضابذرافکن

نگارنده:

سیدولی الحق مشفق

دی ۱۳۹۰

تقدیم به

- رهروان راه دانش

- روان پاک اولین استاید زندگی ام، پدر و مادر عزیزم

- برادران خوب و خواهر عزیزم، که همیشه با من بودند و حمایتم کردند

- روان مقدس شهدای جهاد و مقاومت کشورم، به ویژه رهبر جهاد و مقاومت مردم افغانستان، مرد آزاده و مبارز اسلام، سپه سالار شهدا، شهید احمد شاه مسعود فقید (رح)

- به آنهایی که سنگ را برای بنای آزادی به دوش می کشند نه برای مقبره

سپاس

حمد وسپاس خدای مهربان راکه توفیق ام عطاکرد تا براندوخته هایی علمی خودبی افزایم و باشد که ازاین طریق کوچکترین گامی رادرراه خدمت گذاری به مردم وکشورم بردارم.

واژه هاراگم میکنم،زیراهراسم ازین است که نتوانم واژه برگزینم تابیانگراحساسات قلبی من باشد.به یقین بااین قلم ناتوانم ممکن نیست تاآنچه که شایسته ی سپاس گذاری از اساتید دانشمندم است بیان کنم،اماآنقدرمیدانم ،آنچه راکه اینجامی نویسم از سر عشق است نه ازسروظیفه.

من خیلی ها سعادتمندوخوش شانس هستم که علاوه برگذراندن دروس ارشد بااساتید دانشمندونیک اندیش،جناب آقای دکتر محمدرضا بذرافکن وخانم دکترالهه نحوی فرد،درتدوین این پایان نامه وسع خویش ازدریای دانش، محبت وانسان مداری ایشان بهره بردم. هم کاری های همیشگی ایشان یگانه مشوق من دراتمام این مقطع تحصیلی بود ، بدون شک من توانمندی جبران این همه لطف،بزرگواری ورهنمایی هاراندارم، قلبا بخاطرهمه ی همکاری ،انسان دوستی ورهنمای های سودمند ،ازین بزرگواران سپاس گذارم.

ازهمه اساتیدگرانمایه ودانشمندگروه فیزیک که درین مقطع تحصیلی اززحمات بیدریغ شان بهره بردم کمال تشکررادارم.

درپایان ازخانواده ی عزیزم به ویژه برادران خوب وخواهرمهربانم که به یقین بدون حمایت ایشان رسیدن تا به اینجابرایم ممکن نبود بسیار متشکرم.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست نمودار ها

عنوان **صفحه**

مقدمه

در بحث تئوری اختلال وابسته به زمان حالات ویژه ای وجود دارند که در آنها گذار از یک ویژه حالت هامیلتونی پایه(غیر اختلالی) به کلافی از حالت های بر انگیخته (که از نظر انرژی تقریبا یکسان هستند) انجام می گیرید. همچنین عنصر ماتریسی عملگر اختلال وابسته به زمان بین حالت اولیه و نهایی در حوزه کلاف مذکور تقریبا ثابت است. گاه اتفاق می افتد که عامل فیزیکی ایجاد کننده اختلال هامیلتونی پایه را نیز عوض می کند. ممکن است هامیلتونی پایه از کانال های متفاوت و البته با دامنه احتمالات متفاوت به فرم های جدیدی تبدیل شود. بنابر این، در حالت کلی، حالت های بر انگیخته، ویژه حالت های هامیلتونی (یا هامیلتونی های) پایه جدیدی هستند. چنین فرایندهایی که با پدیده بازگشت ناپذیری و میرایی همراه هستند اغلب با قاعده طلایی فرمی مرتبطند. فرایندهایی مثل واپاشی هسته ای، گذار های غیر تابشی در ملکول های چند اتمی، و فرایندهای مرتبط با اتم های سرد شده در تله های مغناطیسی و اپتیکی مثالهایی از کاربرد قاعده طلایی فرمی در فیزیک و شیمی کوانتمی هستند.[۵] و[٦] و[٧] و[٨] و[٩] و[١٠].

اگر عملگر گذار را به شیوه ای در یک بازه تعریف از حالت اولیه وارد کنیم، مسئله محاسبه احتمال گذارها تبدیل به مسئله محاسبه هم پوشانی " حالت اولیه" از هامیلتونی اولیه با کلاف حالت های نهایی از هامیلتونی نهایی می شود. تعداد این حالت های نهایی ممکن است بی شمار باشد. همچنین عموما آنها به معنی دلتای دیراک یک مجموعه متعامد و بهنجار می سازند ولی در این موارد خود فرایند راست هنجار کردن از نظر ریاضی بسیار سخت است.

