الباب الخامس

نظرية الاضطراب الزمنية

Time-Dependent Perturbation Theory

حتى الآن تجنبنا التعامل مع المؤثرات التي تحتوي على الزمن صراحةً. ذلك لسبب بسيط وهو أن محاولة إيجاد حل متكامل لمعادلة شرودنجر الزمنية يعتبر بعيد المنال. [غعتماد الهاملتونيان على الزمن لا نستطيع استخدام فصل المتغيرات للوصول إلى معادلة مميزة لها القيم والدوال الخاصة بها. وقد تعاملنا بكتابنا الأول (الباب الثاني) مع معادلة شرودنجر بالصورة:

$$\hat{H}(r)\left|x,t\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|x,t\right\rangle$$

ومنه وجدنا بعد فصل المتغيرات أن:

$$\left|x,t\right\rangle = \left|x\right\rangle\left|t\right\rangle = \left|x\right\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

وبعد دراستنا للنظريات التقريبية نجد أنه بإضافة حدود صغيرة تعتمد على الزمن بالهملتونيان فإننا نستطيع التعامل معه من خلال نظرية الاضطراب.

نظرية الاضطراب الزمنية من الطرق الملائمة والقوية لدراسة تفاعل المواد مع الطاقة (Interaction of radiation with matter) (مثل الإشعاعات الكهرومغناطيسية) والتي يظهر تأثيرها من خلال الفوتونات والالكترونات. هذه الإشعاعات لها ترددات مختلفة وبالتالي تتغير مع الزمن ولهذا نتعامل معها كاضطرابات زمنية. ونتيجة لهذه الاضطرابات الزمنية تصبح المستويات (الدوال) غير مستقرة. ولهذا تنتقل الإلكترونات من مستوي أعلى إلى مستوي أسفل عن طريق الانبعاث التلقائي (Spontaneous emission) أو عن طريق الانبعاث المحثوث (ألفسري)(Stimulated emission) وهو أساس لنظرية عمل الليزر. وتنتقل الإلكترونات من مستوي أسفل إلى مستوي أعلى عن طريق الامتصاص المحثوث (ألفسري)(Stimulated absorption).

ودراستنا في هذا الباب ترتكز على تأثير الاضطرابات الصغيرة فقط والتي تضاف إلي الهملتونيان الابتدائي الغير معتمد على الزمن. وكما ذكرنا أننا عندما نتعامل مع مؤثر (هملتونيان) يعتمد على

الزمن صراحةً، فإننا لن نحصل على حلول مستقرة (من ناحية الدوال والقيم المميزة)، بالتالي اختياراتنا المعتادة والتي تعتمد على الدوال المميزة (حلول المعادلات المميزة) كأساس لمفكوك أي دالة مجهولة يصبح غير عملي. وللتغلب على هذه العقبة فقد اقترح العالم ديراك أن نستخدم الدوال المميزة كمفكوك للدوال الزمنية المجهولة ولكن مع استخدام معاملات (Coefficients**) تعتمد على الزمن.**

ولتوضيح نظرية الاضطراب الزمنية بمثال من الحياة اليومية نفترض أن الشمس تشرق عند الزمن t_o. عند الزمن $t \le t_o$ أي قبل شروق الشمس، تكون حالة السكون للأشخاص ولنفترض أنها تعرف بالدالة الابتدائية $\left|\varphi_i\right\rangle$. عند الزمن $t > t_o$، أي بعد شروق الشمس، تكون حالة الحركة للأشخاص ولنفترض أنها تعرف بالدالة النهائية $\left|\varphi_f\right\rangle$. بالتالي سوف نتعامل مع دالتين أساسيتين، الدالة الأولي الابتدائية وهى $\left|\varphi_i\right\rangle$ وتنتقل إلي (تترافق مع) الدالة الثانية النهائية $\left|\varphi_f\right\rangle$ نتيجة للمؤثر $\hat{H}'$ وهو هنا شروق الشمس. وهنا يظهر السؤال كالتالي: ماهو احتمالية الانتقال من المستوي الابتدائي $\left|\varphi_i\right\rangle$ إلى المستوى النهائي $\left|\varphi_f\right\rangle$ في وجود المؤثر $\hat{H}'$ ؟ و للإجابة على هذا السؤال، سوف نتبع الشرح التالي.

