



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الشهيد حمه لخضر الوادي
كلية العلوم الدقيقة
قسم الفيزياء

رقم الترتيب:
رقم التسلسل:

مذكرة تخرج لنيل شهادة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة
فرع: الفيزياء
تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاع و طاقة

من إعداد: اللهوشي شيماء
الموضوع:

التكاملات على المسار وتطبيقاتها في الأنظمة الكمية المبددة

نوقشت يوم: 2019/06/22

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا

مناقشا

مؤطرا

أستاذ مساعد أ

أستاذ محاضراً

أستاذ

بوراس ليلي

ضيف الله مصباح

ضو جمال

الموسم الجامعي: 2019/2018

الملخص

يقدم التكامل على المسار أداةً رياضية ووجهة نظر بديلة لفهم ودراسة ميكانيك الكم. بالإضافة إلى تطبيقاته الكثيرة والمعروفة لدراسة الظواهر الكمية في الأنظمة المغلقة على كافة المستويات، أثبت التكامل على المسار أنه أداة فعالة وأنيقة في آن واحد لمعالجة الأنظمة المبددة أيضاً، حيث أن ظاهرة التبدد ناتجة عن وصل النظام بمحيطه والذي يتسبب في إنتقال غير عكوس للطاقة من النظام إلى المحيط، تخامد وتأرجح النظام بالإضافة إلى ظاهرة تلاشي الترابط .

في هذه المذكرة نقدم مراجعة لطريقة التكامل على المسار كأداة رياضية بديلة لدراسة ميكانيك الكم، ونستعملها لدراسة نموذج للأنظمة المبددة، وهذا بعد معالجته باستعمال تمثيل هايزينبيرغ. هذا النموذج الذي ستنحور حوله دراستنا يتمثل أساساً في نظام كمي مرتبط مع محيطه، حيث المحيط يُؤخذ على أنه خزان حراري من الهزات التوافقية. بعد التخلص من درجات حرية المحيط، عبر مكاملتها في صياغة التكامل على المسار، نحصل على دالة فعل فعالة تصف الحالة الديناميكية للنظام المفتوح بواسطة مصفوفة كثافة مختزلة معبر عنها بواسطة دالة الفعل الجديدة (الفعالة).

الكلمات المفتاحية:

التكامل على المسار، التبدد الكمي، المنتشر، الوصل، التخامد، التأرجح، الخزان الإهتزازي الحراري، التأثير الدالي، دالة الفعل الفعال، النظام الكمي المفتوح، مصفوفة كثافة الإتران المختزلة.

Abstract

Path integral is a mathematical tool which offers an alternative view point for quantum mechanics. In addition to its wide and well known use to study quantum phenomena in closed systems at all levels, it has proven to be a powerful and elegant tool to investigate dissipative systems as well. Dissipation results from the coupling of the system to its environment which causes an irreversible transition of energy from the system to the environment, damping and fluctuating of the system and decoherence phenomenon.

In this dissertation we review the path integral approach to quantum mechanics and employ it to study a specific dissipative model, after describing it within Heisenberg picture. The model on which we focus is a system coupled to its environment taken to be thermal reservoir of harmonic oscillators. By integrating out the environment degrees of freedom an effective action weighting the paths of the open quantum system in the functional integral description is obtained, thereby describing the state and dynamics of this system from the equilibrium reduced density matrix constructed using this action.

Keyword: path integral, quantum dissipation, propagator, coupling, damping, fluctuating, thermal oscillated reservoir, influence functional, effective action, open quantum system, equilibrium reduced density matrix.

إهداء

يشرفني أن أهدي هذا العمل إلى زهرة حياتي ونورها أمي وأبي العزيزين أمد الله في عمريهما بالصالحات وإلى
إخوتي وأخواتي

شكر و عرفان

الحمد لله الذي هدانا لهذا وما كنا لنهتدي لولا أن هدانا الله، بداية أشكر وأحمد الله عز وجل على جميل إحسانه وحسن توفيقه لي في إنجاز هذا العمل المتواضع، الذي أرجو أن يكون مقبولا عنده.

كما أتقدم ببالغ الشكر والتقدير إلى من علمني وأرشدني بكل إخلاص دون ملل أو كلل وبث فيا روح البحث العلمي كما خصص وقته وجهده دون أن يبخل علي ولو للحظة بنصائحه وتوجيهاته التي كانت نعم السند لي في مسيرتي العلمية، إلى الشمعة المنيرة الأستاذ "جمال ضو" الذي أسأل الله أن يجزيه خير الجزاء ويديمه ذخرا لطلبة العلم.

كما أتقدم بمجيز الشكر والإمتنان للسادة أعضاء لجنة المناقشة لتكرمهم بتخصيص جزء من وقتهم لهذا العمل، وقسم الفيزياء بجامعة حمه لخضر، لكل من ساعدني وأرشدني، ولكل من قدم لي يد العون ولو بكلمة طيبة.

ولله الحمد من قبل ومن بعد

الفهرس

iv

قائمة الأشكال

1	المقدمة العامة	1
5	التكامل على المسار (Path Integral):	2
5	2.1 تمهيد:	2.1
5	2.2 التعريف بالمنتشر (Propagator) كأداة التكامل على المسار:	2.2
7	2.3 تمثيل التكامل على المسار لميكانيك الكم:	2.3
10	2.4 النهاية الكلاسيكية:	2.4
10	2.5 تكافؤ التكامل على المسار مع معادلة شرودينغر:	2.5
12	2.6 معالجة بعض المسائل الأساسية والتموجية في ميكانيك الكم بواسطة التكامل على المسار:	2.6
12	2.6.1 معالجة مسألة الجسم الحر:	2.6.1
14	2.6.2 معالجة مسألة هزاز توافقي مدفوع (Driven Harmonic Oscillator):	2.6.2
19	3 وصف الأنظمة المبددة بواسطة ميكانيك الكم:	3
19	3.1 تمهيد:	3.1
19	3.2 هاميلتون جملة النظام مع المحيط الموصول به:	3.2
21	3.3 إقصاء المحيط (الخزان الإهتزازي الحراري):	3.3
22	3.4 إدراج الكثافة الطيفية لهزازات المحيط:	3.4
27	4 تطبيق أسلوب التكامل على المسار في دراسة الأنظمة الكمية المبددة:	4
27	4.1 تمهيد:	4.1
27	4.2 تمثيل مصفوفة الكثافة المتطورة زمنيا بدلالة المنتشر:	4.2
28	4.3 تمثيل مصفوفة كثافة الإتران بواسطة التكامل على المسار:	4.3
30	4.4 إقصاء المحيط:	4.4
35	4.5 صياغة عبارة دالة الفعل الفعالة:	4.5
35	4.6 نتائج وتطبيقات معالجة الأنظمة الكمية المبددة بواسطة التكامل على المسار:	4.6
38	5 الخاتمة العامة	5
40	Appendix	ا
40	1.ا حل معادلة حركة المحيط التفاضلية:	1.ا
	2.ا إثبات إنعدام متوسط قوة التآرج المعطى بواسطة مصفوفة كثافة الإتران للمحيط بإعتبار الوصل	2.ا
43	مع المحيط:	

44	إثبات إنعدام المتوسط الحراري للقوة $\zeta(t)$ بإعتبار المحيط فقط:	3.ا
44	إيجاد عبارة دالة ربط التشويش:	4.ا
46	نشر نواة التكامل في شكل سلسلة فوري:	5.ا
47	إثبات العلاقة (4.37):	6.ا
48	إنجاز تحويل لابلاس لنواة التخامد:	7.ا

50

المراجع

قائمة الأشكال

2.1	تمثيل المنتشرات الناتجة عن تفكيك المنتشر $K(x, t, x', 0)$ نتيجة خاصية (semigroup) في	
6	فضاء الزمان والمكان [3].
9	تمثيل بعض المسارات المساهمة في سعة الانتقال [3].
20	رسم تخطيطي لنظام موصول بمحيطه [18].
23	هزاز LC خاضع لتخامد أومي نتيجة مقاومة R [3].

المقدمة العامة

الفصل 1

المقدمة العامة

لم يعد خفياً على أحد في مجال الفيزياء النجاح الهائل واللامع لميكانيك الكم في تفسير الظواهر الكمية بما يتطابق مع النتائج التجريبية على أرض الواقع، رغم كل التشكيكات والجدالات التي لا يزال يتعرض لها حول التنبؤات والقياسات بشكل رئيسي. فلا يوجد تناقض بينه كنظرية من أجل العالم المجهرى و بين العالم العيانى، بل يسمح بفهم السلوك الكلاسيكي ضمنه.

فيكانيك الكم الإحصائي الذي يعد من أهم فروع ميكانيك الكم، هو مجال غني جدا يعالج ويفسر بدوره عديد الأنظمة والظواهر الحرارية الكمية ويُعرف بالنظرية المتعاملة مع السلوك الديناميكي للتأرجحات الكمية التلقائية. فظاهرة التبدد "dissipation"، على وجه الخصوص، طُرحت مشكلة معالجتها منذ بدايات ميكانيك الكم [1]، وهي ظاهرة كلية الوجود في الأنظمة الحقيقية [2]، تحدث نتيجة وصل النظام بحيطه الذي يُعتبر أنه متوازن حراريا عموما مما يؤدي إلى تولد قوة تأرجحية تسبب في تأرجحات درجة حرية النظام إضافة إلى إنتقال الطاقة بطريقة غير عكوسة من النظام إلى المحيط، بينما يحدث هذين التأثيرين في كل من الأنظمة الكمية والكلاسيكية. يوجد تأثير ثالث للوصل بالمحيط خاص فقط بالعالم الكمي يتمثل في هدم التراكب المترابط للحالات الكمية في عملية تدعى بتلاشي الترابط "decoherence" نتيجة التشابك الكمي "entanglement" بين النظام ودرجات حرية المحيط. هذا التأثير مهم في تنفيذ الحواسيب الكمية [3]. فظاهرة التشابك الكمي موجودة في كل مكان لأن المعلومات حول التداخل الكمي تحمل بعيدا في بعض الأشكال الفيزيائية إلى ما يحيط بها. بمعنى أن الوصل المحيطي يتصرف كأداة قياس مستمرة تقود إلى تدمير متواصل لإرتباطات الطور [1].

نظرا لأهمية هذه الظاهرة التبددية توالى المحاولات لتفسيرها ومعالجتها. ففي ميكانيك الكم الكلاسيكي تم وصف النظام المتبدد بالإعتماد على معادلة (Langevin) التي يظهر فيها تأثير النظام في شكل قوة إحتكاك وقوة تأرجحية، حيث شكلت النتائج الكلاسيكية الأساس لدراسة الحركة البراونية من خلال دراسات كل من 'Einstein' و 'Langevin' و 'Smoluchowski'. وتم الوصول إلى معادلة (Langevin) المعممة لكنها بدت كمعادلة ظواهرية تملك مجال مقيد من الصحة لا يمكنها أن تصمد إلا من أجل أزمنة طويلة مقارنة بأزمنة الذاكرة، ومن أجل درجات الحرارة المنخفضة تم توقع وجوب حدوث وظهور كل التأثيرات الكمية فيها، كما أن هذا الوصف للتخادم لم يعتبر التفاصيل المجهرية لدرجات الحرية ووصلها، بذلك عجز الكلاسيك عن وصف الأنظمة المبددة. لذلك تم اللجوء إلى الكم وجاءت محاولات عديدة للتكميم من بين أول الباحثين الذين إتبعوا هذا الطريق هم 'Kanai', 'Caldirola' الذين استعملوا ككرة متعلقة بالزمن بطريقة تدخل حد الإحتكاك في معادلة الحركة الكلاسيكية لكن هذه العملية لا تعالج جيدا مبدأ الإرتياب. منذ أعمال 'Pauli' عام 1921 طورت أساليب متنوعة لوصف التبدد في ميكانيك

الكم بشكل متماسك. المحاولات المتنوعة تنقسم إلى ثلاث فئات أساسية: إحداهما إعتدلت على تعديل عملية التكميم، الأخرى استعملت أسلوب (النظام + المحيط) والثالثة استخدمت معادلة شرودينغر العشوائية (Stochastic Schrödinger Equation) من أجل حالة الأشعة. من بين المحاولين ضمن الفئة الأولى 'Dekker' إقترح نظرية لعملية التعميم القانوني من أجل المتغيرات المعقدة، أي إعادة تشكيل معادلة (Fokker-Plank) من أجل دالة توزيع 'Wigner'، رغم ذلك بعض الإقتراضيات في النظرية بدت مشكوك فيها مثل تمثيل منابع الفوضى في معادلة الموضع والعزم. 'Kostin' قدم نظرية مع معادلة شرودينغر غير الخطية. نفس المعادلة وجدت لاحقاً بواسطة 'Yasue' باستعمال عملية تكميم نيلسون (Nelson) العشوائية. لكن وجد أن هذه النظرية تنتهك مبدأ التراكب، وتمنح أيضاً بعض النتائج المرعبة مثل حالات التخادم المستقرة بالإضافة إلى أن حقيقة أن الأساسيات النظرية لها غير واضحة كلياً. فهذه الأساليب يمكنها على الأكثر أن تمنح نتائج فقط من أجل الحالات الخاصة جداً، مثل الأنظمة الخطية المتخادمة بشكل ضعيف. إذن كل هذه المحاولات للمجموعة الأولى تم إعتبارها فاشلة ولا يمكن الإعتماد عليها. أما الفئة الثالثة فقد شملت محاولات عديدة لمجموعة من العلماء (Gisin, Percival, Dalibard, Castin, Zoller, Breuer و Petruccione وغيرهم) إعتدلت بشكل رئيسي على إقتراض ديناميك غير هاميلتوني كتعديل أساسي في معادلة شرودينغر (Schrödinger) لشرح الإنهيار العشوائي التلقائي لدالة الموجة وظهور عالم كلاسيكي، لكن رافقتها تعديلات وتصحيحات وواجهت تعقيدات فإعتدلت على طرق النمذجة والمحاكاة العددية أهمها محاكاة مونت كارلو (Monte-Carlo Simulation) لدالة الموجة. الأسلوب الطبيعي الأكثر نجاح هو الذي يعتبر النظام مع المحيط كمكونات لنظام كلي محفوظ لوصف ظاهرة التخادم والذي يمتثل لقواعد التكميم القياسية. الطرق المعتمدة على أسلوب (النظام + المحيط) تنقسم عموماً إلى قسمين: قسم يعمل بتصوير شرودينغر، حيث توصف ديناميكية النظام إصطلاحياً بدلالة المعادلات الأساسية الكمية المعممة من أجل مصفوفة الكثافة المختزلة، والقسم الآخر يعمل بتصوير هايزنبرغ (Heisenberg) والذي يعطى فيه الوصف الديناميكي بدلالة معادلات (Langevin) المعممة من أجل المؤثرات المتعلقة بالموضوع والخاصة بالنظام المختزل [1].

من جهة أخرى، ظهرت أداة تعرض وجهة نظر بديلة في ميكانيك الكم بشكل معمم. تم إقتراحها وتقديمها أولاً من قبل 'Wigner' كوسيلة لوصف الخصائص الإحصائية للحركة البراونية، التي يمكن إعتبارها نهاية مستمرة للشبي الماركوفي العشوائي (Markovian Random Walk) مع خطوات زمنية متقطعة، بإلهام من عمل أينشتاين المشهور، ومن ثم أضاف ديراك تعديلات عليها لكن كلا المحاولتين إشملت على تناقضات ونقائص. وفي عام 1940 قام فاينمان (Feynman) بتطوير طريقة التكامل على المسار وصياغته بشكله النهائي المعتمد. فأصبحت هذه الطريقة المفتاح للفهم الأعمق لنظرية الحقل الكهومي وتطبيقاتها التي إمتدت من الجسم الفيزيائي إلى إنتقالات الطور أو خصائص الغازات الكمية. حيث يعتبر التكامل الدالي أداة رياضية قوية من أجل الدراسة الكمية، فهو يؤكد المراسلة بين الميكانيك الكلاسيكي والكمي بشكل واضح حيث تقود بذلك إلى فهم حدسي وحسابات بسيطة للكميات الفيزيائية في النهاية الكلاسيكية. حتى وإن بدا رياضياً معقداً أكثر من المعادلات التفاضلية الجزئية، إلا أنها تتمكن بتفوق من دراسة الأنظمة بدرجات حرية عديدة أين صياغة شرودينغر تكون أقل إفادة. بذلك تسمح بالإنتقال من الميكانيك الكمي بعدد قليل من الأجسام إلى نظرية الحقل الكهومي أو الفيزياء الإحصائية [4].

نظراً لنجاح وفعالية أسلوب التكامل على المسار في معالجة الأنظمة الكمية خاصة الإحصائية منها، تم إعتماده لوصف الأنظمة الكمية المبددة بواسطة فاينمان وفرنون (Vernon) من أجل درجات الحرارة المنخفضة والتخادم القوي عشوائياً، ولاقى هذا العمل مؤخرًا نجاحاً وإهتماماً كبيراً [5]. مما أثبت قوة وصف التكامل على المسار من

أجل حالات الوصل القوي مثل الأنظمة الحالة الصلبة وغيرها من التطبيقات المختلفة، حيث شكل هذا الأسلوب المطبق في المادة المكثفة والفيزياء الكيميائية، التي تلعب فيها ظاهرة التبدد دورا كبيرا لأنه لا يوجد تقريبا نظام معزول كليا عن ما يحيط به، صناعة كبيرة في العقد أو العقدتين الماضيين [1-3]. لذلك أصبح التعرف على أداة التكامل على المسار ومميزاتها عمليا وكيفية تطبيقها في معالجة الأنظمة الكمية المبددة أمرا ضروريا وهذا هو الهدف من هذا العمل.

خلال هذا العمل سيتم تقديم الإطار الرياضي و الفيزيائي لأسلوب التكامل على المسار وكيفية استخدامها في وصف الأنظمة الكمية المبددة مع محاولة الإحاطة بالموضوع من كل جوانبه بشكل متكامل قدر الإمكان مع التدعيم بالأمثلة وإرفاق أغلب العلاقات بالبرهان. العمل تمت هيكلته وفق خمس فصول:

الفصل الأول يتمثل في مقدمة عامة للموضوع.