نمایش مکانیک کوانتمی در فضای فاز، بر حسب تابع ویگنر، راه های جدیدی برای بررسی کاربرد قاعده طلایی فرمی باز می کند. این بدان علت است که همپوشانی بین حالت ها در این فرمالیزم از راه قضیه هم ارزی انتگرال همپوشانی با تریس حاصلضرب قابل محاسبه است.

یکی از سودمندی های استفاده از نمایش ویگنر آن است که جمع بر روی تعداد زیادی همپوشانی بین توابع موج جای خود را به تنها یک انتگرال همپوشانی در فضای فاز می دهد. این انتگرال همپوشانی

مربوط به تابع ویگنر حالت اولیه و تابع ویگنر کلاف حالتهای نهایی است. بنابر این ما می توانیم پا را فراتر گذاشته قاعده طلایی فرمی را برای مواردی که حالت اولیه مثلا یک حالت گرمایی است نیز بکار ببریم.

در اپتیک کوانتمی همپوشانی بین توابع ویگنر روشی موثر برای محاسبه توابع توزیع در تقریب کلاسیک است. در بحث محاسبه احتمال گذارها نیز تقریب کلاسیک مناسبی را فراهم می کند. اگر یک تقریب نیمه کلاسیک مورد نیاز باشد در واقع نیازی نیست که مسئله پیدا کردن ویژه توابع هامیلتونی نهایی و راست هنجار کردن آنها حل شود. با استفاده از فرمالیزم ضرب ستاره ای برای نمادهای وایل ویگنر همیشه چنین تقریبی در دسترس است و ضمنا می توان آنرا بهبود بخشید[۱۷] و[۱۸] و[۱۹].

پایان نامه حاضر تلاشی برای آشنایی با تکنیک های کاربرد قاعده طلایی فرمی در فضای فاز است. در فصل اول بطور فشرده برخی از مطالب مورد نیاز در مورد روش اختلال مستقل از زمان و وابسته به زمان در مکانیک کوانتمی یادآوری می شود. فصل دوم به معرفی تابع ویگنر و نمایش عملگرها و حالات کوانتمی بر فضای فاز می پردازد. در این فصل فضای مورد نیاز و ویژگی های ریاضی نمایش فضای فازی مکانیک کوانتمی بحث شده است. فصل سوم در مورد ضرب ستاره ای بین نماد های وایل ویگنر است. در این بخش یک تعمیم جدید از تابع ویگنر نیز معرفی شده و برای آن ضرب ستاره ای مناسب معرفی شده است. هدف از ارائه این تعمیم کاربرد آن (در آینده !) برای محاسبه تقریب کلاسیک مرتبط با قاعده طلایی فرمی است. فصل چهارم نیز بطور کامل قاعده طلایی فرمی در نمایش تابع ویگنری را بحث می کند. در انتهای این فصل نیز تکنیک های بحث شده در مورد یک مدل یک بعدی بکار برده شده است.

فصل اول

تئوری اختلال در فضای هیلبرت

تئوری اختلال درفضای هیلبرت

در حوزه مسایل مکانیک کوانتمی مسائل دارای جواب تحلیلی بسیار اندک هستند. این موضوع هم در مورد سیستم هایی با هامیلتونی مستقل از زمان و هم در مورد آنهایی که دارای وابستگی زمانی هستند صدق می کند. بخصوص بیشتر مسایلی که اهمیت عملی دارند دارای جواب تحلیلی نیستند. از نظر تاریخی نخستین رهیافت برای حل چنین مسائلی پیدا کردن جواب هایی تقریبی برای آنها از طریق نظریه اختلال بوده است. اگر چه روش های عددی امروزه کاربرد وسیع یافته اند ولی هنوز روشهای اختلالی بخاطر اینکه چارچوب تئوری برای چگونگی رفتار جواب تقریبی فراهم می کنند مهم هستند. در این فصل بطور مختصر مبانی نظریه اختلال را مرور می کنیم و برخی از روابط مورد نیاز فصل های بعدی را یادآوری می کنیم[۱].

۱-۱ اختلال مستقل از زمان

مسئله اصلی تئوری اختلال مستقل از زمان به شرح زیر است. یک سیستم کوانتمی با هامیلتونی مستقل از زمان $\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}$در نظر بگیرید که در آن $\lambda\hat{V}$ جمله اختلال و پارامتر λپارامتر کنترل کننده قدرت اختلال نامیده می شود. با فرض اینکه برای $\lambda = 0$ مجموعه ویژه مقادیر و ویژه بردارهای هامیلتونی داده شده است، ویژه بردارها و ویژه مقادیر $\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}$ را بیابید. $\hat{H}_\circ$ بخشی از هامیلتونی است که ویژه بردارها و ویژه مقادیرش را می دانیم[۲] و[۳] و[٤] یعنی

$$\hat{H}_\circ |E_n^{(\circ)}\rangle = E_n^{(\circ)} |E_n^{(\circ)}\rangle, \qquad (۱-۱)$$