وللإجابة على السؤال السابق دعونا نبدأ هنا بالهملتونيان الكلي $\hat{H}$ الذي يتكون من مجموع جزئين: الأول هو الهملتونيان الغير مضطرب $\hat{H}_o$ (وهو الجزء الممكن إيجاد حلاً كاملاً له تحليليا) والثاني هو الجزء الصغير جداً والمسؤل عن الاضطراب $\hat{H}'$ والذي يعتمد على الزمن بشكل واضح، بالتالي:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \lambda \hat{H}'(t), \qquad \hat{H}'(t) \ll \hat{H}_o \tag{5.1}$$

وسنفترض وجود حل لمعادلة شرودنجر المميزة:

$$\hat{H}_o \left|\varphi_k\right\rangle = E_k \left|\varphi_k\right\rangle \tag{5.2}$$

والتي تظهر كمعادلة زمنية بالشكل:

$$\hat{H}_o \left|\psi_o\right\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_o\right\rangle \tag{5.3}$$

$$\left|\psi_o\right\rangle = \sum_k C_k^{(0)} e^{-iE_k t/\hbar} \left|\varphi_k\right\rangle \tag{5.4}$$

حيث $C_k^{(0)}$ ثوابت لا تعتمد على الزمن، وأن الكمية $\left|C_k^{(0)}\right|^2$ تعبر عن احتمالية وجود النظام في المستوى المستقر k قبل بدأ الاضطراب. التجميع في المعادلة (5.4) يتم على جميع المستويات المنفصلة (discrete states **) منها والمتصلة (** contiuous states **). وحيث أن الدوال $\left|\varphi_k\right\rangle$ يكونون مجموعة متكاملة، بالتالي فإن الحل العام لمعادلة شرودنجر العامة الزمنية:**

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle \qquad \mathbf{(5.5)}$$

بالإمكان وضعة بالصورة

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle, \qquad \sum_k \left|C_k(t)\right|^2 = 1 \qquad \mathbf{(5.6)}$$

حيث افترضنا أن المعاملات $C_k(t)$ تعتمد على الزمن صراحةً. وإذا علمنا أن الدوال المميزة $\left|\varphi_k\right\rangle$ لهم خواص التعامد والمعايرة وأن الدالة $\left|\psi\right\rangle$ لها خواص المعايرة، فإننا نجد أن الكمية $\left|C_k(t)\right|^2$ تعبر عن احتمالية وجود النظام في الحالة (المستوى) k عند الزمن المحدد t و تدل $C_k(t)$ على السعة الاحتمالية. وبمقارنة المعادلتين (5.4) و(5.6) نلاحظ أنه مع استخدام الشرط $\hat{H}'(t)=0$ فإن المعامل الزمني $C_k(t)$ يؤول إلى الثابت $C_k^{(0)}$. ولهذا نعتبره قيمه ابتدائية (شرط ابتدائي) للمعامل $C_k(t)$.

نلاحظ هنا تحولا جذرياً بالمسألة فبدلاً من إيجاد قيم ودوال مميزة لمعادلة شرودنجر المميزة (5.5) فإننا نبحث عن إيجاد قيم المعاملات $C_k(t)$. ولحل هذه المعضلة نقوم بالتعويض بالمعادلة (5.6) في المعادلة (5.5) مع استخدام (5.1) و(5.2) نجد:

واجب منزلي: باستخدام المعادلة:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle = (\hat{H}_o + \lambda\hat{H}')\sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle \qquad (5.7)$$

اثبت أن:

$$i\hbar\sum_k \dot{C}_k(t)\left|\varphi_k\right\rangle e^{-iE_kt/\hbar} = \sum_k C_k(t)\lambda\hat{H}'(t)\left|\varphi_k\right\rangle e^{-iE_kt/\hbar} \qquad \textbf{(5.8)}$$

حيث استخدمنا $\dot{C}_k(t) = \dfrac{dC_k(t)}{dt}$.