الفصل الثاني التعريف بالتكامل على المسار وإظهار قوة وجمال هذا الأسلوب، من خلال الدراسة المتكاملة له من ناحية كيفية استخلاص صيغته، تمثيله لميكانيك الكم، دراسة تصرفه في النهاية الكلاسيكية، تأكيد تكافئه مع تصور شرودينغر بالإضافة إلى تطبيقاته في بعض المسائل الأساسية القابلة للحل بدقة والتي تتمثل في مسألة الجسم الحر ومسألة الهزاز التوافقي المدفوع (driven harmonic oscillator).

الفصل الثالث يهتم بوصف الأنظمة المبددة بواسطة ميكانيك الكم وكيفية دراسته لها بداية بتحديد النموذج المختار للنظام الموصول بحيطه الممثل بخزان حراري، ومن ثم إقصاء هذا الأخير للحصول على وصف فعال للنظام المبدد من خلال معادلة الحركة الفعالة للنظام إلى غاية وصف المقادير المهمة في الظاهرة بدلالة الكثافة الطيفية لهزازات المحيط وذلك للتمكن من مناقشة سلوكها في مختلف الحالات.

الفصل الرابع يُعنى بتوضيح كيفية تطبيق صيغة التكامل على المسار في دراسة الأنظمة الكمية المبددة إنطلاقا من نموذج النظام الموصول بحيطه الذي يُقضى للحصول على وصف مختزل للنظام المبدد لوحده مما يتركنا مع دالة الفعل الفعالة الذي يشكل أساس وصف التكامل على المسار للتبدد بالإضافة إلى تأكيد وتوضيح نتائج هذه المعالجة وتطبيقاتها المختلفة.

أما الفصل الأخير فيتمثل في خلاصة عامة للموضوع.

الفصل الثاني:

التكامل على المسار

(Path Integral)

الفصل 2

التكامل على المسار (Path Integral):

2.1 تمهيد:

أكثر الأساليب استعمالاً وتدرّساً لميكانيك الكم غير الواقعي تعتمد على معادلة شرودينغر التي تملك صلة قوية بصياغة الهاميلتون للميكانيك الكلاسيكي. عارضات بواسون غير المعدومة بين الموضع و كمية الحركة في الميكانيك الكلاسيكي تقود الى المؤثرات غير المتبادلة في ميكانيك الكم. فدالة الهاميلتون تتحول الى مؤثر الهاملتون وهو العنصر الأساسي في معادلة شرودينغر. من أكثر المهام أهمية هو إيجاد الدوال الذاتية لمؤثر الهاميلتون والقيم الذاتية المرافقة. فتحليل حالة إلى الدوال الذاتية يسمح بتحديد تطورها الزمني [3].

كبدليل توجد صياغة لميكانيك الكم تعتمد على صيغة لاغرانج للميكانيك الكلاسيكي مع الفعل كتصور أساسي، هذا الأسلوب الذي تم تطويره من قبل فاينمان (Feynman) خلال عام (1940) [6,7], يتجنب استعمال المؤثرات، مع أن هذا لا يعني بالضرورة أن حل مشاكل ميكانيك الكم يصبح أبسطاً. بدلا من إيجاد الدوال الذاتية للهاملتون يجب تقييم تكامل دالي الذي يمنح مباشرة ما يُدعى ب (propagator) المطلوب لتحديد ديناميك نظام كمي. بما أن العلاقة بين صياغة فاينمان والميكانيك الكلاسيكي قريبة جدا، فإن صيغة التكامل على المسار غالبا تملك أهمية لتوفير أسلوب أكثر حداثة، وهذا ما سنحاول إثباته في العناصر التالية [3].

2.2 التعريف بالمنتشر (Propagator) كأداة التكامل على المسار:

في ميكانيك الكم نحتاج غالبا لتعيين $|\psi(t)\rangle$ لمعادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

حيث H هو الهاميلتون الذي يصف النظام.
حل المعادلة (2.1) يكتب من الشكل :

$$|\psi(t)\rangle = \tau \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^\infty H(t') dt'\right) |\psi(0)\rangle \quad (2.2)$$

حيث τ هو المؤثر المرتب للزمن لأن مؤثرات الهاميلتون في أزمنة مختلفة لا تتبادل عموما. فيما يأتي سوف نلتزم بحل الهاميلتون غير المتعلق بالزمن حيث الحل (2.2) يبسط إلى :

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} Ht\right) |\psi(0)\rangle \quad (2.3)$$

كما يتوضح من معاينة العلاقتين (2.2) و (2.3)، حل معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن يحتوي على جزأين: الحالة الابتدائية $|\psi(0)\rangle$ التي هي عبارة عن شرط ابتدائي، وما يُدعى بالمنتشر الذي هو عبارة عن مؤثر يحوي كل المعلومات المطلوبة لتحديد التطور الزمني.

بكتابة العلاقة (2.3) في أساس الموضع نجد:

$$\psi(x, t) = \int dx' \langle x | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} Ht\right) | x' \rangle \langle x' | \psi(0) \rangle \quad (2.4)$$

$$\psi(x, t) = \int dx' k(x, t, x', 0) \psi(x', 0) \quad (2.5)$$

حيث المنتشر يكتب كالتالي:

$$k(x, t, x', 0) = \langle x | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} Ht\right) | x' \rangle \quad (2.6)$$

$$k(x, t, x', 0) = \langle x | U(t, 0) | x' \rangle \quad (2.7)$$

حيث $U(t, 0)$ هو مؤثر التطور حالة النظام في الزمان. باختصار المنتشر هو الأداة الأساسية لصياغة فاينمان لميكانيك الكم. قبل مناقشة تمثيل التكامل على المسار للمنتشر (propagator) من المفيد الإطلاع على خصائصه:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t, 0) |\psi(0)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= U(t, t_1) |\psi(t_1)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= U(t, t_1) U(t_1, 0) |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

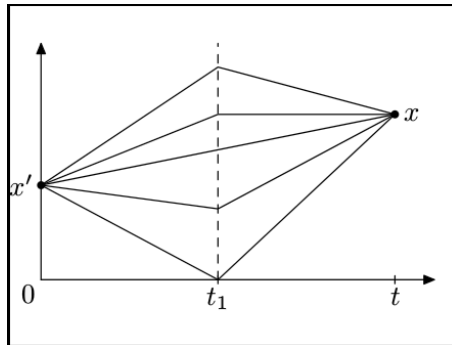
وبذلك تكتب دالة الحالة في أساس الموضع كالتالي:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x | \psi(t) \rangle = \int dx' \langle x | U(t, t_1) U(t_1, 0) | x' \rangle \langle x' | \psi(0) \rangle \\ \psi(x, t) &= \int dx' \int dx'' k(x, t, x'', t_1) k(x'', t_1, x', 0) \psi(x', 0) \end{aligned} \quad (2.9)$$

وبمقارنة (2.5) و (2.8) نلاحظ خاصية (semigroup) للمنتشر:

$$k(x, t, x', 0) = \int dx'' k(x, t, x'', t_1) k(x'', t_1, x', 0) \quad (2.10)$$

فمن خلال خاصية (semigroup) للمنتشر $k(x, t, x', 0)$ يمكن أن يتفكك إلى منتشرات قادمة من زمن معين t_1 ونقطة وسيطية x'' ، والتي تستمر إلى غاية النقطة النهائية x .



شكل 2.1: تمثيل المنتشرات الناتجة عن تفكيك المنتشر $K(x, t, x', 0)$ نتيجة خاصية (semigroup) في فضاء الزمان والمكان [3].

كما هو ملاحظ في الشكل (2.1) المنتشرات صورت في الشكل بخطوط مستقيمة تربط النقاط في الفضاء (الزمان والمكان). في الزمن الوسيط يجب المكاملة على كل المواضع x'' ، هذه الملاحظة مفيدة في صياغة تكامل المسار لاحقاً.

هذا المنتشر يملك كل المعلومات الكاملة بخصوص الطاقات المميزة والحالات المميزة الموافقة. من (2.6) نجد:

$$\begin{aligned} k(x, t, x', 0) &= \langle x | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} Ht\right) | x' \rangle \\ k(x, t, x', 0) &= \sum_n \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E_n t\right) \langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle \\ k(x, t, x', 0) &= \sum_n \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(x) \psi_n^*(x') \end{aligned} \quad (2.11)$$

وبهذا يتم التأكيد على أن المنتشر هو حزمة جيدة تحمل كل المعلومات الديناميكية لنظام كمي. في هذه المرحلة سوف نعرف دالة غرين المتأخرة (The Retarded Green Function):

$$G_r(x, t, x', 0) = K(x, t, x', 0) \theta(t) \quad (2.12)$$

حيث $\theta(t)$ دالة درجية (heaviside function) تساوي إلى الواحد لما يكون المتغير الزمني موجب وخلاف ذلك تساوي إلى الصفر، بالقيام بتحويل فوري نتحصل على التمثيل الطيفي:

$$G_r(x, x', E) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^{+\infty} dt \exp\left(\frac{-i}{\hbar} Et\right) G_r(t) \quad (2.13)$$

$$G_r(x, x', E) = \sum_n \frac{\psi_n(x) \psi_n^*(x')}{E - E_n + i\epsilon} \quad (2.14)$$

حيث ϵ عدد موجب لامتناهي في الصغر.

بالاعتماد على (2.13): أقطاب دلة غرين المتأخرة المتعلقة بالطاقة تحدد الطاقات الخاصة بينما الباقي الموافق يمكن من خلاله إيجاد الدوال الخاصة في المواضع x و x' [3].

2.3 تمثيل التكامل على المسار لميكانيك الكم:

دون الخوض معمقا في التفاصيل الرياضية. نريد استخراج تمثيل التكامل على المسار المنتشر. الفكرة الأساسية هي تفكيك زمن التقدم t إلى N جزء من المجالات الصغيرة ($\Delta t = t_f - t_i = t/N$) أين سنأخذ النهاية ($N \rightarrow \infty$). نرسم للطاقة الحركية والكامنة ب T و V على الترتيب، فنجد:

$$\exp\left(\frac{-i}{\hbar} Ht\right) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} (T + V) \Delta t\right)^N \quad (2.15)$$

للتبسيط تم افتراض أن الهاميلتون غير متعلق بالزمن رغم أن الخطوات التالية لصياغة تكامل المسار يمكن تعميمها للحالة المتعلقة بالزمن. يجب تحليل مؤثر التطور الزمني التقصير $U(\Delta t)$ إلى جزء يحوي الطاقة الحركية و جزء نحر يحوي الطاقة الكامنة. بما أن المؤثرين السابقين لا يتبادلان فإنه يتم التحليل على الشكل التالي بالاعتماد على نشر صياغة بايكر هاسدورف (Baker Hausdorff):

$$\exp\left(\frac{-i}{\hbar} (T + V) \Delta t\right) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} T \Delta t\right) \exp\left(\frac{-i}{\hbar} V \Delta t\right) + \frac{1}{\hbar^2} [T, V] \Delta t^2 \quad (2.16)$$

يإهمال بقية العناصر من الرتبة الأكبر من (Δt^2) وذلك بإعتبار $(\Delta t \rightarrow 0)$ يمكن إهمال توزيع المبدلات بإعتبار (Trotter Formula):

$$\exp\left(\frac{-i}{\hbar}(T + V)t\right) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (U(\Delta t))^N \quad (2.17)$$

حيث:

$$U(\Delta t) \simeq \exp\left(\frac{-i}{\hbar}T\Delta t\right) \exp\left(\frac{-i}{\hbar}V\Delta t\right) \quad (2.18)$$

إذن يكتب المنتشر كالتالي:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{j=1}^{N-1} dx_j \right) \langle x_f | U(\Delta t) | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_1 | U(\Delta t) | x_i \rangle \quad (2.19)$$

نقوم بحساب أحد المنتشرات وليكن:

$$\langle x_{j+1} | U(\Delta t) | x_j \rangle = \int_0^{+\infty} dp \langle x_{j+1} | p \rangle \langle p | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) | x_j \rangle \quad (2.20)$$

حيث:

$$\langle p | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) | x_j \rangle = \langle p | (1 - \frac{i}{\hbar}H\Delta t + 0(\Delta t^2)) | x_j \rangle$$

بأخذ:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

ومنه:

$$\begin{aligned} \langle p | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) | x_j \rangle &= (1 - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t - \frac{i}{\hbar} V(x_j) \Delta t + 0(\Delta t^2)) \langle p | x_j \rangle \\ \langle p | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) | x_j \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{-i}{\hbar}(px_j + \frac{p^2}{2m}\Delta t + V(x_j)\Delta t)\right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

بتعويض (2.21) في (2.20) نجد:

$$\langle x_{j+1} | U(\Delta t) | x_j \rangle = \int_0^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px_{j+1}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(px_j + \frac{p^2}{2m}\Delta t + V(x_j)\Delta t)\right)$$

هذا التكامل على كمية الحركة ما هو إلا تكامل فريسنل (Fresnel) الذي يتم حله كالتالي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-iax^2) = \sqrt{\frac{\pi}{ia}} \quad (2.22)$$

حيث a ثابت موجب.

إذن:

$$\langle x_{j+1} | U(\Delta t) | x_j \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\Delta t} (x_{j+1} - x_j)^2 - V(x_j) \Delta t \right)\right) \quad (2.23)$$

وبهذا نتوصل للشكل التالي المنتشر:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \right)^N \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \times \exp \left(\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i}{\hbar} \Delta t \left(\frac{m}{2} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\Delta t^2} - V(x_j) \right) \right) \quad (2.24)$$

بوضع:

$$\dot{x}^2 = (x_{j+1} - x_j)^2 / \Delta t^2$$

في النهاية ($N \rightarrow +\infty$) التكامل على كل المواضع لكل مجال زمني أي مواضع النقاط الوسيطة بين x_f و x_i يمكن القول بأنه تكامل على كل المسارات الممكنة، وأس الدالة الأسية يصبح تكامل دالة لاغرانج بالنسبة للزمن أي الفعل لكل مسار، ومنه نكتب:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \int \mathcal{D}x \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} ds \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) \right) \quad (2.25)$$

مع العلم حيث أن تابع لاغرانج يعطى كالتالي:

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \quad (2.26)$$

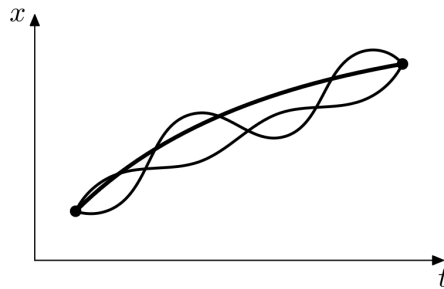
إذن:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \int \mathcal{D}x \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x] \right) \quad (2.27)$$

وهذا هو الشكل النهائي لتكامل المسار لفائمان لسعة الإنتقال في ميكانيك الكم. حيث $S[x]$ دالة الفعل معرفة بالشكل:

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} ds \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) \quad (2.28)$$

و $\mathcal{D}x$ هو قياس التكامل على المسار (Path integral measure).



شكل 2.2: تمثيل بعض المسارات المساهمة في سعة الإنتقال [3].

الخطوط الثلاثة في الشكل (2.2) توضح لانهاية المسارات المحققة للشروط الحدودية $x(0) = x_i$ و $x(t) = x_f$, حيث يمثل الخط العريض المسار الكلاسيكي الناتج عن حل معادلة الحركة الكلاسيكية أما المسارين الآخرين ناتجين عن تأرجحات كمية حول المسار الكلاسيكي. إذن تكامل المسار لفانيمان ببساطة يقول أن سعة الانتقال بين حالة البداية والنهاية هي الجمع على كل المسارات الرابطة بين النقطتين لمعامل الوزن $\exp(\frac{i}{\hbar}S[x])$. رغم أننا إشتقنا تمثيل تكامل المسار لسعة الانتقال لفئة معينة من الهاميلتونات، إلا أن العبارة على العموم تبقى نفسها، فبالنسبة للهاملتونات التي ليست تربيعية بالنسبة لكمية الحركة يجب الحذر ببساطة من تعريف قياس التكامل Dx [9,8,3].

2.4 النهاية الكلاسيكية:

كلاسيكيا نعلم أن الفعل الكلاسيكي يحدد الديناميك الكلاسيكي لأنه حل للمعادلة الكلاسيكية للحركة، في حين أنه في الميكانيك الكم كل المسارات تشارك في سعة الانتقال.

السؤال الذي نريد فهمه هو كيف أنه من بين كل المسارات المساهمة في سعة الانتقال، فقط المسار الكلاسيكي يتفرد في النهاية الكلاسيكية أي لما $(\hbar \rightarrow 0)$. فمعامل الوزن في التكامل على المسار أي: $(\exp(\frac{i}{\hbar}S[x]))$ ، هو طور مضاعف بقيمة كبيرة في النهاية الكلاسيكية ومنه رياضيا يتضح إذن أن المساهمة المهيمنة في التكامل على المسار أي في سعة الانتقال سوف تنشأ من المسارات القريبة من المسار الذي يبلغ عنده معامل الطور حده الأدنى، أي المسارات القريبة من تلك التي تحقق: $\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0$ ، بمعنى آخر المسارات القريبة من المسار الكلاسيكي.

للتوضيح نعتبر مسار ما بحيث يكون بعيد عن المسار الكلاسيكي، فبما أن \hbar صغير، فإن الطور عبر هذا المسار سيكون كبير من أجل المسارات القريبة من هذا المسار بشكل لا نهائي، الفعل سيختلف قليلا، لكن بما أنه مضاعف بثابت كبير جدا سينتج طور كبير. كل مثل هذه المسارات ناتج جمعها مع بعضها سيكون في المتوسط معدوم. بالقرب من المسارات الكلاسيكية الفعل يكون مستقر. إذن المسارات القريبة بشكل لا نهائي من المسار التقليدي الفعل فيها لن يتغير وستجمع هذه المسارات إلى بعضها بشكل متماسك لتعطي المساهمة المهيمنة لما $(\hbar \rightarrow 0)$ بهذا يتفرد المسار الكلاسيكي في النهاية الكلاسيكية لا لأنه يساهم بأكبر مساهمة في سعة الانتقال بل لأن المسارات القريبة منه تجمع مع بعضها بشكل مترابط بينما بقية المسارات تلغي مساهمات بعضها ليكون متوسط مساهمتها معدوم، دون الخوض في تفاصيل مدى قرب المسار من المسار الكلاسيكي لتصبح مساهمته معتبرة [9].