که در آن فرض می کنیم که انرژی $E_n^{(\circ)}$ تبهگن نباشد. فرض می شود که $\lambda\hat{V}$ کوچک باشد به این معنی که عناصر ماتریسی آن بین ویژه پایه های هامیلتونی غیر اختلالی خیلی کوچکتر از انرژی گذار بین آنها باشد $|V_{ij}| \ll |E_i^{(\circ)} - E_j^{(\circ)}|$. بسط اختلالی ویژه مقادیر انرژی بر حسب پارامتر اختلال به شکل زیر نوشته می شود

$$E_n = E_n(\lambda) \equiv E_n^{(\circ)} + \Delta_n(\lambda) = E_n^{(\circ)} + \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \cdots \qquad (۱-۲)$$

که در آن $\Delta_n^{(1)}\Delta_n^{(2)}$... ثابت های مستقل از λای هستند که باید تعیین شوند. همینطور فرض می کنیم بسط مشابهی برای ویژه بردارها بر حسب λ وجود داشته باشد

$$|E_n(\lambda)\rangle = |E_n^{(\circ)}\rangle + \lambda\left|E_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|E_n^{(2)}\right\rangle + \cdots \qquad (۱-۳)$$

وقتی $\lambda \to 1$و اختلال بصورت کامل اعمال می شود $\Delta_n^{(j)}$تصحیح مرتبه j - ام انرژی و $\left|E_n^{(j)}\right\rangle$ تصحیح مرتبه j - ام بردار حالت نامیده می شود. بنابر تعریف $\left\{\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}\right\}|E_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|E_n(\lambda)\rangle$ و با قرار دادن بسط های(۱-۲)و(۱-۳) در رابطه بالا داریم

$$\begin{aligned}&\left\{\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}\right\}\left[|E_n^{(\circ)}\rangle + \lambda\left|E_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|E_n^{(2)}\right\rangle + \cdots\right] = \\ &\cdots\left\{E_n^{(\circ)} + \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \cdots\right\}\left[|E_n^{(\circ)}\rangle + \lambda\left|E_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|E_n^{(2)}\right\rangle + \cdots\right]\end{aligned} \qquad (۱-٤)$$

با مساوی قراردادن توانهای مشابه پارامتر اختلال معادلات زیر بدست می آید

$$\begin{gathered}\hat{H}_\circ\left|E_n^{(\circ)}\right\rangle = E_n^{(\circ)}\left|E_n^{(\circ)}\right\rangle, \\ \hat{H}_\circ\left|E_n^{(1)}\right\rangle + \hat{V}\left|E_n^{(\circ)}\right\rangle = E_n^{(\circ)}\left|E_n^{(1)}\right\rangle + \Delta_n^{(1)}\left|E_n^{(\circ)}\right\rangle, \\ \cdots \\ \hat{H}_\circ\left|E_n^{(j)}\right\rangle + \hat{V}\left|E_n^{(j-1)}\right\rangle = E_n^{(\circ)}\left|E_n^{(j)}\right\rangle + \sum_{k=1}^{j}\Delta_n^{(k)}\left|E_n^{(j-k)}\right\rangle, \cdots\end{gathered} \qquad (۱-٥)$$

معادله اول $|E_n^{(\circ)}\rangle$,را تعریف می کند. از معادله دوم، با ضرب در $\langle E_n^{(\circ)}|\cdots$و ساده کردن عبارت حاصل داریم

$$\Delta_n^{(1)} = \langle E_n^{(\circ)}|\hat{V}|E_n^{(\circ)}\rangle \qquad (۱-٦)$$

که تصحیح مرتبه اول انرژی را معیین می کند. اگر کل تصحیح بردار حالت را با کت- بردار

$$|e_n(\lambda)\rangle = \lambda\left|E_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|E_n^{(2)}\right\rangle + \cdots \qquad (۱-۷)$$

نمایش دهیم و قرارداد کنیم که $\langle E_n^{(\circ)}|e_n(\lambda)\rangle \equiv 0$ آنگاه آشکارا $|E_n(\lambda)\rangle = |E_n^{(\circ)}\rangle + |e_n(\lambda)\rangle$ بهنجار نیست و نرم آن کمی از واحد بیشتر خواهد بود. ولی این قرار داد از این نظر سودمند است که راه را برای بدست آوردن تصحیحات حالت هموار می کند. در این صورت می توان نوشت

$$\begin{aligned} &\left\{\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}\right\}\{|E_n^{(\circ)}\rangle + |e_n(\lambda)\rangle\} = \{E_n^{(\circ)} + \Delta_n(\lambda)\}\{|E_n^{(\circ)}\rangle + |e_n(\lambda)\rangle\} \mapsto \\ &\qquad \langle E_n^{(\circ)}|\cdots \mapsto \\ &\lambda\langle E_n^{(\circ)}|\hat{V}|E_n(\lambda)\rangle = \Delta_n(\lambda) \end{aligned} \tag{۸-۱}$$