الحل:

الطرف الأيسر من المعادلة (5.7) يعطي:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_k C_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle = i\hbar\sum_k \dot{C}_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle + i\hbar(-\frac{i}{\hbar})\sum_k C_k(t)E_k e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle$$

الطرف الأيمن من المعادلة (5.7) يعطي:

$$\begin{aligned}(\hat{H}_o+\lambda\hat{H}')\sum_k C_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle &= \sum_k C_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}\hat{H}_o\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda\sum_k C_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}\hat{H}'\left|\varphi_k\right\rangle \\ &= \sum_k C_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}E_k\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda\sum_k C_k(t)e^{-iE_kt/\hbar}\hat{H}'\left|\varphi_k\right\rangle\end{aligned}$$

وبمساواة الطرفين نحصل على المعادلة (5.8).

باستخدام الضرب القياسي بواسطة $\left\langle\varphi_m\right|e^{iE_mt/\hbar}$ من اليسار بكلا الطرفين للمعادلة (5.8) وإجراء التكامل للفراغ بأكمله ومراعاة أن $\left\langle\varphi_m|\varphi_k\right\rangle = \delta_{mk}$ نجد أن المعادلة تؤول إلي فئة من المعادلات التفاضلية المترافقة وهى:

$$\dot{C}_k(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_m C_m(t)\lambda\hat{H}'_{mk}(t)\,e^{i\omega_{mk}t} \qquad \textbf{(5.9)}$$

حيث عرفنا عناصر المصفوفة $\hat{H}'_{mk}(t)$ بالشكل:

$$\hat{H}'_{mk}(t) = \left\langle\varphi_m\right|\hat{H}'(t)\left|\varphi_k\right\rangle \qquad \textbf{(5.10)}$$

وعرفنا تردد بور الزاوي ω_{mk} كالتالي:

$$\omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar} \qquad \textbf{(5.11)}$$

المعادلات التفاضلية المترافقة (5.9) مكافئة تماماً لمعادلة شرودنجر الزمنية (5.5) وبدون أي تقريب حتى الآن.

للبدأ في استخدام التقريب، سنفترض أن الاضطراب $\lambda \hat{H}'_{mk}$ يمثل كمية صغيرة وأيضاً مفكوك المعاملات C_k يتم بدلالة **الوسيط** λ **بالمتسلسلة:**

$$C_k = C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)} + \lambda^2 C_k^{(2)} + \cdots \qquad \textbf{(5.12)}$$

باستخدام المفكوك (5.12) في المعادلة (5.9) ومساواة معاملات الوسيط λ **(لنفس الدرجة) بكلا الطرفين، نجد أن:**

مساواة معاملات λ^0 **تعطي:**

$$\dot{C}_k^{(0)} = 0, \qquad \textbf{(5.13a)}$$

ومساواة معاملات λ^1 **تعطي:**

$$\dot{C}_k^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_m \hat{H}'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} C_m^{(0)}, \qquad \textbf{(5.13b)}$$

وعامةً مساواة معاملات λ^s **تعطي:**

$$\dot{C}_k^{(s+1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_m \hat{H}'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} C_m^{(s)} \quad , \quad s = 0,1,2,\cdots \qquad \textbf{(5.13c)}$$