2.5 تكافؤ التكامل على المسار مع معادلة شرودينغر:

في هذه المرحلة نتساءل عن معادلة شرودينغر في التكامل على المسار، يعني ليس من الواضح كيف يمكننا استخراج معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن من التكامل على المسار لسعة الانتقال، لنذكر أن معادلة شرودينغر هي معادلة تفاضلية وإذن تحدد تغيرات لانهاية الصغر في دالة الموجة، ومنه لاستخراج معادلة شرودينغر يجب أن نختبر أو نفحص الشكل لانهاية الصغر لسعة الانتقال أو تكامل على المسار. من الشكل الصريح لسعة الانتقال نتحصل على المقدار لانهاية الصغر ϵ :

$$U(t_f = \epsilon, x_f, t_i = 0, x_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \exp\left(\frac{i\epsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_f - x_i}{\epsilon}\right)^2 - V\left(\frac{x_f + x_i}{2}\right)\right)\right) \quad (2.29)$$

نحن نعلم كذلك أن سعة الإنتقال هي المنتشر الذي يعطي إنتشار الدالة الموجية:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' U(t + \epsilon, x, t, x') \psi(x', t) \quad (2.30)$$

من خلال المعادلتين السابقتين:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}(x - x')^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{x + x'}{2}\right)\right) \psi(x', t) \quad (2.31)$$

بتغيير المتغير:

$$\eta = x' - x$$

نجد:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\eta + \frac{x}{2}\right)\right) \psi(\eta + x, t) \quad (2.32)$$

من الواضح بديها بسبب الكمية لامتناهية الصغر ϵ , إذا كان η كبير سيقود الجزء الأول في أس الدالة الأسية إلى إهتزازات سريعة و كل هذه المساهمات سوف تكون في المتوسط معدومة، المساهمة المهيمنة سوف تكون إذن من مجال التكامل أين الطور يكون مستقر أي:

$$\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2 \leq \pi \quad (2.33)$$

أي:

$$0 \leq |\eta| \leq \sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m} \quad (2.34)$$

لذا نقوم بنشر تايلور باعتبار الرتبة الأولى ϵ ومنه الرتبة الثانية ل η :

$$\psi(x + \eta, t) = \psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \dots \quad (2.35)$$

$$\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\epsilon V(x + \eta/2)\right] = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x + \eta/2) + \dots \simeq 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \quad (2.36)$$

بما أن $(\eta\epsilon)$ مهمله فالمعادلة (2.31) تصبح:

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right) \\ &\times \left[\psi(x, t) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + \eta^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}\right] \end{aligned} \quad (2.37)$$

يمكن حساب التكاملات الفردية كالتالي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right) = \sqrt{2\pi i \hbar \epsilon / m} \quad (2.38)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right) = 0 \quad (2.39)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right) = \frac{i\hbar\epsilon}{m} \sqrt{2\pi i \hbar \epsilon / m} \quad (2.40)$$

لاحظ أن هذه التكاملات تشتمل على تكاملات إهتزازية وأسهل طريقة لتقييمها هي من خلال التنظيم, مثلا:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(-(\delta - \frac{im}{2\hbar\epsilon})\eta^2\right) \quad (2.41)$$

$$= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sqrt{\frac{\pi}{\delta - \frac{im}{2\hbar\epsilon}}} = \sqrt{2\pi i\hbar\epsilon/m} \quad (2.42)$$

فتصبح المعادلة (2.37):

$$\psi(x, t + \epsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}} \left[\sqrt{2\pi i\hbar\epsilon/m} (\psi(x, t) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)\psi(x, t)) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \right. \quad (2.43)$$

$$\left. \times \sqrt{2\pi i\hbar\epsilon/m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right]$$

$$= \psi(x, t) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)\psi(x, t) \quad (2.44)$$

بتنظيم شكل المعادلة نجد:

$$\psi(x, t + \epsilon) - \psi(x, t) = \frac{-i\epsilon}{\hbar} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (2.45)$$

في النهاية ($\epsilon \rightarrow 0$) إذن نحصل على معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (2.46)$$

إذن تمثيل التكامل على المسار يحوي معادلة شرودينغر ويكافؤها [10,9].

2.6 معالجة بعض المسائل الأساسية والنمذجة في ميكانيك الكم بواسطة التكامل على المسار:

في هذا العنصر سيتم معالجة مسألتين بسيطتين كفاية للحصول على حلول دقيقة بالإعتماد على تمثيل التكامل على المسار مما يمكن من التفريق بين المنهجين المقدمين من طرف شرودينغر وتمثيل فاينمان لميكانيك الكم.

2.6.1 معالجة مسألة الجسم الحر:

الخطوات المهمة لصياغة التكامل على المسار لميكانيك الكم تُجرى من خلال إعتبار المنتشر للجسم الحر ذو الكتلة m , فالحالات الخاصة لهاميلتون الجسم الحر:

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (2.47)$$

هي الحالات الخاصة لكمية الحركة:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) \quad (2.48)$$

حيث p هي القيمة الخاصة من الطيف المستمر لكمية الحركة، بإدخال هذه الحالات الخاصة في تمثيل المنتشر الموضح في المعادلة (2.6) يمكن إيجاد:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left(\frac{-i p^2}{\hbar} t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(x_f - x_i)\right) \quad (2.49)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_f - x_i)^2}{2t}\right) \quad (2.50)$$

بالنسبة للأجسام الحرة، سعة الانتقال يمكن تقييمها بصراحة فهي تملك نفس سلوك دالة ديراك أي لما:

$$t_f \rightarrow t_i \Rightarrow K(x_f, t, x_i, 0) \rightarrow \delta(x_f - x_i) \quad (2.51)$$

وما هو إلا علاقة التعامد والتنظيم للحالات بتصور هايزنبرغ. هذا بالضبط ما يمكن الحصول عليه من خلال حل معادلة شرودينغر، كما تعبر عن الحقيقة الشهيرة المتمثلة في أن رغم تحديد موقع الحزمة الموجية جيدا سوف تنتشر مع الزمن وحتى أبسط المعادلات تملك فقط حلول متبددة أو متفرقة.

تم توضيح من طرف ديراك أن المنتشر في ميكانيك الكم والخصائص الكلاسيكية لجسم حر: قريين ومتعلقين ببعضهما، وهذا ما سنقوم بتوضيحه في مايلي:

يعطى تابع لاغرانج ومنه الفعل الكلاسيكي للجسم الحر في بعد واحد:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad (2.52)$$

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad (2.53)$$

الفعل الكلاسيكي يحقق:

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = m \ddot{x} = 0 \quad (2.54)$$

حيث:

$$x_{cl}(t) = v = \text{constant} = \frac{x_f - x_i}{t_f - t_i} \quad (2.55)$$

إذن يعطى الفعل الكلاسيكي:

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \dot{x}_{cl}^2 = \frac{1}{2} m v^2 (t_f - t_i) = \frac{1}{2} m \frac{(x_f - x_i)^2}{(t_f - t_i)} \quad (2.56)$$

ومنه:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right) \quad (2.57)$$

وهذه هي سعة الانتقال للجسم الحر بدلالة الفعل أو المسار الكلاسيكي [9,3].

2.6.2 معالجة مسألة هزاز توافقي مدفوع (Driven Harmonic Oscillator):

البداية ستكون مع دالة لاغرانج الهزاز التوافقي:

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}w^2x^2 + xf(t) \quad (2.58)$$

حيث $f(t)$ هي قوة يمكن أن تنتج عن حقل خارجي مثل وصل حقل كهربائي ناتج عن تفاعل ثنائي أقطاب مع جسيم مشحون. لحساب المنتشر $K(x_f, t, x_i, 0)$ يجب حساب الفعل من أجل كل المسارات الممكنة بداية باللمحة 0 عند x_i إلى غاية t عند x_f . من الملائم تقسيم المسارات:

$$x(s) = x_{cl} + \xi(s) \quad (2.59)$$

إلى المسار الكلاسيكي x_{cl} المحقق للشروط الحدودية $(x_{cl}(0) = x_i, x_{cl}(t) = x_f)$ وجزء متأرجح ينعدم عند الشروط الحدودية أي $\xi(0) = \xi(t) = 0$. المسار الكلاسيكي يجب أن يحقق معادلة الحركة:

$$m\ddot{x}_{cl} + mw^2x_{cl} = f(s) \quad (2.60)$$

المتحصل عليها بالإعتماد على دالة لاغرانج (2.58). إعتماد المسار على الشروط الحدودية يسمح بالحصول على نشر حول المسار الكلاسيكي وهو ضروري لجعل الفعل دينومي في الأس ومنه المسار يؤدي إلى مساهمة مهيمنة في التكامل على المسار في النهاية الكلاسيكية. من خلال (2.59) نجد الفعل:

$$S = \int_0^t ds \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}w^2x^2 + xf(s) \right) \quad (2.61)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^t ds \left(\frac{m}{2}\dot{x}_{cl}^2 - \frac{m}{2}w^2x_{cl}^2 + x_{cl}f(s) \right) + \int_0^t ds (m\dot{x}_{cl}\dot{\xi} - mw^2x_{cl}\xi + \xi f(s)) \\ &+ \int_0^t ds \left(\frac{m}{2}\dot{\xi}^2 - \frac{m}{2}w^2\xi^2 \right) \end{aligned} \quad (2.62)$$

في حالة الكمون التوافقي، الطرف الثالث مستقل عن القيم الحدودية x_i, x_f كذلك الإشتقاق الخارجي، أما الجزء الثاني فينعدم نتيجة النشر حول المسار الكلاسيكي، يمكن ملاحظة هذا بالمكاملة بالتجزئة بالإعتماد على حقيقة أن x_{cl} هو حل معادلة الحركة الكلاسيكية:

$$\begin{aligned} &\int_0^t ds (m\dot{x}_{cl}\dot{\xi} - mw^2x_{cl}\xi + \xi f(s)) \\ &= m(\dot{x}_{cl}\xi) \Big|_0^t - \int_0^t ds (m\ddot{x}_{cl} + mw^2x_{cl} - f(s))\xi = 0 \end{aligned} \quad (2.63)$$

في هذه المرحلة سنقوم بتحديد مساهمة الفعل الكلاسيكي وبعدها تحديد مساهمة التآرجحات. حل معادلة الحركة الكلاسيكية المحقق لشروط الحدودية للمواضع:

$$\begin{aligned} x_{cl}(s) &= x_f \frac{\sin(ws)}{\sin(wt)} + x_i \frac{\sin(w(t-s))}{\sin(wt)} + \frac{1}{mw} \\ &\times \left[\int_0^s du \sin(w(s-u))f(u) - \frac{\sin(ws)}{\sin(wt)} \int_0^t du \sin(w(t-u))f(u) \right] \end{aligned} \quad (2.64)$$

بنفس طريقة الحل المعتمدة في الملحق (1.1) لكن بإعتبار الشروط الحدودية للموضع والصياغة التي تحقق هذه الشروط بدلا من القيم الحدودية $x(0), p(0)$ التي تم الإعتماد عليها فيه. مهمة تقييم الفعل للمسار الكلاسيكي يمكن تبسيطها بواسطة المكاملة بالتجزئة:

$$\begin{aligned}
 S_{cl} &= \int_0^t ds \left(\frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 - \frac{m}{2} w^2 x_{cl}^2 + x_{cl} f(s) \right) \\
 &= \frac{m}{2} x_{cl} \dot{x}_{cl} \Big|_0^t - \int_0^t ds \left(\frac{m}{2} x_{cl} \ddot{x}_{cl} + \frac{m}{2} w^2 x_{cl}^2 - x_{cl} f(s) \right) \\
 &= \frac{m}{2} x_{cl} \dot{x}_{cl} \Big|_0^t - \frac{1}{2} \int_0^t ds (m \ddot{x}_{cl} + m w^2 f(s)) x_{cl} + \frac{1}{2} \int_0^t x_{cl}(s) f(s) \\
 &= \frac{m}{2} (x_f \dot{x}_{cl}(t) - x_i \dot{x}_{cl}(0)) + \frac{1}{2} \int_0^t ds x_{cl}(s) f(s) \quad (2.65)
 \end{aligned}$$

من خلال حل المعادلة الكلاسيكية (2.65):

$$\dot{x}_{cl}(0) = w \frac{x_f - x_i \cos(wt)}{\sin(wt)} - \frac{1}{m \sin(wt)} \int_0^t ds \sin(w(t-s)) f(s) \quad (2.66)$$

$$x_{cl}(t) = w \frac{x_f \cos(wt) - x_i}{\sin(wt)} + \frac{1}{m \sin(wt)} \int_0^t ds \sin(ws) f(s) \quad (2.67)$$

بتعويض السرعة الابتدائية والنهائية في الفعل الكلاسيكي نجد (2.65):

$$\begin{aligned}
 S_{cl} &= \frac{mw}{2 \sin(wt)} [(x_i + x_f)^2 \cos(wt) - 2x_i x_f] \quad (2.68) \\
 &+ \frac{x_f}{\sin(wt)} \int_0^t ds \sin(ws) f(s) + \frac{x_i}{\sin(wt)} \int_0^t ds \sin(w(t-s)) f(s) \\
 &- \frac{1}{mw \sin(wt)} \int_0^t ds \int_0^s du \sin(wu) \sin(w(t-s)) f(s) f(u)
 \end{aligned}$$

من أجل تقييم مساهمة التأرجحات المحددة في الطرف الثالث من المعادلة (2.62) نقوم بالمكاملة بالتجزئة لهذا الطرف:

$$\begin{aligned}
 S^{(2)} &= \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - \frac{m}{2} w^2 \xi^2 \right) = \frac{m}{2} \xi \dot{\xi} \Big|_0^t - \frac{m}{2} \int_0^t ds \xi (\ddot{\xi} + w^2 \xi) \\
 &= - \int_0^t ds \frac{m}{2} \xi \left(\frac{d^2}{ds^2} + w^2 \right) \xi \quad (2.69)
 \end{aligned}$$

حيث يشير الدليل العلوي '(2)' على أن هذا الحد يمثل المساهمة من الرتبة الثانية ل ξ .
بملاحظة (2.69) من اللائق نشر التـأرجحات:

$$\xi(s) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \xi_n(s) \quad (2.70)$$

إلى دوال ذاتية ل:

$$\left(\frac{d^2}{ds^2} + w^2 \right) \xi_n = \lambda_n \xi_n \quad (2.71)$$

مع: $\xi_n(t) = \xi_n(0) = 0$. حيث أن ξ_n بما أنها دوال ذاتية لمؤثر قرين لذاته فإنها تامة أي تحقق علاقة الإنغلاق ويمكن إختيارها متعامدة ومتجانسة.
 بجمل (2.71) نجد الدوال الخاصة:

$$\xi_n(s) = \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi n s}{t}\right) \quad (2.72)$$

والقيم الخاصة الموافقة:

$$\lambda_n = -\left(\frac{\pi n}{t}\right)^2 + w^2 \quad (2.73)$$

مع التأكيد على أن (2.70) ليست سلاسل فوري الإعتيادية في مجال طوله t , نشر مثل هذا يمكن كتابته على الشكل:

$$\xi(s) = \sqrt{\frac{2}{t}} \sum_{n=0}^{+\infty} \left[a_n \cos\left(\frac{2\pi n s}{t}\right) - 1 \right] + b_n \sin\left(\frac{2\pi n s}{t}\right) \quad (2.74)$$

والذي يؤكد على أن التأرجحات تختفي عند الحدود. يمكن إجراء الحسابات المولية بإعتبار النشر (2.74) عوض (2.70) للحصول على نفس المنتشر لكن يفضل الإعتماد على النشر بدلالة الدوال الذاتية التي تحقق (2.71).
 التكامل على التأرجحات يصبح الآن تكامل على معاملات النشر a_n , بإدخال النشر (2.70) في الفعل نجد:

$$S^{(2)} = -\frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2 = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(\frac{\pi n}{t}\right)^2 - w^2 \right) a_n^2 \quad (2.75)$$

كما تظهره هذه النتيجة، الفعل الكلاسيكي هو فقط قيمة حدية للفعل ولكن ليس بالضرورة أن يكون قيمة دنيوية على الرغم أن هذه هي الحالة من أجل المجالات الزمنية $(t < \frac{\pi}{w})$. وجود نقاط مرافقة عند الأزمنة $T_n = \frac{n\pi}{w}$ المذكورة أعلاه تؤكد إختفاء القيمة الذاتية λ_n , عندها يكون الفعل مستقل عن a_n مما يوضح أنه من أجل المجال الزمني T_n كل المسارات $x_{cl} = a_n \xi_n$ مع المعاملات العشوائية a_n هي حلول لمعادلة الحركة الكلاسيكية.
 بعد نشر التأرجحات بدلالة الدوال الذاتية (2.72)، المنتشر يأخذ الشكل:

$$K(x_f, t, x_i, 0) \sim \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \int \left(\prod_{n=1}^{\infty} da_n \right) \exp\left(\frac{-i m}{\hbar} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2\right) \quad (2.76)$$

يجب معرفة المحدد الجاكوبي للتحويل من التكامل على المسار إلى معاملات فوري. بما أن المحدد الجاكوبي مستقل عن تردد الهزاز w , يمكن إذن المقارنة مع الجسم الحر. بتقييم تكاملات التأرجح الغوسية، نجد النسبة بين معاملي المنتشرين K_w و K_0 للهزاز التوافقي والجسم الحر على الترتيب:

$$\frac{K_w \exp\left(\frac{-i}{\hbar} S_{cl,w}\right)}{K_0 \exp\left(\frac{-i}{\hbar} S_{cl,0}\right)} = \sqrt{\frac{D_0}{D}} \quad (2.77)$$