رابطه آخر نشان می دهد که تصحیح مرتبه j - ام حالت تصحیح مرتبه $(j+1)$ - ام انرژی را فراهم می کند. بنابر این مثلا برای محاسبه تصحیح مرتبه دوم انرژی $\Delta_n^{(2)}$ به تصحیح مرتبه اول حالت $\left|E_n^{(1)}\right\rangle$ نیاز داریم. چون شرط $\langle E_n^{(\circ)}|e_n(\lambda)\rangle \equiv 0$ برای همه مقادیر λ برقرار است لذا

$\left\langle E_n^{(\circ)}\middle|E_n^{(j)}\right\rangle \equiv 0,\ \ j = 1,2,\cdots$. اکنون با استفاده از رابطه(۱-۵) داریم

$$\left(\hat{H}_\circ - E_n^{(\circ)}\right)\left|E_n^{(1)}\right\rangle = \left(\Delta_n^{(1)} - \hat{V}\right)|E_n^{(\circ)}\rangle \tag{۹-۱}$$

سپس با ضرب کردن دوطرف در $\langle E_m^{(\circ)}|\cdots$ روابط زیر را بدست می آوریم

$$\left\langle E_m^{(\circ)}\middle|E_n^{(1)}\right\rangle = \frac{\langle E_m^{(\circ)}|\left(\Delta_n^{(1)} - \hat{V}\right)|E_n^{(\circ)}\rangle}{\left(E_m^{(\circ)} - E_n^{(\circ)}\right)} \tag{۱۰-۱}$$

بنابر این چون $\left\langle E_n^{(\circ)}\middle|E_n^{(1)}\right\rangle = 0,$ است پس مولفه های بالا بطور کامل تصحیح مرتبه اول حالت را معلوم می کند

$$\begin{aligned} \left|E_n^{(1)}\right\rangle &= \sum_{m\neq n}|E_m^{(\circ)}\rangle\left\langle E_m^{(\circ)}\middle|E_n^{(1)}\right\rangle \\ &= \sum_{m\neq n}|E_m^{(\circ)}\rangle\frac{\langle E_m^{(\circ)}|\left(\Delta_n^{(1)} - \hat{V}\right)|E_n^{(\circ)}\rangle}{\left(E_m^{(\circ)} - E_n^{(\circ)}\right)} \end{aligned} \tag{۱۱-۱}$$

این فرایند می تواند تا هر مرحله دلخواه ادامه پیدا کند. نهایتا انرژی و بردار حالت (غیر بهنجار) برای هامیلتونی جدید بدست خواهد آمد. البته در صورت وجود تبهگنی در طیف انرژی $\hat{H}_\circ$ پیچیدگی هایی ظاهر خواهد شد که با انتخاب مناسب پایه قابل حل هستند. یک نکته قابل توجه

در موردتئوری اختلال مستقل از زمان در تصویر مکانیک کوانتومی در فضای هیلبرت آن است که در اینجا اختلال ویژه بردارها محاسبه می شود. در تصویر مکانیک کوانتمی در فضای فاز که در فصل های بعدی بحث می شود چیزی معادل بردار حالت وجود ندارد و بنابراین چنین روشی مستقیما قابل انتقال به این تصویر نیست. با این وجود برای مقایسه نتایج اجازه دهید فرض کنیم ویژه بردارهای هامیلتونی مختل شده به شکل زیر در دسترس باشند

$$|E_n(\lambda)\rangle = |E_n^{(0)}\rangle + \lambda|E_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|E_n^{(2)}\rangle + \cdots \tag{۱۲-۱}$$

آنگاه مجموعه عملگرهای $|E_m(\lambda)\rangle\langle E_n(\lambda)|$ نیز قابل بسط هستند و برای آنها داریم

$$\begin{aligned}
&|E_m(\lambda)\rangle\langle E_n(\lambda)| = \cdots \\
&\cdots\left\{|E_m^{(0)}\rangle + \lambda|E_m^{(1)}\rangle + \lambda^2|E_m^{(2)}\rangle + \cdots\right\}\left\{\langle E_n^{(0)}| + \lambda\langle E_n^{(1)}| + \lambda^2\langle E_n^{(2)}| + \cdots\right\} = \\
&\qquad\cdots\{|E_m^{(0)}\rangle\langle E_n^{(0)}|\} + \lambda\left\{|E_m^{(0)}\rangle\langle E_n^{(1)}| + |E_m^{(1)}\rangle\langle E_n^{(0)}|\right\} + \cdots \\
&\qquad\cdots\lambda^2\left\{|E_m^{(0)}\rangle\langle E_n^{(2)}| + |E_m^{(1)}\rangle\langle E_n^{(1)}| + |E_m^{(2)}\rangle\langle E_n^{(0)}|\right\} + \cdots
\end{aligned}$$