حيث محددات التأرجح من أجل الهزاز التوافقي:

$$D = \det\left(\frac{d^2}{ds^2} + w^2\right) = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n \quad (2.78)$$

ومن أجل الجسم الحر:

$$D_0 = \det\left(\frac{d^2}{ds^2}\right) = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n^0 \quad (2.79)$$

القيم الخاصة من أجل الجسم الحر:

$$\lambda_n^0 = -\left(\frac{\pi n}{t}\right)^2 \quad (2.80)$$

يتم التحصل عليها من خلال القيم الخاصة (2.73) للهزاز التوافقي ببساطة بوضع التردد $w = 0$. مع معامل المنتشر للجسم الحر:

$$K_0 \exp\left(\frac{-i}{\hbar} S_{cl,0}\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \quad (2.81)$$

مع (2.77), منتشر الهزاز التوافقي يصبح:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \sqrt{\frac{D_0}{D}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \quad (2.82)$$

لتوضيح محددات المؤثرات التفاضلية نشير إلى أنه يمكن تحديد عناصر مصفوفة لمؤثر بواسطة الإسقاط على أساس كما هو معروف من ميكانيك الكم القياسي. المؤثر الممثل في أساسه الذاتي يمثل مصفوفة قطرية مع القيم الذاتية على قطره. إذن, كما هو من أجل المصفوفات منتهية الأبعاد, المحدد هو جداء هذه القيم الذاتية. كل من المحددين بمحد ذاته يتباعد. على أية حال, نهتم بالنسبة بينهما المحددة بدقة:

$$\frac{D}{D_0} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{wt}{\pi n}\right)^2\right) = \frac{\sin(wt)}{wt} \quad (2.83)$$

بإدخال هذه النتيجة في (2.82) نحصل على منتشر الهزاز التوافقي المدفوع بشكله النهائي:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \sqrt{\frac{mw}{2\pi i \hbar \sin(wt)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \quad (2.84)$$

الفصل الثالث:

وصف الأنظمة المبدّدة

بواسطة ميكانيك الكم

الفصل 3

وصف الأنظمة المبددة بواسطة ميكانيك الكم:

3.1 تمهيد:

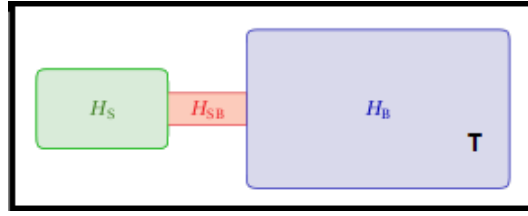
في الميكانيك الكلاسيكي التبدد يوصف عادة بإدخال الجزء المتخامد المتعلق بالسرعة في معادلة الحركة. هذا المفهوم أو الوصف لا يصلح في ميكانيك الكم أين يتطلب تمثيل أو صياغة الهاميلتون حفظ طاقة الهاميلتونات غير المتعلقة بالزمن. إذن يتطلب فهم الحالة بطريقة أحسن للوصول إلى نموذج فيزيائي مناسب.

النواس المتخامد يمكن أن يساعد لفهم آلية التبدد. درجة الحرية, طول النواس تخضع لحركة متخامدة لأنها تتفاعل مع درجات الحرية الأخرى التي تتمثل في جزيئات الهواء المحيطة بكافة النواس. يمكن إعتبار النواس و جزيئات الهواء كنظام كبير واحد, تكون طاقته محفوظة إذا إعتبرناه معزول عن درجات الحرية الأخرى. طاقة النواس على العموم غير محفوظة لوحدها. إذن هذه الدرجة من الحرية خاضعة للتبدد الحاصل نتيجة الوصل بدرجات الحرية الأخرى.

سيتم التعريف في هذا الفصل بنموذج نظام موصول بالمحيط وتوضيح طبيعة تبدده صراحة. على وجه الخصوص, سيتم التعريف كذلك بالكميات والمقادير التي نحتاجها للوصف الذي يركز على درجة حرية النظام [3].

3.2 هاميلتون جملة النظام مع المحيط الموصول به:

النموذج المناسب للأنظمة المبددة يجب أن يدرج فكرة الوصل بين النظام والمحيط ويقبل المعالجة التحليلية للوصل المحيطي. هذه المتطلبات تجتمع عند نموذج يدعى حالياً على الأغلب بنموذج (Laggett and Caldeira) [12,11] رغم أنه كان يُدعى سابقاً بأسماء مختلفة [13-16] من أجل الأنظمة الهاميلتونية التوافقية وغير التوافقية [17], حيث يوصف ويتصرف المحيط في هذه الأنظمة المبددة نخران إهتزازي حراري كبير مميز بدرجة حرارة T كما هو موضح في الشكل (3.1):



شكل 3.1: رسم تخطيطي لنظام موصول بحيطه [18].

إذن الهاميلتون يحوي على ثلاث إسهامات كالتالي :

$$H = H_S + H_B + H_{SB} \quad (3.1)$$

حيث H_S هاميلتون درجة حرية النظام يندج جسم كتلته m يتحرك في V :

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (3.2)$$

حيث رمز للإحداثية q تميزها عن إحداثيات المحيط x_n التي سيتم تعريفها فيما يأتي، درجة حرية النظام لا تملك بالطبع تعلق بنظام حقيقي لكن يمكن يكون مجرد مطلقا. في الحقيقية، الجزء الأساسي للحسابات الذي سيناقتش فيما يلي لا يعتمد على الشكل المفصل للهاملتون النظام. أما تابع هاميلتون المحيط فيعطى من الشكل :

$$H_B = \sum_{n=1}^N \left(\frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{m_n}{2} \omega_n^2 x_n^2 \right) \quad (3.3)$$

يصف هذا التابع مجموعة هزازات توافقية، بينما خصائص المحيط يمكن أن تكون مختارة على أساس نموذج مجهري، هذا لا يفترض أن يكون مشكلة، غالبا الأسلوب الظاهري يكون كافي كما سنرى في ما يأتي. كمثال سنذكر مقاوم أومي الذي هو عبارة عن عنصر كهربائي خطي يجب وصفه جيدا بهاملتون من الشكل (H_B). من الناحية الأخرى الآلية غير الصريحة للتبدد في المقاوم مثلا يمكن أن تكون أكثر تعقيدا من تلك المتضمنة في نموذج مجموعة الهزازات التوافقية. في حين أن تابع هاميلتون الوصل الذي يعرف من الشكل:

$$H_{SB} = -q \sum_{n=1}^N c_n x_n + q^2 \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2} \quad (3.4)$$

هو ثنائي الخطية في مؤثرات الموضع للنظام والمحيط، توجد بعض الحالات أين يكون الوصل ثنائي الخطية واقعي مثلا محيط يتضمن دائرة كهربائية خطية مثل المقاوم الأومي أو من أجل وصل ثنائي القطب لأنماط الحقل الكهرومغناطيسي التي نصادفها في علم الكهرو بصريات الكمي.

عموما هذا الهاملتون يمكن أن يرى على شكل تحويل لوصول غير خطي إلى شكل وصل خطي في نهاية ضعيفة لوصول درجات حرية المحيط. كما تم الإشارة إليه بواسطة (Laggett and Caldeira) عدد لانهائي من درجات الحرية يبقى يسمح بتخامد قوي حتى إذا كان كل هزاز محيطي يرتبط فقط بشكل ضعيف بالنظام [12,11,3].

3.3 إقصاء المحيط (الخزان الإهتزازي الحراري):

بعد تخصيص النموذج, نريد الآن إشتقاق وصف فعال للنظام لوحده. تم إظهار بواسطة (Magalinski¹) [13] أن إقصاء درجات حرية المحيط يقود بالفعل إلى حركة متخامدة لإحداثي النظام. سنقوم بالإقصاء ضمن تصور هايزينبيرغ (Heisenberg) أين تطور مؤثر A يحدد كالتالي :

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A] \quad (3.5)$$

من خلال الهاميلتون الكلي H نتحصل على معادلات الحركة من أجل درجات حرية المحيط :

$$\dot{p}_n = -m_n \omega_n^2 x_n + c_n q \quad (3.6)$$

$$\dot{x}_n = \frac{p_n}{m_n} \quad (3.7)$$

ومن أجل درجة حرية النظام :

$$\dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q} + \sum_{n=1}^N c_n x_n - q \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \quad (3.8)$$

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \quad (3.9)$$

لحل المعادلة للحركة للمحيط نعتبر $q(t)$ إحداثي النظام كدالة للزمن, كل خطوات الحل موضحة في الملحق (1.0), حيث نجد حلها من الشكل:

$$x_n(t) = x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) + \frac{c_n}{m_n} \int_0^t \sin(\omega_n(t-s)) q(s) ds \quad (3.10)$$

بإدخال عبارة $x_n(t)$ نجد في معادلة حركة النظام:

$$\begin{aligned} \ddot{q} - \int_0^t ds \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n(t-s)) q(s) + \frac{\partial V}{\partial q} + q \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \\ = \sum_{n=1}^N c_n [x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t)] \end{aligned} \quad (3.11)$$

عند مكاملة التكامل الموجود في معادلة الحركة بطريقة التجزئة نجد الشكل النموذجي لمعادلة (Langevin) المعممة:

$$m\ddot{q} - m \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) + \frac{\partial V}{\partial q} = \xi(t) \quad (3.12)$$

مع نواة التخماد (damping kernal):

$$\gamma(t) = \frac{1}{m} \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \cos(\omega_n t) \quad (3.13)$$

ومؤثر قوة التارجح:

$$\xi(t) = \sum_{n=1}^N c_n [(x_n(0) - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} q(0)) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t)] \quad (3.14)$$

قوة التآرج تنعدم القيمة المتوسطة لها من خلال مصفوفة الكثافة الحرارية للمحيط بإعتبار الوصل مع النظام [3]:

$$\langle \xi \rangle_{B+SB} = \frac{\text{tr}_B[\xi(t) \exp(-\beta(H_B + H_{SB}))]}{\text{tr}_B[\exp(-\beta(H_B + H_{SB}))]} = 0 \quad (3.15)$$

البرهان على هذه العلاقة (3.15) موضح في الملحق (2.ا).

من أجل وصل ضعيف، يمكن فصل الطرف اللخطي الذي هو من الرتبة الثانية في الوصل ويمكن كتابة قوة التآرج كالاتي بالإعتماد على [19]:

$$\xi(t) = \zeta(t) - m\gamma(t)q(0) \quad (3.16)$$

حيث القوة المعرفة $\zeta(t)$ تنعدم قيمتها المتوسطة المعطاة من خلال مصفوفة الكثافة الحرارية للمحيط لوحده (البرهان موضح في الملحق (3.ا)):

$$\langle \zeta(t) \rangle_B = \frac{\text{tr}_B[\zeta(t) \exp(-\beta H_B)]}{\text{tr}_B[\exp(-\beta H_B)]} = 0 \quad (3.17)$$

مقدار مهم لتخصيص قوة التآرج هو دالة الربط (correlation function) التي يمكن مجددا تقييمها من أجل $\xi(t)$ بإعتبار $(H_B + H_{SB})$ أو من أجل $\zeta(t)$ بإعتبار H_B لوحده. من أجل المعادلتين (3.14) و (3.16) نتحصل على دالة الربط:

$$\langle \zeta(t)\zeta(0) \rangle_B = \sum_{n,l} c_n c_l \langle (x_n(0) \cos(w_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n w_n} \sin(w_n t)) x_l(0) \rangle_B \quad (3.18)$$

عند الإيزان الحراري تعطى:

$$\langle x_n(0)x_l(0) \rangle_B = \delta_{nl} \frac{\hbar}{2m_n w_n} \coth\left(\frac{\hbar\beta w_n}{2}\right) \quad (3.19)$$

$$\langle p_n(0)x_l(0) \rangle_B = -\frac{i\hbar}{2} \delta_{nl} \quad (3.20)$$

إذن دالة الربط تصبح إذن بشكل نهائي:

$$\langle \zeta(t)\zeta(0) \rangle_B = \sum_{n=1}^N \frac{\hbar c_n^2}{2m_n w_n} \left[\coth\left(\frac{\hbar\beta w_n}{2}\right) \cos(w_n t) - i \sin(w_n t) \right] \quad (3.21)$$

حيث أن تفاصيل هذا الحساب لإيجاد شكل دالة الربط موضحة في الملحق (4.ا). الجزء التخيلي الظاهر هنا نتيجة أن المؤثرات $\zeta(0)$ و $\zeta(t)$ لا يتبادلان عموما. دالة الربط أعلاه تظهر في شكل نواة التكامل (the kernal) في المعادلات الأساسية وكذلك في دالة الفعل الفعالة كما سيظهر لاحقا.

3.4 إدراج الكثافة الطيفية لهزازات المحيط:

من اللافت للإنتباه أن كل الكميات التي تصف المحيط يمكن التعبير عنها بعبارات للكثافة الطيفية للخزان الإهتزازي بالإعتماد على الوصف الخاص بالنظام لوحده [3]:

$$J(w) = \pi \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n w_n} \delta(w - w_n) \quad (3.22)$$

باستعمال العلاقة العامة:

$$\sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n w_n} f(w_n) = \int \frac{dw}{\pi} J(w) f(w) \quad (3.23)$$

يمكن التعبير عن المقادير ذات المجاميع من نفس الشكل بدلالة تكامل الكثافة [5]. كمثال النواة المتخامدة يمكن التعبير عنها كالتالي:

$$\gamma(t) = \frac{1}{m} \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n w_n^2} \cos(w_n t) = \frac{2}{m_n} \int_0^\infty \frac{dw}{\pi} \frac{J(w)}{dw} \cos(wt) \quad (3.24)$$

من أجل الحسابات العملية، إنه إذن ليس من الضروري تخصيص كل الثوابت c_n, m_n, w_n بل يكفي تحديد الكثافة الطيفية $J(w)$.
الكثافة الطيفية الأكثر استعمالاً هي:

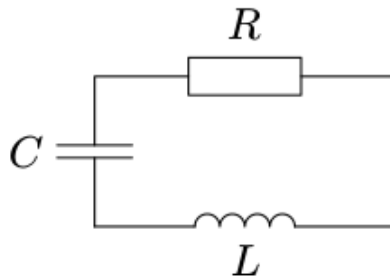
$$J(w) = m\gamma w \quad (3.25)$$

والتي تتعلق بما يسمى بـ "التخامد الأومي". هذا المصطلح يستعمل أحيانا لتحديد تناسب للتردد عند ترددات منخفضة فحسب بدلا من كل مجال التردد. في الحقيقة، في أي حالة واقعية، الكثافة الطيفية لن تتزايد مثلها هو في (3.25) من أجل الترددات العالية الإعتباطية. إنه من المبرر استعمال مصطلح تخامد أومي حتى إذا صمدت (3.25) فقط تحت تردد محدد، هذا التردد هو أعلى بكثير من الترددات النموذجية التي تظهر في ديناميك النظام. من خلال (3.23) نجد نواة التخامد من أجل تخامد أومي والتي تجعل (3.12) عديمة الذاكرة:

$$\gamma(t) = 2\gamma\delta(t) \quad (3.26)$$

إذن نسترد طرف سرعة التخامد التناسبية المشابهة للأنظمة المتخامدة الكلاسيكية. من المفروض توضيح أن المعامل 2 في (3.26) يختفي عند التكامل في (3.12) بما أن (3.24) تدل على أن دالة دلتا متناظرة حول 0. في هذه المرحلة، نزيد باختصار توضيح مصطلح "تخامد أومي". لنعتبر دائرة كهربائية التي تظهر في الشكل (3.2) أدناه، تحتوي مقاومة R ، مكثفة C ، ووشية L . بجمع التوترات حول العروة، نتحصل على معادلة حركة للشحنة Q في المكثفة:

$$L\ddot{Q} + R\dot{Q} + \frac{Q}{C} = 0 \quad (3.27)$$



شكل 3.2: هزاز LC خاضع لتخامد أومي نتيجة مقاومة R [3].

الكثافة الطيفية في (3.25) من أجل التخماد الأومي للأسف تتباعد عند الترددات العالية وكما ذكر سابقا، هذا لن يكون المشكل عمليا. حتى في الإعتبارات النظرية الملاحح التامة للتخماد الأومي يمكن أن تقود إلى تباعدات وتستلزم قطع من أجل التنظيم، من الإحتمالات الممكنة هي قطع درود (Drude cutoff) أين تكون الكثافة الطيفية:

$$J(w) = m\gamma w \frac{w_D^2}{w^2 + w_D^2} \quad (3.28)$$

فوق الترددات من الرتبة w_D تتخذ نواة التخماد الموافقة والتي تعطى:

$$\gamma(t) = \gamma w_D \exp(-w_D |t|) \quad (3.29)$$

هذا يقود إلى تأثيرات على ذاكرة المعادلة (3.12) للحظات القصيرة ($t < w_D^{-1}$). من أجل تصرف الزمن الطويل، فقط التصرف الأومي منخفض التردد للكثافة الطيفية له علاقة بالموضوع. إذا أدخل قطع درود لأسباب تقنية، تردد القطع w_D يجب أن يكون أكبر بكثير من كل الترددات الظاهرة في المسألة لتجنب التأثيرات غير الشرعية. العلاقة بين الكثافة الطيفية والثوابت المجهرية تدل على أنه يمكن وضع $c_n = m_n w_n^2$ دون فقدان عمومية المسألة بما أنه لا يزال إختيار الترددات w_n وشدات الهزاز $\frac{c_n^2}{2m_n w_n}$ بكل حرية ممكن. هذا الخيار المميز لثوابت الوصل يفيد في صمود الوصل [20]:

$$H = H_S + \sum_{n=1}^N \left(\frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{m_n}{2} w_n^2 (x_n - q)^2 \right) \quad (3.30)$$

بالإضافة إلى أنه يمكن الآن تحديد الكتلة الكلية لهزازات المحيط:

$$\sum_{n=1}^N m_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dw \frac{J(w)}{w^3} \quad (3.31)$$

إذا أخذت الكثافة الطيفية للجزان الهزازي الشكل: $J(w) \sim w^\alpha$ عند ترددات صغيرة، تكون الكتلة الكلية للجزان الهزازي غير منتهية من أجل $\alpha \leq 2$ ، على الخصوص، هذا يتضمن حالة تخامد أومي أين ينفذ جسم حر متخامد حركة متشعبة. بالعكس من أجل $\alpha > 2$ الكتلة الكلية منتهية. في هذه الحالة، الجسم يتصرف من أجل لحظات طويلة كأنه حر رغم إمتلكه لكتلة معادة التنظيم بسبب الوصل المحيطي [21]. تؤكد على أن التباعد للكتلة من أجل $\alpha \leq 2$ بسبب التباعد تحت الأحمر وإذن إستقلالية قطع التردد العالي. من المفيد أيضا التعبير عن الكون معاد التنظيم المقدم في (3.4) بدلالة الكثافة الطيفية للجزان الهزازي، من خلال:

$$q^2 \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n w_n^2} = \frac{q^2}{\pi} \int_0^{+\infty} dw \frac{J(w)}{w} \quad (3.32)$$

هذا المقدار غير منتهي من أجل تخامد أومي تام لكن يصبح منتهي عندما يتم إدخال قطع التردد العالي. أخيرا، نجد دالة ربط التشويش:

$$K(t) = \langle \zeta(t) \zeta(0) \rangle_B = \hbar \int_0^\infty \frac{dw}{\pi} J(w) \left[\coth\left(\frac{\hbar\beta w}{2}\right) \cos(wt) - i \sin(wt) \right] \quad (3.33)$$

في النهاية الكلاسيكية ($\hbar \rightarrow 0$) وبوضع ($y = \hbar\beta w/2$) نجد:

$$\lim_{y \rightarrow 0} \coth(y) \simeq \frac{1}{y}$$

ومنه تختصر دالة الارتباط تختصر إلى العبارة الحقيقية المقدره:

$$K(t) = mk_{\beta}T\gamma(t) \quad (3.34)$$

حيث k_{β} ثابت بولتزمان يحقق:

$$k_{\beta} = \frac{1}{\beta T} \quad (3.35)$$

أين استعملنا العلاقة (3.24).

في الحالة الكمية، دالة ربط التشويش معقدة ويمكن تفكيكها إلى جزأها الحقيقي والتخيلي:

$$K(t) = K'(t) + iK''(t) \quad (3.36)$$

باستعمال العلاقة (3.24) مرة أخرى نجد مباشرة أن الجزء التخيلي مرتبط بالمشتق الزمني لنواة التخماد بواسطة:

$$K''(t) = \frac{m\hbar}{2} \frac{d\gamma}{dt} \quad (3.37)$$

من أجل التخماد الأومي الجزء الحقيقي يُعطى:

$$K'(t) = \frac{-\pi m\gamma}{(\hbar\beta)^2} \frac{1}{\sinh^2(\frac{\pi t}{\hbar\beta})} \quad (3.38)$$

والذي يشمل أنه عند درجة الحرارة المطلقة المعدومة ($0K$) التشويش مرتبط حتى من أجل اللحظات الطويلة. دالة ربط التشويش عندها ثلاثي جبريا من الشكل ($\frac{1}{t^2}$) عكس النتيجة الكلاسيكية (3.34) [3].

الفصل الرابع:

تطبيق صيغة التكامل على

المسار في دراسة الأنظمة

الكمية المبددة

الفصل 4

تطبيق أسلوب التكامل على المسار في دراسة الأنظمة الكمية المبددة:

4.1 تمهيد:

في الفصل السابق، تم إظهار كيف أن التخماد يتأتى من الهاميلتون الموصوف بالوصل بخزان حراري، حضور التخماد يصبح ظاهر بعد إقصاء درجات حرية المحيط وإعتبار درجة حرية النظام لوحدها، حيث تم إقصاء الأولى للحصول على المعادلة الفعالة لحركة الأخيرة (3.12). في هذا الفصل نهم بمناقشة العملية الموافقة ضمن صياغة التكامل على المسار، أي سنقوم بالرجوع إلى صياغة التكامل على المسار وتوضيح كيفية استغلالها وتطبيقها في دراسة الأنظمة الكمية المبددة. إنطلاقاً من نموذج النظام والمحيط الذي سيُصغى للحصول على وصف مختزل للنظام وحده هذا يتركنا مع دالة الفعل الفعالة الذي تشكل أساس وصف التكامل على المسار للتبدد [2,3].

4.2 تمثيل مصفوفة الكثافة المتطورة زمنياً بدلالة المنتشر:

في ميكانيك الكم الإحصائي، حالة النظام في لحظة معينة غير معروفة بالتحديد. لذلك يتم التوجه لمفهوم الإحتمالية نظراً لعدم توفر معلومات كافية عن النظام. النظام معرف بواسطة مصفوفة الكثافة وهو المؤثر الممثل لميكانيك الكم الإحصائي. نعرف إذن مصفوفة الكثافة الكلية للجملية المكونة من النظام والمحيط:

$$W(t) = \sum_k P_k |\Psi_k(t)\rangle \langle \Psi_k(t)| \quad (4.1)$$

حيث P_k يمثل إحتمالية إيجاد الجملية في الحالة $|\Psi_k\rangle$ [1].
تكتب هذه المصفوفة في أساس الموضع:

$$W(q_f, x_{nf}, q'_f, x'_{nf}, t) = \langle q_f, x_{nf} | W | q'_f, x'_{nf} \rangle \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_k P_k \langle q_f, x_{nf} | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | q'_f, x'_{nf} \rangle \\ &= \sum_k P_k \langle q_f, x_{nf} | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} H t\right) | \Psi_k(0) \rangle \quad (4.3) \\ &\quad \times \langle \Psi_k(0) | \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t\right) | q'_f, x'_{nf} \rangle \end{aligned}$$

بإدخال علاقات الإكمال في (4.3) نجد:

$$\begin{aligned} W(q_f, x_{nf}, q'_f, x'_{nf}, t) &= \sum_k P_k \int dq_i dq'_i dx_{ni} dx'_{ni} \langle q_f, x_{nf} | \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) | q_i, x_{ni} \rangle \langle q_i, x_{ni} | \Psi_k(0) \rangle \\ &\times \langle \Psi_k(0) | q'_i, x'_{ni} \rangle \langle q'_i, x'_{ni} | \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) | q'_f, x'_{nf} \rangle \\ &= \int dq_i dq'_i dx_{ni} dx'_{ni} K(q_f, x_{nf}, t, q_i, x_{ni}, 0) W(q_i, x_{ni}, q'_i, x'_{ni}, 0) \\ &\times K^*(q'_f, x'_{nf}, t, q'_i, x'_{ni}, 0) \end{aligned} \quad (4.4)$$

مصفوفة الكثافة الكلية للنظام والمحيط تُعرّف بواسطة منتشرين. هنا، الإحداثيات q و x_n تشير مجدداً إلى النظام ودرجات حرية الخزان الإهتزازي الحراري بالترتيب، المحيط مفترض أنه متوازن حرارياً يوصف بواسطة مصفوفة الكثافة W_β^B بينما النظام يمكن أن يكون في حالة غير متوازنة حرارياً ρ بسبب وصله الضعيف بالخزان الحراري. إذا أهملنا الارتباطات الابتدائية بين النظام والمحيط، يعني، إذا شغلنا الوصل بعد تحضير الحالة الابتدائية. مصفوفة الكثافة الابتدائية يمكن أن تكتب بالشكل:

$$W(q_i, x_{ni}, q'_i, x'_{ni}, 0) = \rho(q_i, q'_i) W_\beta^B(x_{ni}, x'_{ni}) \quad (4.5)$$

بما أننا مهتمين فقط بديناميك درجة حرية النظام سوف نكامل على المحيط (درجات حرية المحيط النهائية)، عندها تطور الزمان يكتب:

$$\rho(q_f, q'_f, t) = \int dq_i dq'_i J(q_f, q'_f, t, q_i, q'_i, 0) \rho(q_i, q'_i) \quad (4.6)$$

مع دالة الانتشار:

$$\begin{aligned} J(q_f, q'_f, t, q_i, q'_i, 0) &= \int dx_{nf} dx_{ni} dx'_{ni} K(q_f, x_{nf}, t, q_i, x_{ni}, 0) W_\beta^B(x_{ni}, x'_{ni}) \\ &\times K^*(q'_f, x'_{nf}, t, q'_i, x'_{ni}, 0) \end{aligned} \quad (4.7)$$

هنا، الأثر تم حسابه بوضع $x_{nf} = x'_{nf}$ والمكاملة على هذه الإحداثيات. المنتشرات يمكن التعبير عنها كتكاملات على المسار للزمن الحقيقي على المسار بينما مصفوفة كثافة الإتران للخزان الإهتزازي تعطى بواسطة التكامل على المسار في الزمن الخيالي.

بالقيام بتكاملات على المسار والتكاملات التقليدية الظاهرة في (4.8) نجد دالة تعتمد على مسار النظام. النقطة المهمة هي أنه هذه الدالة تتضمن كل المعلومات عن المحيط المطلوبة لتحديد ديناميك النظام. لوضع الشروط الابتدائية، دالة الانتشار J حُسبت من خلال فايمان وفرنون [22] في أساس الهاميلتون H . كما يمكن إعتبار كذلك الشروط الابتدائية المعممة أكثر التي تأخذ بعين الإعتبار الارتباطات بين النظام والمحيط [23].

بدلاً من اشتقاق دالة الانتشار، سنوضح كيف يمكن حساب الأثر على المحيط لمصفوفة كثافة الإتران للنظام مع المحيط وذلك لإختصار طريق الحل لكن بعد صياغتها بدلالة التكامل الدالي.

4.3 تمثيل مصفوفة كثافة الإتران بواسطة التكامل على المسار:

من الضروري تحديد كيفية التعبير عن مصفوفة كثافة الإتران التي تمثل مؤثر ميكانيك الكم الإحصائي بدلالة التكامل على المسار، وذلك للحصول على وصف أنسب لحالات إتران النظام الحرارية وديناميكه، لذلك نعرّف مصفوفة كثافة

إتزان كيفية في أساس الموضع:

$$\rho_\beta(x, x') = \frac{1}{Z} \langle x | \exp(-\beta H) | x' \rangle \quad (4.8)$$

مع دالة التوزيع Z :

$$Z = \int dx \langle x | \exp(-\beta H) | x \rangle \quad (4.9)$$

بالمقارنة مع المنتشر في أساس الموضع:

$$K(x, t, x', 0) = \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) | x' \rangle \quad (4.10)$$

نلاحظ أن مصفوفة كثافة الإتزان توافق المنتشر في الزمن التخيلي $(t \rightarrow -i\hbar\beta)$ مع إعتبار دالة التوزيع. ومنه الفعل في الزمن التخيلي, بعد وضع $(\sigma = is)$, يكتب على الشكل:

$$\int_0^{-i\hbar\beta} ds \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{ds} \right)^2 - V(x) \right] = i \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\sigma} \right)^2 + V(x) \right] \quad (4.11)$$

من خلال الجزء الأيمن ل (4.11) نعرف الفعل الإقليدي:

$$S^E[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \left[m \frac{\dot{x}^2}{2} + V(x) \right] \quad (4.12)$$

إذن من خلال الفعل الإقليدي نحصل على عبارة التكامل على المسار لمصفوفة كثافة الإتزان:

$$\rho_\beta(x, x') = \frac{1}{Z} \int_{\bar{x}(0)=x'}^{\bar{x}(\hbar\beta)=x} \mathcal{D}\bar{x} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E[\bar{x}]\right) \quad (4.13)$$

هذا النوع من التكامل الدالي تمت مناقشته من قبل (Wiener) عام 1923 م في سياق الحركة البراونية الكلاسيكية. بالرغم من وجود بعض المخاوف والشكوك من فكرة دراسة الحركة في الزمن التخيلي إلا أن هذه النتيجة تُظهر أن ذلك ممكن باعتبار الحركة في الكمون العكسي في الزمن الحقيقي [3]. إذن يعطى تمثيل التكامل على المسار للزمن التخيلي لمصفوفة كثافة الإتزان الكلية:

$$W_\beta(q, x_n, q', x'_n) = \frac{1}{Z_\beta} \int \mathcal{D}\bar{q} \left(\prod_{n=1}^N \mathcal{D}\bar{x}_n \right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E[\bar{q}, \bar{x}_n]\right) \quad (4.14)$$

أين المسارات تتطابق من $\bar{q}(0) = q'$ و $\bar{x}_n(0) = x'_n$ إلى $\bar{q}(\hbar\beta) = q$ و $\bar{x}_n(\hbar\beta) = x_n$ حيث أن الفعل الإقليدي الموافق لنموذج الهاميلتون في (3.1) يكتب في الزمن التخيلي: $0 \leq \tau \leq \hbar\beta$

$$S^E[\bar{q}, \bar{x}_n] = S_S^E[\bar{q}] + S_B^E[\bar{x}_n] + S_{SB}^E[\bar{q}, \bar{x}_n] \quad (4.15)$$

مع:

$$S_S^E[\bar{q}] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau L_S^E(\bar{q}, \dot{\bar{q}}) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{m}{2} \dot{\bar{q}}^2 + V(\bar{q}) \right) \quad (4.16)$$

$$S_B^E[\bar{x}_n] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau L_B^E(\bar{x}_n, \dot{\bar{x}}_n) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{n=1}^N \frac{m_n}{2} (\dot{\bar{x}}_n^2 + w_n^2 \bar{x}_n^2) \quad (4.17)$$

$$S_{SB}^E[\bar{q}, \bar{x}_n] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau L_{SB}^E(\bar{q}, \bar{x}_n) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(-\bar{q} \sum_{n=1}^N c_n \bar{x}_n + \bar{q}^2 \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n w_n^2} \right) \quad (4.18)$$

4.4 إقصاء المحيط:

يتم إقصاء المحيط من خلال حساب مصفوفة الكثافة للنظام المختزلة التي يتم التحصل عليها من خلال حساب الأثر على درجات حرية المحيط:

$$\begin{aligned} \rho_\beta(q, q') &= Tr_B(W_\beta(q, x_n, q', x'_n)) \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \int \mathcal{D}\bar{q} \int \prod_{n=1}^N dx_n \oint \prod_{n=1}^N \mathcal{D}\bar{x}_n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E[\bar{q}, \bar{x}_n]\right) \end{aligned} \quad (4.19)$$

تشير الحلقة في التكامل الدالي الثاني إلى أنه يجب المكاملة على مسار مغلق عند حساب الأثر أي:

$$\bar{x}_n(0) = \bar{x}_n(\hbar\beta) = x_n$$

التعلق بالوصل المحيطي يمكن أن يكون واضحاً صريحاً من خلال كتابة:

$$\rho_\beta(q, q') = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{q} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_S^E[\bar{q}]\right) \mathcal{F}[\bar{q}] \quad (4.20)$$

حيث دالة التأثير $\mathcal{F}[\bar{q}]$ تصف تأثير المحيط على النظام [3], ومنه إقصاء درجات حرية المحيط يُختصر إلى تحديد دالة التأثير [5].

هنا دالة التوزيع Z للنظام لوحده يجب أن لا تختلط مع دالة التوزيع Z_β للنظام مع المحيط. العلاقة بين المقدارين سوف تُناقش بإختصار فيما يأتي.

بما أن هزازات الخزان غير موصولة ببعضها البعض، التأثير الدالي يمكن تفكيكه إلى معاملات موافقة لهزازات الخزان المنفردة.

$$\mathcal{F}[\bar{q}] = \prod_{n=1}^N \frac{1}{Z_n} \mathcal{F}_n[\bar{q}] \quad (4.21)$$

حيث Z_n دالة التوزيع لهزاز وحيد للخزان وتكتب من الشكل:

$$Z_n = \int \langle x_n | \exp(-\beta H_n) | x_n \rangle dx_n = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta w_n/2)} \quad (4.22)$$

حيث H_n هو هاميلتون هزاز توافقي وحيد يعطى كالآتي:

$$H_n = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{m_n}{2} w_n^2 x_n^2 \quad (4.23)$$

دالة التأثير لهزاز الخزان يمكن التعبير عنها كما يلي:

$$\mathcal{F}_n[\bar{q}] = \int dx_n \oint \mathcal{D}\bar{x}_n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_n^E[\bar{q}, \bar{x}_n]\right) \quad (4.24)$$

مع الفعل:

$$S_n^E[\bar{q}, \bar{x}_n] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{m_n}{2} [\dot{\bar{x}}_n^2 + w_n^2 (\bar{x}_n - \frac{c_n}{m_n w_n^2} \bar{q})^2] \quad (4.25)$$

دالة التوزيع للنظام المتخامد \mathcal{Z} يتعلق بدالة التوزيع الكلية \mathcal{Z}_β بواسطة دالة التوزيع لهزازات المحيط $\mathcal{Z}_B = \prod_{n=1}^N \mathcal{Z}_n$ بالعلاقة: $\mathcal{Z} = \frac{\mathcal{Z}_\beta}{\mathcal{Z}_B}$. في نهاية زوال الوصل، $c_n = 0$ ، دالة التأثير تصبح $\mathcal{F}[\bar{q}] = 1$ إذن تختصر العلاقة (4.20) إلى تمثيل التكامل على المسار لمصفوفة الكثافة لنظام معزول كما يجب. إضافة إلى الكون المعاد تنظيمه المناسب مع \bar{q}^2 ، الفعل (4.25) يصف هزاز توافقي مدفوع.