بنابر این تصحیحات مراتب مختلف با هم ترکیب می شوندتا یک تصحیح ازعملگر $|E_m(\lambda)\rangle\langle E_n(\lambda)|$ ساخته شود. وضعیت مشابهی هم برای ویژه مقادیر وجود دارد. آنچه در نمایش مکانیک کوانتمی در فضای فاز محاسبه می شود چیزی نظیر $|E_m(\lambda)\rangle\langle E_n(\lambda)|$ در تقریبات متوالی است و نه خود بردار حالت.

۱-۲ اختلال وابسته به زمان

مسئله اساسی تئوری اختلال وابسته به زمان بطور بنیادی با نظیر مستقل از زمان آن فرق می کند. فرض کنیم هامیلتونی یک سیستم کوانتمی به فرم $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}(t)$ باشد که در آن جمله اختلال وابسته به زمان کوچک فرض می شود. همینطور فرض می کنیم اختلال برای مدت زمان متناهی کلید خورده است یعنی

$$0 < t < \tau \ \Rightarrow \ \hat{V}(t), \qquad otherwise \ \ \hat{V}(t) = \hat{0}$$

اگر مجموعه ویژه بردارهای هامیلتونی پایه $\hat{H}_\circ$را بدانیم یعنی اگر داشته باشیم

$$\hat{H}_\circ |E_n^{(\circ)}\rangle = E_n^{(\circ)} |E_n^{(\circ)}\rangle, \quad \sum_n |E_n^{(\circ)}\rangle\langle E_n^{(\circ)}| = \hat{1}, \quad \langle E_m^{(\circ)}|E_n^{(\circ)}\rangle = \delta_{m,n}$$

آنگاه بردار حالت اولیه سیستم را می توان بر حسب آنها بسط داد یعنی $|\psi_\circ\rangle = \sum_n c_n |E_n^{(\circ)}\rangle$. البته اگر اختلالی در کار نباشد همچنان یک تحول زمانی پایه به فرم $\sum_n c_n e^{-iE_n^{(\circ)}t/\hbar} |E_n^{(\circ)}\rangle$ وجود خواهد داشت ولی با این وجود هر یک از احتمالات $\left|c_n e^{-iE_n^{(\circ)}t/\hbar}\right|^2 = |c_n|^2$ در طی زمان ثابت مانده و تغییر نمی کنند . مسئله اصلی در اینجا آن است که با اعمال اختلال وابسته به زمان حالت تغییر می کند و احتمالات به حالت های مجاور نشط می کنند و هدف محاسبه این نشط احتمالات است. یک راه جالب برای بررسی مسئله معرفی بردار حالت در تصویر برهم کنش است. اگر کت $|\psi(t)\rangle_S$ بردار حالت در تصویر شرودینگر باشد آنگاه بنابر تعریف بردار حالت در تصویر برهم کنش (نسبت به هامیلتونی پایه) برابر است با

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \tag{۱۳-۱}$$

اگر ضرایب بسط را برای بردار حالت طوری تعریف کنیم که $|\psi(t)\rangle_S \triangleq \sum_n c_n(t) e^{-iE_n^{(\circ)}t/\hbar} |E_n^{(\circ)}\rangle$ آنگاه تحول زمانی ضرایب $c_n(t)$ نسبتا آرام خواهد بود و عمدتا ناشی از جمله اختلال می باشد. اکنون می توان نوشت

$$\left|\psi(t)\right\rangle_I = e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar} \left|\psi(t)\right\rangle_S$$

$$\begin{aligned}\left|\psi(t)\right\rangle_I &= e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar} \sum_n c_n(t) e^{-iE_n^{(\circ)}t/\hbar} \left|E_n^{(\circ)}\right\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) \left|E_n^{(\circ)}\right\rangle\end{aligned}$$

اگر به عملگر یکانی $\hat{U}_\circ(t) = e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}$ به عنوان یک چرخش نگاه کنیم وارون آن $\hat{U}_\circ^\dagger(t) = e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar}$ چرخش در جهت معکوس را نشان می دهد. بنابر این بردار حالت در تصویر