باستغلال نتائج العنصر (2.6.2) أي معالجة مسألة هزاز توافقي مدفوع مع إعتبار $(t \rightarrow -i\hbar\beta)$ ووضع $x_i = x_f = x_n$ في (2.69) نجد الفعل الكلاسيكي الإقليدي:

$$\begin{aligned} S_n^{E,cl}[\bar{q}] &= m_n w_n \frac{\cosh(\hbar\beta w_n) - 1}{\sinh(\hbar\beta w_n)} x_n^2 \\ &- c_n \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{\sinh(w_n \tau) + \sinh(w_n(\hbar\beta - \tau))}{\sinh(\hbar\beta w_n)} x_n \bar{q}(\tau) \\ &- \frac{c_n^2}{m_n w_n} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma \frac{\sinh(w_n(\hbar\beta - \tau)) \sinh(w_n \sigma)}{\sinh(\hbar\beta w_n)} \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma) \\ &+ \frac{c_n^2}{2m_n w_n^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \end{aligned} \quad (4.26)$$

عند رؤية التكامل المطلوب على x_n ، نجد التربيع:

$$\begin{aligned} S_n^{E,cl}[\bar{q}] &= \frac{m_n w_n (\cosh(\hbar\beta w_n) - 1)}{\sinh(\hbar\beta w_n)} (x_n - x_n^{(0)})^2 - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma \\ &\times K_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma) + \frac{c_n^2}{2m_n w_n^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \end{aligned} \quad (4.27)$$

أين x_n لا نحتاج تحديدها بما أنها تزول بعد التكامل [3]. نواة التكامل التي تظهر في (4.27) تصف تأثير المحيط على النظام [5] حيث تأخذ شكلها في (4.26) كالتالي:

$$K_n(\tau) = \frac{c_n^2}{2m_n w_n} \frac{\cosh(w_n(\hbar\beta/2 - \tau))}{\sinh(\hbar\beta w_n/2)} = K_n(\hbar\beta - \tau) \quad (4.28)$$

وإذن يمكن تحديدها كدالة ربط التشويش (3.33) في الزمن التخيلي:

$$K_n(\tau) = \frac{1}{\hbar} \langle \zeta_n(-i\tau) \zeta_n(0) \rangle_B \quad (4.29)$$

الطرف في (4.27) الذي يحتوي هذه النواة هو غير إعتيادي مطلقاً من أجل الفعل فالتكامل المزدوج يصف مساهمة غير محلية أين يتفاعل مسير النظام مع نفسه، حيث يتم هذا التفاعل بتدخل المحيط كما يمكن رؤيته من خلال المعامل c_n^2 في نواة التكامل (4.28).

نواة التكامل $K_n(\tau)$ نحتاجها فقط في مجال الطول $(\hbar\beta)$ ، استمرار دوري خارج هذا المجال إذن يسمح لنا بنشر النواة إلى سلاسل فوري (التفاصيل الرياضية موضحة في الملحق (5.1)) [3]:

$$K_n(\tau) = \frac{c_n^2}{\hbar\beta m_n w_n} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{w_n}{w_n^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l \tau) \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{c_n^2}{\hbar\beta m_n w_n^2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \exp(i\nu_l \tau) - \frac{c_n^2}{\hbar\beta m_n w_n^2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{\nu_l^2}{w_n^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l \tau) \\ &= \frac{c_n^2}{m_n w_n^2} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - j\hbar\beta) - k_n(\tau) = \frac{c_n^2}{m_n w_n^2} : \delta(\tau) : - k_n(\tau) \end{aligned} \quad (4.31)$$

حيث $\delta(\tau)$: دورية ودورها $[\pm j\hbar\beta]$, أما ν_l فهي ترددات ماتسوبارا (matsubara):

$$\nu_l = \frac{2\pi l}{\hbar\beta} \quad (4.32)$$

سوف نفصل نواة التكامل إلى جزئين, الجزء الأول يحوي الدالة $\delta(\tau)$: الذي يقود إلى مساهمة محلية للفعل. نلاحظ أنه بسبب مجال التكامل في (4.27) فقط نصف دوال دلتا تساهم, هذا الجزء المحلي يلغي فقط الكون معاد التنظيم في (3.32), بحيث نكتب:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma K_n(\tau - \sigma) = \frac{c_n^2}{2m_n w_n} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2 - \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \quad (4.33)$$

$$\times \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)$$

إذن يصبح الفعل الكلاسيكي الإقليدي:

$$S_n^{E,cl}[\bar{q}] = \frac{m_n w_n (\cosh(\hbar\beta w_n) - 1)}{\sinh(\hbar\beta w_n)} (x_n - x_n^{(0)})^2 - \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma \quad (4.34)$$

$$\times k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)$$

إذن نبقي مع النواة غير المحلية:

$$k_n(\tau) = \frac{c_n^2}{\hbar\beta m_n w_n^2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{\nu_l^2}{w_n^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l \tau) \quad (4.35)$$

يمكن إظهار أن هذه النواة لا تحوي بعد الآن مساهمة محلية بكثافة:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma) = -\frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) \quad (4.36)$$

$$\times [(\bar{q}(\tau) - \bar{q}(\sigma))^2 - (\bar{q}(\tau)^2 + \bar{q}(\sigma)^2)]$$

الطرف الأول هو غير محلي لأنه يحتوي فرق $(\bar{q}(\tau) - \bar{q}(\sigma))$, باستغلال التناظر ل $k_n(\tau)$, الطرف الثاني يمكن التعبير عنه:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) (\bar{q}(\tau)^2 + \bar{q}(\sigma)^2) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}(\tau)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma) \quad (4.37)$$

إثبات هذه المساواة موضح في الملحق (6.ا).

إذن, هذا الحد يمكن أن ينتج في مساهمة محلية, على أية حال, التكامل على المجال الزمني من 0 إلى $(\hbar\beta)$ يوافق معامل فوري الموافق ل $(l=0)$ والمعدوم أي $(\frac{c_n^2}{m_n w_n^2} \frac{\nu_0^2}{w_n^2 + \nu_0^2} = 0)$ من أجل $k_n(\tau)$:

$$\int_0^{\hbar\beta} k_n(\tau) d\tau = 0 \quad (4.38)$$

كنتيجة, النواة $k_n(\tau)$ بالفعل ترفع من المساهمة النقية المحلية للفعل. ومنه تكتب (4.36):

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma) = -\frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) (\bar{q}(\tau) - \bar{q}(\sigma))^2 \quad (4.39)$$

بنفس الطريقة في تحديد منتشر هزاز توافقي مدفوع أي من خلال تعويض (2.84) في العنصر (2.6.2) تصبح عبارة دالة التأثير (4.24) بوضع نفس الشروط لتحديد الفعل الكلاسيكي الإقليدي (4.35) أي بوضع $(t \rightarrow -i\hbar\beta)$

$$\mathcal{F}_n[\bar{q}] = \sqrt{\frac{m_n w_n}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta w_n)}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_n^{E,cl}[\bar{q}, \bar{x}_n]\right) \quad (4.40)$$

$$= \sqrt{\frac{m_n w_n}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta w_n)}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \frac{m_n w_n (\cosh(\hbar\beta w_n) - 1)}{\sinh(\hbar\beta w_n)} (x_n - x_n^{(0)})^2\right) \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)\right) \quad (4.41)$$

الآن يمكن أن ننفذ التكامل الغوسي على x_n :

$$\mathcal{F}_n[\bar{q}] = \sqrt{\frac{m_n w_n}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta w_n)}} \sqrt{\frac{\pi\hbar \sinh(\hbar\beta w_n)}{m_n w_n (\cosh(\hbar\beta w_n) - 1)}} \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)\right) \\ = A \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)\right)$$

حيث:

$$A = \sqrt{\frac{1}{2(\cosh(\hbar\beta w_n) - 1)}} \\ = \sqrt{\frac{1}{2[\cosh^2(\hbar\beta w_n/2) + \sinh^2(\hbar\beta w_n/2) - (\cosh^2(\hbar\beta w_n/2) - \sinh^2(\hbar\beta w_n/2))]}} \\ = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta/w_n 2)} = \mathcal{Z}_n \quad (4.42)$$

بالتعويض في دالة التأثير نجد:

$$\mathcal{F}_n[\bar{q}] = \mathcal{Z}_n \exp\left(\frac{-1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)\right) \quad (4.43)$$

دالة التوزيع \mathcal{Z}_n نتأتى من خلال مساهمة التآرجحات. ويمكن إظهار أنها تعطى بالعلاقة (4.22) على سبيل المثال بالمقارنة مع الحالة غير الموصولة $c_n = 0$ التي عندها $\mathcal{Z}_n = F_n[\bar{q}]$ مع (4.21) نجد أخيرا دالة التأثير:

$$\mathcal{F}[\bar{q}] = \exp\left(\frac{-1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)\right) \quad (4.44)$$

مع:

$$k(\tau) = \sum_{n=1}^N k_n(\tau) = \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{\hbar\beta m_n w_n^2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{\nu_l^2}{w_n^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l \tau) \quad (4.45)$$

باستعمال الكثافة الطيفية لهزازات الخزان في (3.23) نجد:

$$k(\tau) = \frac{2}{\hbar\beta} \int_0^\infty \frac{dw J(w)}{\pi w} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{\nu_l^2}{w_n^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l\tau) \quad (4.46)$$

النواة $k_n(\tau)$ يمكن ربطها بنواة التخماد $\gamma(t)$ بملاحظة تحويل لابلاس للأخيرة الذي يعطى من الشكل:

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}(z) &= \int_0^{+\infty} \exp(-zt)\gamma(t)dt = \frac{2}{m} \int_0^{+\infty} \frac{dw J(w)}{\pi w} \int_0^{+\infty} dt \exp(-zt) \cos(wt) \\ &= \frac{2}{m} \int_0^{+\infty} \frac{dw J(w)}{\pi w} \frac{z}{z^2 + w^2} \end{aligned} \quad (4.47)$$

تفاصيل حل هذا التكامل موضحة في الملحق (7.1).

في السطر الأول استعملنا العلاقة (3.24) بين نواة التخماد والكثافة الطيفية لهزازات الخزان. بملاحظة (4.46) و (4.47) يمكننا أخيرا التعبير عن النواة كالتالي:

$$k(\tau) = \frac{m}{\hbar\beta} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} |\nu_l| \hat{\gamma}(|\nu_l|) \exp(i\nu_l\tau) \quad (4.48)$$

من أجل التخماد الأومي التام، النواة هي متباعدة بشكل عالي إذن نعرف قطع درود. تحويل لابلاس لنواة التخماد الموافقة يُحصل عليه من خلال (3.29) كالتالي [3]:

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}(z) &= \int_0^{+\infty} \exp(-zt)(\gamma w_D \exp(-w_D|t|))dt \\ &= -\gamma w_D \left(\frac{\exp(-(w_D + z)t)}{w_D + z} \right) \Big|_0^{+\infty} \\ &= \frac{\gamma w_D}{w_D + z} \end{aligned} \quad (4.49)$$

التي تختصر إلى $\hat{\gamma}(z) = \gamma$ من أجل التخماد الأومي التام. نعتبر نواة التخماد لنموذج درود. بما أن معاملات فوري للنواة تمثل ثابت من أجل $(N \rightarrow \infty)$ ، فإنه يمكن فصل دالة دلتا الدورية: $\delta(\tau)$. وبالتعبير عن مقام $\hat{\gamma}(z)$ بدلالة تكامل دالة أسية، فإن الجمع على n يؤول إلى مجموع هندسي فنكتب:

$$k(\tau) = m\gamma w_D \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - n\hbar\beta) - \frac{m\gamma w_D^2}{\hbar\beta} \int_0^{+\infty} ds \frac{\sinh(\nu s)}{\cosh(\nu s) - \cos(\nu\tau)} \exp(-w_D s) \quad (4.50)$$

أين $\nu = \frac{2\pi}{\hbar\beta}$ هي تردد ماتسوبارا الأول. بما أننا مهتمين فقط بحالة تردد القطع العالي جدا w_D ، ننشر التكامل بشكل مقارب بالاعتماد على المكاملة بالتجزئة، عندها تكتب النواة [2]:

$$k(\tau) = m\gamma w_D \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - n\hbar\beta) - \frac{\pi m\gamma}{(\hbar\beta)^2} \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi\tau}{\hbar\beta}\right)} + O(w_D^{-1}) \quad (4.51)$$

من أجل درجات الحرارة المنخفضة، هذا يؤدي إلى رفع مجال طويل للتفاعل بين أجزاء مختلفة لمسير النظام. هذا يُذكر بالتلاشي الجبري للجزء الحقيقي (3.38) لدالة ربط التشويش $K(t)$ ، حيث أن النواة $k(\tau)$ تساوي $K(-i\tau)$.

4.5 صياغة عبارة دالة الفعل الفعالة:

بتلخيص هذه الحسابات، نحصل على النتيجة المهمة أن تأثير المحيط على النظام يمكن أن يُؤخذ بعين الاعتبار بواسطة إضافة مساهمة غير محلية للفعل. نحصل إذن على دالة الفعل الفعالة:

$$S_{eff}^E = S_S^E + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma) \quad (4.52)$$

مع $k(\tau)$ تعطى بواسطة (4.48). إقصاء المحيط مع صياغة تكامل الزمن الحقيقي على المسار، مثلما هي حسابات فاينمان وفرونون [22] المشار إليها في بداية المقطع يمكن أن يقودنا إلى دالة الفعل الفعالة بتركيبة شبيهة ب(4.52). يوجد إختلاف مهم في الحقيقة في أن إنتشار مصفوفة الكثافة تتضمن مسارين بدلا من واحد، بالإضافة إلى أن نواة التكامل عندها بالطبع تظهر في نسختها للزمن الحقيقي [3].

4.6 نتائج وتطبيقات معالجة الأنظمة الكمية المبددة بواسطة التكامل على المسار:

كل المقادير المدروسة في معالجة الأنظمة الكمية المبددة مهمة وتعطي معلومات مفيدة في الدراسة، كنواة التخماد، دالة ربط التشويش، مصفوفة الكثافة المختزلة، دالة التأثير، نواة التكامل، دالة الفعل الفعالة وغيرها لكن هذه الأخيرة هي أهمها.

تصف دالة الفعل الفعالة (4.52) أي نظام معرض لعملية تبددية خطية، وهو مكون أساسي في تصور التكامل على المسار لترموديناميك نظام كمي مفتوح. فمن خلالها نحصل على مصفوفة كثافة إتران النظام الكمي المبدد المختزلة التي تصف حركته وحالته وتحمل أهم المعلومات عنه، وتكتب إذن مصفوفة الكثافة (4.20) بتعويض (4.52) فيها:

$$\rho_{\beta}(q, q') = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\bar{q} \exp\left(\frac{-1}{\hbar} S_{eff}^E[\bar{q}]\right) \quad (4.53)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\bar{q} \exp\left(\frac{-1}{\hbar} S_S^E + \frac{-1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma)\right) \quad (4.54)$$

بما أن مصفوفة الكثافة المختزلة تؤثر فقط على فضاء النظام فقط فإنه يمكن الحصول على التنبؤات الفيزيائية لقياسات النظام الكمي المبدد [1]:

$$\langle A^{(S)} \rangle = tr_S \langle \rho A^{(S)} \rangle \quad (4.55)$$

كما أن التكاملات الإقليدية على المسار، التي تمثل بدالاتها مصفوفة كثافة الإتران الذي أثرها هو دالة التوزيع الكمية \mathcal{Z} ، تقود إلى فهم بسيط حدسي لبنية الحالة الطاقوية الأساسية للنظام حتى ولو كان يملك درجات حرية كثيرة، فمثلا من أجل هاميلتون محدد من الأسفل تُعطى الحالة الطاقوية الأرضية E_0 بالعلاقة [4]:

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}\right) \quad (4.56)$$

بالإضافة إلى أن نتائج هذه الدراسة، على وجه الخصوص، توفر أساس مناقشة الهزاز التوافقي المتخامد، بداية من استغلال حساب دالة توزيعه مما يمكن من فحص مظاهر هذا النظام الكمي المبدد [3].

كما يجدر بالذكر أيضا أن معالجة الأنظمة الكمية المبددة بواسطة التكامل على المسار يمكن تطبيقها على عديد نماذج أو حالات النظام الموصول بالمحيط المجهرية أو العيانية المختلفة حيث يتم تقييم التكاملات على المسار لحساب مصفوفة كثافة الإتران المختزلة (4.54) بطرق مختلفة لإيجاد معلومات عن النظام الكمي المبدد ووصفه، حيث تختلف هذه تفاصيل هذه الدراسة وتتأجها من نموذج إلى آخر. كما يمكن تعميم دراسة الأنظمة الكمية المبددة في مختلف التطبيقات لتشمل المحيطات غير الخطية وكذا الأنظمة متعددة الحالات والنماذج المختلفة وغيرها من التعميمات لكن بإدراج العديد من التغييرات والإعتبارات اللازمة، لتشمل بذلك مجالات عديدة كالكهرباء الضوئية والفيزياء الكيميائية وغيرها. نذكر من بين تطبيقاتها أيضا دراسة كل من [1]:

- الحركة البراونية.
- وصل الفونونات في الإستقطاب الصوتي (acoustic polarization).
- وصل أو تفاعل الفرميونات في النقل العادي والفائق.
- ظاهرة النفق (tunnel) التبددية الكمية مثلا تلك التي يمكن أن يخضع لها إلكترون منفرد.
- الإستقطاب الضوئي (optic polarization).
- وصلة النفق فائقة الناقلية (superconducting tunnel junction).
- الشحن والتأثير المحيطي في وصلات النفق (tunneling junctions).
- جسم ثقيل في معدن وكذا في ناقل فائق.

الخاتمة العامة

الفصل 5

الخاتمة العامة

إن ظاهرة التبدد، الناتجة عن وصل النظام بحيطه والذي ستسبب بدوره بسلسلة من التأثيرات تتمثل في إنتقال الطاقة من النظام إلى المحيط بطريقة غير عكسية بالإضافة إلى تولد قوة تأرجحية تؤدي إلى تأرجحات النظام وتعكس خصائص المحيط كما تُحدث ظاهرة تلاشي الترابط، تملك تأثيرات تلعب دورا مهما في تنفيذ الحواسيب الكمية وفي عديد المجالات الفيزيائية والكيميائية، ومن أجل دراستها توجهت الأنظار لأداة رياضية جميلة ومتميزة تقدم وجهة نظر بديلة في ميكانيك الكم وهي طريقة التكامل على المسار التي تشكل قفزة في دراسة الأنظمة الكمية بشكل ناجح ومتمكن ولها تطبيقات واسعة.