برهم کنش چیزی شبیه بردار حالت از دید دستگاه بردار های پایه چرخان $\left\{\hat{U}_\circ^\dagger(t)|E_n^{(\circ)}\rangle\right\}$ است. بر حسب بردار حالت در نمایش برهم کنش می توان معادله شرودینگر را به فرم جدیدی نوشت. با تعریف جمله اختلال در تصویر برهم کنش به فرم

$$\hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar}\hat{V}(t)e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar} \tag{۱-۱٤}$$

می توان معادله وابسته به زمان شرودینگر را به شکل زیر نوشت

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle_S = \left\{\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}\right\}|\psi\rangle_S \;\;\&\;\; |\psi\rangle_S = e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi\rangle_I \mapsto \\
i\hbar\frac{d}{dt}\left\{e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi\rangle_I\right\} = \left\{\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}\right\}e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi\rangle_I \mapsto \\
\hat{H}_\circ e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi\rangle_I + e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle_I = \left\{\hat{H}_\circ + \lambda\hat{V}\right\}e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi\rangle_I \mapsto \\
i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle_I = e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar}\left(\lambda\hat{V}\right)e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi\rangle_I
\end{aligned}$$

بنابر این دوباره با معادله ای که در فرم شبیه معادله شرودینگر متعارف است می رسیم یعنی

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle_I = \lambda\hat{V}_I(t)|\psi\rangle_I \tag{۱-۱۵}$$

اگر به فرم ماتریسی عملگر اختلال در نمایش برهم کنش و در پایه $\{|E_n^{(\circ)}\rangle\}$ ها توجه کنیم

$$\begin{aligned}
\langle E_m^{(\circ)}|\hat{V}_I(t)|E_n^{(\circ)}\rangle &= \langle E_m^{(\circ)}|e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar}\hat{V}(t)e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|E_n^{(\circ)}\rangle \\
&= e^{iE_m^{(\circ)}t/\hbar}\langle E_m^{(\circ)}|\hat{V}(t)|E_n^{(\circ)}\rangle e^{-iE_n^{(\circ)}t/\hbar} \\
&= e^{-i\omega_{m,n}t}V_{m,n}(t)
\end{aligned}$$

معلوم می شود که اثر هامیلتونی پایه در آن از طریق تفاضل فرکانس ها ظاهر شده است. با توجه به تعریف بردار حالت در نمایش برهم کنش $c_n = \langle E_n^{(\circ)}|\psi\rangle_I$ لذا معادله(۱-۱۵) بر حسب این عناصر ماتریسی به فرم زیر خواهد بود

$$i\hbar\dot{c}_m = \lambda\sum_n e^{-i\omega_{m,n}t}V_{m,n}(t)c_n(t) \tag{۱-۱٦}$$

البته هنوز حل این دستگاه معادلات بجز در بعد های متناهی و کم مسئله ریاضی سختی محسوب می شود ولی بجز روش مطرح شده روش های تقریبی دیگری نیز برای تقریب زدن نشط دامنه احتمال وجود دارد.

۱-۳ سری دایسون

معادله شرودینگر در نمایش برهمکنش به فرم زیر است

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t)|\psi(t)\rangle_I \quad (۱-۱۷)$$

مشابه نمایش شرودینگر، برای این نمایش هم می توان عملگر یکانی مشابه با عملگر تحول زمانی به شکل زیر معرفی کرد

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle_I = \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle \quad (۱-۱۸)$$

که با توجه به(۱-۱۷) آشکارا باید در معادله زیر صدق کند

$$i\hbar\partial_t\hat{S}(t) = \hat{V}_I(t)\hat{S}(t), \quad \hat{S}(0) = \hat{1} \quad (۱-۱۹)$$

با انتگرالگیری از دوطرف این معادله بین زمانهای صفر و یک لحظه دلخواه داریم

$$\hat{S}(t) = \hat{1} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\int_0^t dt_1\hat{V}_I(t_1)\hat{S}(t_1) \quad (۱-۲۰)$$

سپس از کاربرد مکرر این رابطه سری برای $\hat{S}(t)$جواب سری دایسون زیر را بدست می آوریم

$$\hat{S}(t) = \hat{1} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\int_0^t dt_1\hat{V}_I(t_1) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2) + \cdots \quad (۱-۲۱)$$

اهمیت این جواب در آن است که جملات متوالی آن نسبت به اختلال دارای توان افزایشی است و لذا اثر آنها متوالیا کوچک و کوچکتر می شود. اگر سیستم از یک حالت خالص $|\psi_\circ\rangle$ شروع به تحول کند آنگاه

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi_\circ\rangle = e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}|\psi(t)\rangle_I = e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}\hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle \qquad (۲۲-۱)$$