في هذا العمل تم التطرق في البداية إلى دراسة أسلوب التكامل على المسار حيث تم استخلاص صيغته وتمثيله لميكانيك الكم إنطلاقا من تعريف المنتشر كأداة أساسية لصياغة فاينمان للتكامل على المسار والذي ينتج من خلال تقسيم حل معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن، حيث يحمل كل المعلومات المطلوبة لتحديد تطورها الزمني فهو يمثل بذلك سعة الإنتقال، كما تم إثبات أنه يحمل كل المعلومات بخصوص الطاقات والحالات المميزة وهو ما يؤكد أنه حزمة جيدة تحمل كل المعلومات الديناميكية للنظام. وبالإعتماد على خاصية (semigroup) لهذا المنتشر وبتقسيم زمن التقدم t إلى N جزء من المجالات الصغيرة مع أخذ النهاية ($N \rightarrow +\infty$) يتفكك هذا المنتشر إلى عدد لانهائي من المنتشرات لأزمنة ومواقع وسيطية وتصبح المكاملة على كل المواضع الوسيطة تكامل على كل المسارات الممكنة وذلك بالإعتماد على تحليلات فيزيائية رياضية، فنتحصل ببساطة على تمثيل فاينمان لسعة الإنتقال بين حالتي البداية والنهاية (ومنه لميكانيك الكم) وهو الجمع على كل المسارات الرابطة بين الحالتين لمعامل الوزن $\exp(\frac{i}{\hbar}S[x])$ ، مع إختلاف تعريف قياس التكامل D بالنسبة للهاميلتونات التريعية عن تلك غير التريعية. ومن خلال التكامل على المسار يتم دراسة السلوك الكلاسيكي، ففي النهاية الكلاسيكية ($\hbar \rightarrow 0$) يتفرد المسار الكلاسيكي في سعة الإنتقال لأن المساهمة المهيمنة فيها تكون من المسارات القريبة منه بينما بقية المسارات تلغي مساهمات بعضها ليكون متوسطها معدوم. ما يزيد من جمال وقوة التكامل الدالي إحتوائه ومكافؤته لمعادلة شرودينغر وذلك بالبرهان. بتطبيق هذه الطريقة على كل من مسألة الجسم الحر والهزاز التوافقي المدفوع يتم التوصل للحلول بدقة، ففي الحالة الأولى سعة الإنتقال المتحصل عليها تملك نفس سلوك دالة ديراك ومنه يمكن تقييمها بصراحة، وتوافق بالضبط ما يمكن الحصول عليه من خلال معادلة شرودينغر وكذا تحوي من جهة أخرى الفعل الكلاسيكي أما معالجة مسألة الهزاز فتفيد بدورها مباشرة في معالجة الأنظمة الكمية المبددة.

كما تم التطرق إلى وصف الأنظمة المبددة في ميكانيك الكم وذلك بواسطة مؤثر هاميلتون في حضور قوى خارجية متعلقة بالزمن تضمن حفظ الطاقة. بالإعتماد على أنسب نموذج فيزيائي للوصف وهو الذي يتم فيه تقسيم النظام الكلي إلى نظام فرعي موصول بحيطه الممثل بواسطة خزان إهتزازي حراري، حيث يتكون هاميلتون الجملة

الكلية من ثلاث هاميلتونات مساهمة فيه ناتجة عن كل من النظام، المحيط والتفاعل بينهما الناتج عن الوصل . يظهر التخماد من خلال إقصاء المحيط في معادلة حركة النظام المتحصل عليها من خلال تصور هيلينبيرغ، لتنتج معادلة الحركة الفعالة التي تصف النظام لوحده وتأخذ شكل معادلة (Langevin) المعممة التي تحوي مقادير فيزيائية مهمة تمثل في نواة التخماد ومؤثر قوة التآرجح التي يتم صياغة دالة التشويش من خلالها، ليتم التعبير عن الكميات الفيزيائية التي تصف المحيط بعبارات الكثافة الطيفية لهزازاته لتفسير تصرفها في مختلف الحالات.

وفي الأخير تم تطبيق أسلوب التكامل على المسار في وصف الأنظمة الكمية المبددة وذلك باعتبار نفس نموذج النظام الموصول بمحيطه وبإقصاء درجات حرية المحيط أيضا وذلك من خلال حساب مصفوفة كثافة الإتران المختزلة المتحصل عليها بحساب الأثر على درجات حرية المحيط لمصفوفة كثافة الإتران الكلية الممثلة بدلالة صيغة التكامل على المسار للزمن التخيلي والملقبة بالتكاملات الإقليدية على المسار ليظهر تأثير المحيط على النظام في مؤثر الكثافة المختزلة في شكل دالة التأثير التي تُحسب بدلالة مقدار مهم وهو نواة التكامل، مما يقود إلى صياغة عبارة دالة الفعل الفعالة. هذه الأخيرة يمكن إيجادها بتركيبية مشابهة لتلك المتحصل عليها من خلال إقصاء المحيط في مصفوفة الكثافة الكلية المتطورة زمنيا وهذا بالضبط ما قام به فاينمان وفرنون مع وجود إختلاف يتمثل في أن إنتشار مصفوفة الكثافة تتضمن مسارين بدلا من واحد، بالإضافة إلى أن نواة التكامل تظهر عندها بالطبع في نسختها للزمن الحقيقي . دالة الفعل الفعالة تصف أي نظام معرض لأي عملية تبددية خطية، وهي مكون أساسي في تصور التكامل على المسار لترموديناميك نظام كمي مفتوح. فن خلالها يتم الحصول على مصفوفة كثافة الإتران المختزلة والتي تصف حالة النظام وديناميكة وتحمل أهم المعلومات عنه، كما يمكن فحص بنية الحالة الطاقوية الأرضية من خلال دالة توزيعه بالإعتماد على صيغة التكاملات الإقليدية على المسار. كل هذه النتائج جعلت هذه المعالجة تُستغل في تطبيقات متنوعة نذكر منها دراسة ظاهرة النفق التبددية ووصل الفونونات في الإستقطاب الصوتي، حيث عممت هذه الدراسة لتشمل المحيطات غير الخطية، مختلف النماذج العيانية والمجهرية وكذا الأنظمة متعددة الحالات وذلك بإدراج التغييرات والإعتبارات اللازمة.

كل ذلك يثبت قوة وصف التكامل على المسار بل تفوقه على تصوري شرودينغر وهيلينبيرغ في توفير معالجة دقيقة وفهم عميق أكثر حدسية للأنظمة الكمية المبددة.

الملاحق ا

Appendix

1.1 حل معادلة حركة المحيط التفاضلية:

لحل المعادلة للحركة للمحيط نعتبر $q(t)$ إحدائي النظام كدالة للزمن. حيث يمكن كتابة معادلة حركة المحيط من الشكل:

$$m_n \ddot{x}_n + m_n w_n^2 x_n = c_n q(t) \quad (1.0)$$

سنقوم بحل هذه المعادلة التفاضلية غير المتجانسة بطريقة تغيير الثوابت, حيث يعطى حلها من الشكل:

$$x_n(t) = x_{nc} + x_{np} \quad (2.0)$$

الحل العام x_{nc} من أجل المعادلة التفاضلية المتجانسة أي:

$$m_n \ddot{x}_n + m_n w_n^2 x_n = 0 \quad (3.0)$$

يعطى من الشكل:

$$x_{nc} = c_{n1} x_{n1}(t) + c_{n2} x_{n2}(t) \quad (4.0)$$

لدينا:

$$\Delta = -4w_n^2 < 0 \Rightarrow \sqrt{\Delta} = 2iw_n$$

ومنه:

$$x_n = \pm iw_n \quad (5.0)$$

من ناحية أخرى في هذه الحالة يعطى عموماً:

$$x_n = \alpha \pm i\beta \quad (6.0)$$

حيث في هذه الحالة تعطى:

$$\beta = w_n, \alpha = 0 \quad (7.0)$$

كما لدينا عموماً تعطى:

$$x_{nc} = \exp(\alpha x_n) (c_{n1} \cos(\beta x_n) + c_{n2} \sin(\beta x_n)) \quad (8.0)$$

بتعويض α, β, x_n في المعادلة أعلاه نجد:

$$x_{nc}(t) = c_{n1} \cos(w_n t) + c_{n2} \sin(w_n t) \quad (9.1)$$

من جهة لدينا:

$$x_{nc}(0) = c_{n1} \quad (10.1)$$

ونجد من جهة أخرى بتعويض الحل في المعادلة التفاضلية المتجانسة:

$$\dot{x}_{nc}(0) = \frac{p_n(0)}{m_n} = c_{n2} w_n \quad (11.1)$$

ومنه:

$$c_{n2} = \frac{p_n(0)}{m_n w_n} \quad (12.1)$$

بتعويض كل من c_{n1} و c_{n2} في x_{nc} نجد:

$$x_{nc}(t) = x_n(0) \cos(w_n t) + \frac{p_n(0)}{m w_n} \sin(w_n t) \quad (13.1)$$

أما الحل الخاص للمعادلة التفاضلية غير المتجانسة x_{np} فيعطى من الشكل:

$$x_{np} = u_{n1}(t)x_{n1}(t) + u_{n2}(t)x_{n2}(t) \quad (14.1)$$

بإشتقاقه نجد:

$$\dot{x}_{np}(t) = \dot{u}_{n1}(t)x_{n1}(t) + u_{n1}(t)\dot{x}_{n1}(t) + \dot{u}_{n2}(t)x_{n2}(t) + u_{n2}(t)\dot{x}_{n2}(t) \quad (15.1)$$

بفرض أن:

$$\dot{u}_{n1}(t)x_{n1}(t) + \dot{u}_{n2}(t)x_{n2}(t) = 0 \quad (16.1)$$

نجد:

$$\dot{x}_{np}(t) = u_{n1}(t)\dot{x}_{n1}(t) + u_{n2}(t)\dot{x}_{n2}(t) \quad (17.1)$$

بإشتقاق الحل الخاص مرة أخرى نجد:

$$\ddot{x}_{np} = \dot{u}_{n1}(t)\dot{x}_{n1}(t) + u_{n1}(t)\ddot{x}_{n1}(t) + \dot{u}_{n2}(t)\dot{x}_{n2}(t) + u_{n2}(t)\ddot{x}_{n2}(t) \quad (18.1)$$

المعادلة التفاضلية غير المتجانسة نكتبها بالشكل العام :

$$\ddot{x}_n(t) + p_n(t)\dot{x}_n(t) + k_n(t)x_n(t) = g_n(t) \quad (19.1)$$

بتعويض $\ddot{x}_{np}(t), \dot{x}_{np}(t), x_{np}(t)$ في المعادلة غير المتجانسة نجد:

$$u_{n1}(t)[\ddot{x}_{n1}(t) + p_n(t)\dot{x}_{n1}(t) + k_n(t)x_{n1}(t)] + u_{n2}(t)[\ddot{x}_{n2}(t) + p_n(t)\dot{x}_{n2}(t) + k_n(t)x_{n2}(t)] + \dot{u}_{n1}(t)\dot{x}_{n2}(t) + \dot{u}_{n2}(t)\dot{x}_{n2}(t) = g_n(t) \quad (20.1)$$

ما داخل كل من الحاضنتين معدوم لأن كل من x_{n2}, x_{n1} هو حل للمعادلة المتجانسة ومنه تُختصر المعادلة الأخيرة إلى :

$$\dot{u}_{n1}(t)\dot{x}_{n2}(t) + \dot{u}_{n2}(t)\dot{x}_{n1}(t) = g_n(t) \quad (21.1)$$

تشكل هذه المعادلة الأخيرة بالإضافة للمعادلة الصفرية التي فرضناها في البداية نظام معادلتين خطيتين جبريتين للمشتقات $\dot{u}_{n2}(t), \dot{u}_{n1}(t)$ لدوال غير معروفة. تكتب المعادلتين في هذه الحالة:

$$\cos(w_n t)\dot{u}_{n1}(t) + \sin(w_n t)\dot{u}_{n2}(t) = 0 \quad (22.1)$$

$$w_n \sin(w_n t)\dot{u}_{n1}(t) + w_n \cos(w_n t)\dot{u}_{n2}(t) = \frac{c_n q(t)}{m_n} \quad (23.1)$$

بحل النظام نحصل على:

$$\dot{u}_{n1}(t) = \frac{-x_{n2}(t)g_n(t)}{W(x_{n1}, x_{n2})(t)} \quad (24.1)$$

$$\dot{u}_{n2}(t) = \frac{x_{n1}(t)g_n(t)}{W(x_{n1}, x_{n2})(t)} \quad (25.1)$$

أين $W(x_{n1}, x_{n2})(t)$ هو (The Wronskian) ل (x_{n1}, x_{n2}) . بالإسقاط على المعادلة التفاضلية غير المتجانسة الخاصة بالمحيط لدينا:

$$g_n(t) = \frac{c_n q(t)}{m_n} \quad (26.1)$$

$$\begin{aligned} W(x_{n1}, x_{n2})(t) &= x_{n1}(t)\dot{x}_{n2}(t) - x_{n2}(t)\dot{x}_{n1}(t) \\ &= \cos^2(w_n t) + \sin^2(w_n t) = 1 \end{aligned} \quad (27.1)$$

ومنه نجد:

$$\dot{u}_{n1}(t) = -\sin(w_n t) \frac{c_n q(t)}{m_n w_n} \quad (28.1)$$

$$\dot{u}_{n2}(t) = \cos(w_n t) \frac{c_n q(t)}{m_n w_n} \quad (29.1)$$

بالمكاملة نجد:

$$x_{np}(t) = -\frac{c_n}{m_n w_n} \cos(w_n t) \int_0^t \sin(w_n s) q(s) ds + \frac{c_n}{m_n w_n} \sin(w_n t) \quad (30.1)$$

$$\begin{aligned} &\times \int_0^t \cos(w_n s) q(s) ds \\ &= \frac{c_n}{m_n w_n} \int_0^t \sin(w_n(t-s)) q(s) ds \end{aligned} \quad (31.1)$$

ومنه أخيرا يُعطى حل معادلة حركة المحيط:

$$x_n(t) = x_n(0) \cos(w_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n w_n} \sin(w_n t) + \frac{c_n}{m_n} \int_0^t \sin(w_n(t-s)) q(s) ds \quad (32.1)$$

2.1 إثبات إنعدام متوسط قوة التآرج المعطى بواسطة مصفوفة كثافة الإيزان للمحيط بإعتبار الوصل مع المحيط:

بما أن هزازات المحيط غير موصولة ببعضها البعض فإنه يكفي إثبات إنعدام متوسط قوة التآرج من أجل هزاز محيطي واحد ولنرمز له بـ n وتعميم النتيجة على المحيط ككل:
حيث يمكن التعبير عن قوة التآرج بالعلاقة:

$$\xi(t) = \sum_{n=1}^N \xi_n(t) \quad (33.1)$$

حيث:

$$\xi_n(t) = c_n \left[\left(x_n(0) - \frac{c_n}{m_n w_n^2} q(0) \right) \cos(w_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n w_n} \sin(w_n t) \right] \quad (34.1)$$

$$= c_n \left[X_n(0) \cos(w_n t) + \frac{P_n(0)}{m_n w_n} \sin(w_n t) \right] \quad (35.1)$$

حيث $X_n(0)$ و $P_n(0)$ هما مؤثري الموضع وكمية الحركة للهاز المحيطي المنزاحين نتيجة الوصل:

$$X_n(0) = x_n(0) - \frac{c_n}{m_n w_n^2} q(0) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} (b_n + b_n^+) \quad (36.1)$$

$$P_n(0) = p_n(0) = -i \sqrt{\frac{\hbar m_n w_n}{2}} (b_n - b_n^+) \quad (37.1)$$

حيث b_n و b_n^+ هما مؤثري الرفع والخفض للهاز المنزاحين نتيجة الوصل على الترتيب.
ومنه نعرف مجموع هاميلتون الهزاز H_{B_n} وهاميلتون وصله مع النظام H_{SB_n} كالتالي:

$$H_{B_n} + H_{SB_n} = \frac{p_n(0)^2}{2m_n} + \frac{m_n w_n^2}{2} \left(x_n(0) - \frac{c_n}{m_n w_n} q \right)^2 \quad (38.1)$$

$$= \frac{P_n(0)^2}{2m_n} + \frac{m_n w_n^2}{2} X_n(0)^2 \quad (39.1)$$

ومنه:

$$\begin{aligned} tr_{B_n}(\xi_n(t) \exp(-\beta[H_{B_n} + H_{SB_n}])) &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} \langle m_n | c_n \\ &\times \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} (b_n + b_n^+) \cos(w_n t) - i \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} (b_n - b_n^+) \sin(w_n t) \right] \exp\left(-\beta \hbar w_n \left(b_n b_n^+ + \frac{1}{2}\right)\right) |m_n \rangle \\ &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} \exp\left(-\beta \hbar w_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) \langle m_n | c_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} (b_n \exp(-i w_n t) + b_n^+ \exp(i w_n t)) |m_n \rangle \\ &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} \exp\left(-\beta \hbar w_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) \langle m_n | c_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} \\ &\times [\sqrt{m_n} \exp(-i w_n t) |m_n - 1 \rangle + \sqrt{m_n + 1} \exp(i w_n t) |m_n + 1 \rangle] = 0 \end{aligned} \quad (40.1)$$

حيث: $|m_n \rangle$ هي الحالات الخاصة للهاز المحيطي.