بنابراین اگر در زمان نهایی یک مجموعه سازگار از مشاهده پذیرهای جابجا شونده (شامل هامیلتونی $\hat{H}_\circ$) که با کلاس اعداد کوانتمی $\tilde{k}_f$مشخص می شوند را اندازه بگیریم دامنه احتمال $\langle \tilde{k}_f | \psi(t)\rangle$برابر است با

$$\langle \tilde{k}_f | \psi(t)\rangle = \langle \tilde{k}_f | e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}\hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle = e^{-iE_f t/\hbar}\langle \tilde{k}_f | \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle \qquad (۲۳-۱)$$

البته همیشه احتمال تبهگنی وجود دارد و در این صورت بجای یکی، چند کت- بردار متعامد $|\tilde{k}_f\rangle$ وجود خواهد داشت که $E(\tilde{k}_f) = E_f$ خواهد بود. احتمال هر $\tilde{k}_f$ برابر است با

$$\left|\langle \tilde{k}_f | \psi(t)\rangle\right|^2 = \left|\langle \tilde{k}_f | \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle\right|^2 \qquad (۲۴-۱)$$

با تعریف $|\varphi(t)\rangle \triangleq \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle$این احتمال را می توان به فرم زیر نوشت

$$\begin{aligned}\left|\langle \tilde{k}_f | \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle\right|^2 &= \langle \tilde{k}_f | \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle\langle\psi_\circ|\hat{S}^\dagger(t)|\tilde{k}_f\rangle \\ &= \mathrm{Tr}\left\{|\tilde{k}_f\rangle\langle\tilde{k}_f||\varphi(t)\rangle\langle\varphi(t)|\right\}\end{aligned} \qquad (۲۵-۱)$$

بنابر این بر حسب عملگرهای چگالی $\hat{\rho}_f \triangleq |\tilde{k}_f\rangle\langle\tilde{k}_f|,\quad \hat{\rho}_\varphi(t) \triangleq |\varphi(t)\rangle\langle\varphi(t)|$ داریم

$$\left|\langle \tilde{k}_f | \hat{S}(t)|\psi_\circ\rangle\right|^2 = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_f\hat{\rho}_\varphi(t)\} \qquad (۲۶-۱)$$

اغلب چنین است که پتانسیل وابسته به زمان اختلال در مدت زمان محدودی عمل می کند و اندازه گیری بعد از عمل آن انجام می شود. بنابر این مثلا اگر از اختلال مرتبه اول استفاده کنیم داریم

$$|\varphi\rangle = |\psi_\circ\rangle + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\int_0^\tau dt_1\hat{V}_I(t_1)|\psi_\circ\rangle + \cdots, \qquad t > \tau \qquad (۲۷-۱)$$

و این برداری ثابت خواهد بود. بنابر این برای زمانهای $t > \tau$ ، عملگر چگالی $\hat{\rho}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ و اپراتور $\hat{S}$ ثابت هستند. چون $\hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar}\hat{V}(t)e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar}$ فرض اینکه حالت اولیه یک ویژه بردار $|\tilde{k}\rangle$ هامیلتونی است سهولت زیادی در محاسبه احتمال(۱-۲۶) ایجاد می کند. اگر فرض کنیم $|\tilde{k}_i\rangle = |\psi_\circ\rangle$آنگاه

$$
\begin{aligned}
\left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{S} \middle| \psi_\circ \right\rangle\right|^2 &= \left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{S} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2 \\
&= \left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{1} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\int_0^\tau dt \hat{V}_I(t) \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2 \\
&= \left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \left\{ \hat{1} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)\int_0^\tau dt e^{i\hat{H}_\circ t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_\circ t/\hbar} \right\} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau dt e^{i\omega_{fi} t} \left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{V}(t) \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2
\end{aligned}
\tag{۱-۲۸}
$$

که در آن $\omega_{fi} = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$. در بسیاری از برهم کنش ها، مانند برهم کنش اتم کوانتمی و موج الکترومغناطیسی در تقریب دوقطبی، پتانسیل اختلال به فرم $\hat{V}(t) = \lambda f(t)\hat{\mu}$ است که درآن $\hat{\mu}$ عملگری مستقل از زمان است و λ یک پارامتر کنترل کننده قدرت اختلال است که باید بطور مناسبی تعریف شود. در این حالت می توان نوشت

$$
\begin{aligned}
\int_0^\tau dt e^{i\omega_{fi} t} \left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{V}(t) \middle| \tilde{k}_i \right\rangle &= \lambda \left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{\mu} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle \int_0^\tau dt e^{i\omega_{fi} t} f(t) \\
&= \lambda \left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{\mu} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle \sqrt{2\pi}\tilde{f}(\omega_{fi})
\end{aligned}
$$

که در آن $\tilde{f}(\omega)$ تبدیل فوریه تابع $f(t)$ است. بنابراین احتمال گذار بین حالت های $\tilde{k}_i \leftrightarrow \tilde{k}_f$ برابر است با

$$
\left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{S} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\tilde{f}(\omega_{fi})\right|^2 \left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \lambda\hat{\mu} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2
\tag{۱-۲۹}
$$

پارامتر کنترل کننده قدرت اختلال را طوری تعریف می کنیم که تابع $\left|\tilde{f}(\omega)\right|^2$ به واحد بهنجار باشد. اگر اختلال یک اختلال شبه هارمونیک باشد که فرکانس مرکزی آن برابر $\omega_\circ$ است می توان نوشت

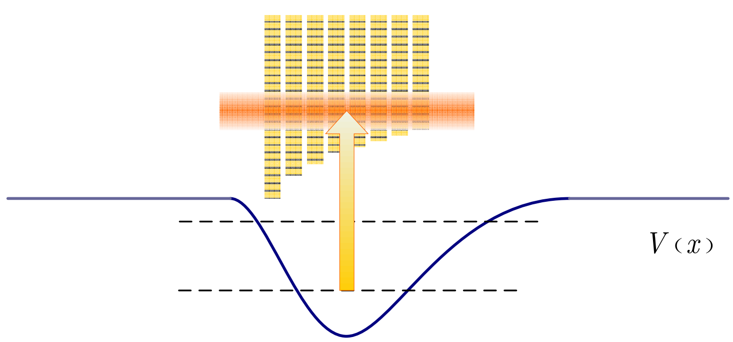
$$
\left|\tilde{f}(\omega)\right|^2 = \frac{1}{\sigma_\omega\sqrt{2\pi}}\exp\left\{-\frac{(\omega-\omega_\circ)^2}{2\sigma_\omega^2}\right\} \triangleq \Delta(\omega-\omega_\circ)
$$

آشکارا این تابع در حالت حدی $\sigma_\omega \to +0$ تبدیل به دلتای دیراک خواهد شد. بنابر این برای اختلال شبه هارمونیک داریم

$$
\left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \hat{S} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\left\langle \tilde{k}_f \middle| \lambda\hat{\mu} \middle| \tilde{k}_i \right\rangle\right|^2 \Delta(\omega_{fi}-\omega_\circ)
\tag{۱-۳۰}
$$

۱-٤ گذار به یک پیوستار حالت های نهایی

به عنوان مثال فرض کنید یک ذره کوانتمی یک بعدی در پتانسیلی به شکل(۱-۱) افتاده باشد. از مکانیک کوانتمی مقدماتی می دانیم چنین سیستمی دارای یک یا چند ویژه حالت مقید و پیوستاری از ویژه حالت های نامقید است. در این مثال ویژه حالت های نامقید تبهگن مرتبه دو هستند ولی در حالت کلی درجه تبهگنی آنها می تواند بزرگتر باشد ومعمولا این درجه تبهگنی با بزرگتر شدن انرژی بیشتر خواهد شد.



نمودار(۱-۱) ذره کوانتمی یک بعدی درچاه پتانسیل

در چنین مسایلی عملی تر آن است که به دنبال محاسبه احتمال گذار از یک حالت اولیه $|\tilde{k}_i\rangle$ با انرژی E_iبه پیوستاری از $|\tilde{k}_f\rangle$ ها در بازه انرژی (E_f, dE_f) باشیم. چون مجموعه $|\tilde{k}_f\rangle$هایی که در رابطه

$$\hat{H}_\circ|\tilde{k}_f\rangle = E'_f|\tilde{k}_f\rangle, \qquad E_f \le E'_f \le E_f + dE_f$$

صدق می کنند متعامدند تنها کافی است احتمالات (نه دامنه احتمال!) هر گذار منفرد به تک تک عناصر این مجموعه را با هم جمع کنیم. بنابر این

$$\text{Prob.}(\tilde{k}_i \to \{\tilde{k}_f\}) = \frac{2\pi}{\hbar^2}\sum_{\{\tilde{k}_f\}}\left|\langle\tilde{k}_f|\lambda\hat{\mu}|\tilde{k}_i\rangle\right|^2 \Delta(\omega_{fi} - \omega_\circ) \tag{۳۱-۱}$$

همچنین در این مسائل اغلب می توان فرض کرد $|\langle\tilde{k}_f|\lambda\hat{\mu}|\tilde{k}_i\rangle| \approx \lambda\mu|\langle\tilde{k}_f|\tilde{k}_i\rangle|$. اگر این عناصر ماتریسی تنها به انرژی حالت های نهایی(و نه سایر اعداد کوانتمی آنها) بستگی داشته باشد می