ومنه نتوصل للعلاقة المطلوبة:

$$\langle \xi(t) \rangle_{B+SB} = \sum_{n=1}^N \langle \xi_n(t) \rangle_{B_n+SB_n} = 0 \quad (41.1)$$

3.1 إثبات إنعدام المتوسط الحراري للقوة $\zeta(t)$ بإعتبار المحيط فقط:

بنفس الطريقة في الملحق السابق نحسب المتوسط لهزاز محيطي واحد ومن ثم نعمم النتيجة على بقية الهزازات ومنه المحيط ككل:
لدينا:

$$\zeta(t) = \sum_{n=1}^N \zeta_n(t) \quad (42.1)$$

حيث:

$$\zeta_n(t) = c_n(x_n(0) \cos(w_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n w_n} \sin(w_n t)) \quad (43.1)$$

$$\begin{aligned} &= c_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} [(a_n + a_n^+) \cos(w_n t) - i(a_n - a_n^+) \sin(w_n t)] \\ &= c_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} (a \exp(-i w_n t) + a^+ \exp(i w_n t)) \end{aligned} \quad (44.1)$$

حيث a_n و a_n^+ هما مؤثري الرفع والخفض للهزاز المحيطي n في غياب الوصل:

$$tr_{B_n} \zeta_n(t) \exp(-\beta H_{B_n}) = \sum_{m_n=0}^{+\infty} \langle m_n | \zeta_n(t) \exp(-\beta H_{B_n}) | m_n \rangle \quad (45.1)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} c_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n w_n}} \exp\left(-\beta \hbar w_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) \langle m_n | \\ &\times (\sqrt{m_n} \exp(-i w_n t) | m_n - 1 \rangle + \sqrt{m_n + 1} \exp(i w_n t) | m_n + 1 \rangle) = 0 \end{aligned} \quad (46.1)$$

ومنه:

$$\langle \zeta_n(t) \rangle_{B_n} = \frac{tr_{B_n}(\zeta_n(t) \exp(-\beta H_{B_n}))}{tr_{B_n} \exp(-\beta H_{B_n})} = 0 \quad (47.1)$$

إذن:

$$\langle \zeta(t) \rangle_B = \sum_{n=1}^N \langle \zeta_n(t) \rangle_{B_n} = 0 \quad (48.1)$$

4.1 إيجاد عبارة دالة ربط التشويش:

دالة ربط التشويش $K(t)$ تعرف بالعلاقة:

$$K(t) = \langle \zeta(t) \zeta(0) \rangle_B = \sum_{n,l} c_n c_l \langle (x_n(0) \cos(w_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n w_n} \sin(w_n t)) x_l(0) \rangle_B \quad (49.1)$$

يكفي حساب المتوسطين:

$$\langle x_n(0)x_l(0) \rangle_B = \langle x_n(0)x_l(0) \rangle_{B_n} = \frac{\text{tr}_{B_n}(x_n(0)x_l(0) \exp(-\beta H_{B_n}))}{\text{tr}_{B_n} \exp(-\beta H_{B_n})} \quad (50.1)$$

$$\langle p_n(0)x_l(0) \rangle_B = \langle p_n(0)x_l(0) \rangle_{B_n} = \frac{\text{tr}_{B_n}(p_n(0)x_l(0) \exp(-\beta H_{B_n}))}{\text{tr}_{B_n} \exp(-\beta H_{B_n})} \quad (51.1)$$

حيث:

$$\begin{aligned} \text{tr}_{B_n} \exp(-\beta H_{B_n}) &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} \langle m_n | \exp\left(-\beta \hbar \omega_n \left(a_n a_n^+ + \frac{1}{2}\right)\right) | m_n \rangle \\ &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} \exp\left(-\beta \hbar \omega_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega_n / 2)} = \mathcal{Z}_n \end{aligned} \quad (52.1)$$

نبدأ بحساب المتوسط الأول:

$$\begin{aligned} \text{tr}_{B_n}(x_n(0)x_l(0) \exp(-\beta H_{B_n})) &= \sum_{m_n=0}^{+\infty} \langle m_n | \left(\frac{\hbar}{2m_n \omega_n} (a_n + a_n^+)(a_l + a_l^+) \exp(-\beta H_{B_n})\right) | m_n \rangle \\ &= \delta_{nl} \sum_{m_n=0}^{+\infty} \frac{\hbar}{2m_n \omega_n} \exp\left(-\beta \hbar \omega_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) \langle m_n | a_n^2 + a_n^{+2} + a_n^+ a_n + a_n a_n^+ | m_n \rangle \\ &= \delta_{nl} \sum_{m_n=0}^{+\infty} \frac{\hbar}{2m_n \omega_n} \exp\left(-2\alpha \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) (2m_n + 1) \\ &= -\delta_{nl} \frac{d}{d\alpha} \left[\sum_{m_n=0}^{+\infty} \frac{\hbar}{2m_n \omega_n} \exp\left(-2\alpha \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) \right] \\ &= -\delta_{nl} \frac{\hbar}{2m_n \omega_n} \frac{d}{d\alpha} \left[\frac{1}{2 \sinh(\alpha)} \right] \\ &= \delta_{nl} \frac{\hbar}{4m_n \omega_n} \frac{\cosh\left(\frac{\hbar \beta \omega_n}{2}\right)}{\sinh^2\left(\frac{\hbar \beta \omega_n}{2}\right)} \end{aligned} \quad (53.1)$$

بتعويض (52.1) و (53.1) في (50.1) نتحصل على المتوسط الأول:

$$\langle x_n(0)x_l(0) \rangle_B = \delta_{nl} \frac{\hbar}{2m_n \omega_n} \coth\left(\frac{\hbar \beta \omega_n}{2}\right) \quad (54.1)$$

نتقل لحساب المتوسط الثاني:

$$\begin{aligned} \langle p_n(0)x_l(0) \rangle_B &= \frac{\text{tr}_{B_n}(p_n(0)x_l(0) \exp(-\beta H_{B_n}))}{\mathcal{Z}_n} \\ &= \frac{\delta_{nl}}{\mathcal{Z}_n} \sum_{m_n=0}^{+\infty} \left(-i \frac{\hbar}{2} \langle m_n | (a_n - a_n^+)(a_n + a_n^+) \exp(-\beta H_{B_n}) | m_n \rangle\right) \\ &= -i \frac{\hbar}{2} \frac{\delta_{nl}}{\mathcal{Z}_n} \sum_{m_n=0}^{+\infty} \exp\left(-\beta \hbar \omega_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) \langle m_n | a_n^2 - a_n^{+2} + a_n a_n^+ - a_n^+ a_n | m_n \rangle \\ &= -i \frac{\hbar}{2} \frac{\delta_{nl}}{\mathcal{Z}_n} \sum_{m_n=0}^{+\infty} \exp\left(-\beta \hbar \omega_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right)\right) = -i \frac{\hbar}{2} \delta_{nl} \end{aligned} \quad (55.1)$$

ومنه نجد أخيرا دالة ربط التشويش:

$$\langle \zeta(t)\zeta(0) \rangle_B = \sum_{n=1}^N \frac{\hbar c_n^2}{2m_n w_n} \left[\coth\left(\frac{\hbar\beta w_n}{2}\right) \cos(w_n t) - i \sin(w_n t) \right] \quad (56.1)$$

5.1 نشر نواة التكامل في شكل سلسلة فوري:

نريد نشر نواة التكامل:

$$K_n(\tau) = \frac{c_n^2}{2m_n w_n} \frac{\cosh(w_n(\hbar\beta/2 - \tau))}{\sinh(\hbar\beta w_n/2)} \quad (57.1)$$

التي نحتاجه لمكاملتها على مجال زمني طولها $\hbar\beta$ أي على المجال $[0, \hbar\beta]$ في شكل سلسلة فوري: يعطى نشر دالة كيفية $f(x)$ إلى سلسلة فوري بمعاملات مركبة C_l حيث أن الدالة $f(x)$ حقيقية دورية دورها $T = 2L$ وقابلة للمكاملة على مجال طولها T ولنأخذ مثلا المجال $[0, 2L]$:

$$f(x) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} C_l \exp\left(\frac{il\pi x}{L}\right) \quad (58.1)$$

حيث:

$$C_l = \frac{1}{2L} \int_0^{2L} dx f(x) \exp\left(\frac{il\pi x}{L}\right) \quad (59.1)$$

ومنه نشر $K_n(\tau)$ إلى سلسلة فوري يكتب من الشكل:

$$K_n(\tau) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} C_l \exp\left(\frac{2il\pi\tau}{\hbar\beta}\right) \quad (60.1)$$

$$\begin{aligned} C_l &= \frac{c_n^2}{2\hbar\beta m_n w_n} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{\cosh(w_n(\hbar\beta/2) - \tau)}{\sinh(\hbar\beta w_n/2)} \exp\left(\frac{2il\pi\tau}{\hbar\beta}\right) \\ &= \frac{c_n^2}{2\hbar\beta m_n w_n \sinh(\hbar\beta w_n/2)} \mathcal{J} \end{aligned} \quad (61.1)$$

حيث:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \cosh(w_n(\hbar\beta/2) - \tau) \exp\left(\frac{2i\pi\tau}{\hbar\beta}\right) \quad (62.1) \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [\exp(w_n(\hbar\beta - \tau)) - \exp(-w_n(\hbar\beta - \tau))] \exp\left(\frac{2i\pi\tau}{\hbar\beta}\right) \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau [\exp(\hbar\beta w_n/2) \exp\left(\left(\frac{2i\pi l}{\hbar\beta} - w_n\right)\tau\right) + \exp(-\hbar\beta w_n/2) \exp\left(\left(\frac{2i\pi l}{\hbar\beta} + w_n\right)\tau\right)] \\
 &= \frac{1}{2} \left[\exp(\hbar\beta w_n/2) \frac{\exp\left(\left(\frac{2i\pi l}{\hbar\beta} - w_n\right)\tau\right)}{\frac{2i\pi l}{\hbar\beta} - w_n} \Big|_0^{\hbar\beta} + \exp(-\hbar\beta w_n/2) \frac{\exp\left(\left(\frac{2i\pi l}{\hbar\beta} + w_n\right)\tau\right)}{\frac{2i\pi l}{\hbar\beta} + w_n} \Big|_0^{\hbar\beta} \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{\exp(\hbar\beta w_n/2)}{w_n - \frac{2i\pi l}{\hbar\beta}} (1 - \exp(-\hbar\beta w_n + 2i\pi l)) + \frac{\exp(-\hbar\beta w_n/2)}{w_n + \frac{2i\pi l}{\hbar\beta}} (\exp(\hbar\beta w_n + 2i\pi l) - 1) \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{\exp(\hbar\beta w_n/2) - \exp(-\hbar\beta w_n/2)}{w_n - \frac{2i\pi l}{\hbar\beta}} + \frac{\exp(\hbar\beta w_n/2) - \exp(-\hbar\beta w_n/2)}{w_n + \frac{2i\pi l}{\hbar\beta}} \right] \\
 &= \sinh(\hbar\beta w_n/2) \frac{2w_n}{w_n^2 + \left(\frac{2i\pi l}{\hbar\beta}\right)^2} = 2 \sinh(\hbar\beta w_n/2) \frac{w_n}{w_n^2 + \nu_l^2} \quad (63.1)
 \end{aligned}$$

بتعويض عبارة \mathcal{J} النهائية في C_l ومن ثم تعويضه في عبارة $K_n(\tau)$ (60.1) نجد النشر المطلوب لنواة التكامل إلى سلسلة فوري المعطى في (4.30):

$$K_n(\tau) = \frac{c_n^2}{\hbar\beta m_n w_n} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{w_n}{w_n^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l \tau) \quad (64.1)$$

6.1 إثبات العلاقة (4.37):

نريد عرض البرهان الرياضي للمساواة (4.37) المعطاة كالتالي:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\tau - \sigma) (\bar{q}(\tau)^2 + \bar{q}(\sigma)^2) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}(\tau)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma) \quad (65.1)$$

لدينا:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}^2(\tau) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \quad (66.1)$$

بوضع $(x = \tau - \sigma)$ نجد:

$$\int_0^{\tau} d\sigma k_n(\tau - \sigma) = - \int_{\tau}^0 dx k_n(x) = \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\sigma) \quad (67.1)$$

بالتعويض في (66.1) نجد:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}^2(\tau) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\sigma) \quad (68.1)$$

باستغلال العلاقة الموالية:

$$\int_0^a dx \int_0^x dy f(x, y) = \int_0^a dy \int_y^a dx f(x, y) \quad (69.1)$$

حيث $0 < y < x < a$: نكتب:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) \bar{q}^2(\sigma) = \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \int_\sigma^{\hbar\beta} d\tau k_n(\tau - \sigma) \bar{q}^2(\sigma) \quad (70.1)$$

حيث: $0 < \sigma < \tau < \hbar\beta$.
كما يمكننا أن نكتب العلاقة (70.1) بالشكل:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\sigma \int_\sigma^{\hbar\beta} d\tau k_n(\tau - \sigma) \bar{q}^2(\sigma) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_\tau^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma - \tau) \quad (71.1)$$

وبوضع $(\sigma - \tau = x)$ نجد:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_\tau^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma - \tau) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\hbar\beta - \tau} dx k_n(x) \quad (72.1)$$

باستغلال تناظر $k_n(x)$:

$$k_n(x) = k_n(\hbar\beta - x) = k_n(x - \hbar\beta) \quad (73.1)$$

نجد:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\hbar\beta - \tau} dx k_n(x) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\hbar\beta - \tau} dx k_n(\hbar\beta - x) \quad (74.1)$$

نضع $(\hbar\beta - x = \sigma)$:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\hbar\beta - \tau} dx k_n(\hbar\beta - x) = - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_{\hbar\beta}^\tau d\sigma k_n(\sigma) \quad (75.1)$$

$$= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_\tau^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma) \quad (76.1)$$

بجمع (76.1) و(68.1) فنجد:

$$\begin{aligned} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\sigma k_n(\tau - \sigma) (\bar{q}(\tau)^2 + \bar{q}(\sigma)^2) &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^\tau d\sigma k_n(\sigma) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_\tau^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma) \\ &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k_n(\sigma) \end{aligned} \quad (77.1)$$

وهو المطلوب.

7.1 إنجاز تحويل لابلاس لنواة التخامد :

$$\hat{\gamma}(z) = \int_0^{+\infty} \exp(-zt) \gamma(t) dt = \frac{2}{m} \int_0^{+\infty} \frac{dw}{\pi} \frac{J(w)}{w} \int_0^{+\infty} dt \exp(-zt) \cos(wt) \quad (78.1)$$

يكفي حل التكامل J :

$$J = \int_0^{+\infty} dt \exp(-zt) \cos(wt) \quad (79.1)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dt \exp(-zt) (\exp(iwt) + \exp(-iwt)) \quad (80.1)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dt (\exp((iw - z)t) + \exp(-(iw + z)t)) \quad (81.1)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{\exp((iw - z)t)}{(iw - z)} + \frac{\exp(-(iw + z)t)}{-(iw + z)} \right) \Big|_0^{+\infty} \quad (82.1)$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\frac{\exp(iwt) \exp(-zt)}{z - iw} + \frac{\exp(-(iw + z)t)}{z + iw} \right) \Big|_0^{+\infty} \quad (83.1)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{z - iw} + \frac{1}{z + iw} \right) \quad (84.1)$$

$$= \frac{z}{z^2 + w^2} \quad (85.1)$$

بتعويض الحل في $\hat{\gamma}(z)$ نجد تحويل لابلاس لنواة التخامد:

$$\hat{\gamma}(z) = \frac{2}{m} \int_0^{+\infty} \frac{dw}{\pi} \frac{J(w)}{w} \frac{z}{z^2 + w^2} \quad (86.1)$$

المراجع

- [1] U. Weiss: Quantum Dissipative Systems, World Scientific, Singapore (1999)
- [2] T. Dittrich, P. Hänggi, G.-L. Ingold, B. Kramer, G. Schön, W. Zwerger: Quantum Transport and Dissipation, Wiley-VCH (1998)
- [3] Gert-Ludwig Ingold, Path Integrals and Their Application to Dissipative Quantum Systems, Institut Fur Physik, University Augsburg, D-86135 Augsburg (2002)
- [4] J.Zinn-Justin, Path Integrals In Quantum Mechanics, Oxford University Press, Great Britian (2005)
- [5] Hermann Grabert, Peter Schramm and Gert-Ludwig Ingold, Quantum Brownian Motion, The Functional Integral Approach, Institutfur Theoretische Physik, Universitat Stuttgart, D-7000 Stuttgart 80, Fed. Rep. Germany (1988)
- [6] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. 20, 367 (1948)
- [7] D. Derbes, AM. j. Phys. 46, 881 (1996)
- [8] Murayama H, 221A Lecture Notes Path Integral, [Internet], University of California, Berkely, Available from: (<http://hitoshi.berkely.edu/221a/pathintegral.pdf>)
- [9] Ashok Das, "Field Theory:A Path Integral Approach", Second edition, World Scientific, Singapore (2006)
- [10] R. Shankar, Principles Quantumn Mechanics, second edition,Plenum Press, New York, USA (1994)
- [11] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. 46, 211 (1981)
- [12] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Ann. Phys. (N.Y.) 149, 374 (1983)
- [13] V. B. Magalinskiĭ, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 36, 1942 (1959) [Sov. Phys. JETP 9, 1381(1959)]
- [14] I. R. Senitzky, Phys. Rev. 119, 670 (1960); 124, 642 (1961)
- [15] G. W. Ford, M. Kac, P. Mazur, J. Math. Phys. 6, 504 (1965)
- [16] P. Ullersma: Physica 32, 27, 56, 74, 90 (1966)
- [17] R. Zwanzig, J. Stat. Phys. 9, 215 (1973)
- [18] (<http://www.physik.uni-augsburg.de>), 20-05-2019

-
- [19] P. Hänggi, Generalized Langevin Equations: A Useful Tool for the Perplexed Modeller of Nonequilibrium Fluctuations?, In Lecture Notes in Physics Vol. 484, ed. by L. Schimansky-Geier, T. Pöschel (Springer 1997) pp. 15–22
- [20] V. Hakim, V. Ambegaokar, Phys. Rev. A 32, 423 (1985)
- [21] H. Grabert, P. Schramm, G.-L. Ingold, Phys. Rev. Lett. 58, 1285 (1987)
- [22] R. P. Feynman, F. L. Vernon, Jr, Ann. Phys. (N.Y.) 24, 118 (1963)
- [23] H. Grabert, P. Schramm, G.-L. Ingold, Phys. Rep. 168, 115 (1988)