نتوقف هنا لنسأل أنفسنا، ماذا تعني لنا المعادلات (5.13a-c)؟ تعني أن المعادلة الأصلية (5.8) قد انفصلت بطريقة ما إلي مجموعه من المعادلات (5.13a-c) التي يمكن تكاملها لأي درجة. لكن المعادلات (5.13a-c) لا يمكن حلهم حلاً تاماً وذلك لارتباط تفاضل (معدل تغير) كل معامل، مثلاً $\dot{C}_k^{(s+1)}$ **، مع المعاملات الأخرى،** C_m^s **. ولكن، لاضطرابات صغيرة نستطيع لدرجة جيدة من التقريب أن نفترض أن معدل تغير المعاملات صغير جداً بحيث أن المعاملات تعامل على أنها ثوابت.**

بالنظر للمعادلة (5.13a)، $\dot{C}_k^{(0)} = 0$**، نجد أنها تؤكد ببساطة أن المعامل** $C_k^{(0)}$ **ماهو إلا ثابت ولا يعتمد على الزمن. وكما رأينا سابقاً أن** $C_m^{(0)}$ ما هو إلا شرط ابتدائي للمسألة. **وفي شرحنا التالي**

سوف نفترض، فقط للتبسيط، أن النظام في حالته الابتدائية ($t \le t_o$) يعرف تماماً بالدالة المستقرة $|\varphi_m\rangle$ وطاقتها المناظرة E_m . ولهذا:

$$C_k^{(0)} = \begin{cases} \delta_{km} & \text{for discrete states} \\ \delta(k-m) & \text{for continuous states} \end{cases} \qquad \textbf{(5.14)}$$

بالتعويض من (5.14) في المعادلة (5.13b) نجد أن التصحيح الأول يعطي:

$$\dot{C}_k^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \hat{H}'_{km}(t)\, e^{i\omega_{km}t} \qquad \textbf{(5.15)}$$

وبتكاملها نجد:

$$C_k^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \int_{t_o}^{t} \hat{H}'_{km}(t')\, e^{i\omega_{km}t'} dt' \qquad \textbf{(5.16)}$$

حيث ثابت التكامل اختير بحيث أن المعامل $C_m^{(1)}$ يؤول للصفر عند $t = t_o$، أي قبل أن يبدأ الاضطراب. سنكتفي هنا بالمعاملات من الدرجة الأولي حتى يتسنى لنا فهم تطبيقاتها.

للدرجة الأولى سنعرف احتمالية الانتقال (Transition probability) من المستوي الابتدائي $|\varphi_m\rangle$ إلى المستوى النهائي $\langle\varphi_k|$ بالعلاقة:

$$P_{km} = \left|C_k^{(1)}\right|^2 \qquad \textbf{(5.17)}$$

و معدل الانتقال (Transition rate) Γ_{km} (ويعرف بأنه احتمالية الانتقال لوحدة الزمن) بالعلاقة:

$$\Gamma_{km} = \frac{P_{km}}{t} \qquad \textbf{(5.18)}$$

ومن Γ نستطيع تعريف متوسط العمر الزمني للمستوى (Mean life time of the state) بالعلاقة:

$$\tau(\text{Mean life time}) = 1/\Gamma \qquad \textbf{(5.19)}$$

وهو متوسط الزمن اللازم لتحلل المستوي.

مثال: اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور X بحيث أن الاضطراب هو:

$$\hat{H}' = -qxE,$$

ويؤثر في الفترة الزمنية $0 < t < T$ فقط. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n = 0$) في اللحظة $t \le 0$، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوي أخر في اللحظة $t \to T$.

الحل: نلاحظ هنا أن الاضطراب نفسه لا يعتمد على الزمن صراحةً، ولذلك نحصل على العنصر:

$$\hat{H}'_{mk} = \langle \varphi_m | \hat{H}' | \varphi_k \rangle = -qE \langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$$

ونجد أن تكامل من النوعية $\langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$، والذي لا يعتمد على الزمن، سوف نتعامل معه بكثرة بحساباتنا المستقبلية. من هذا التكامل البسيط نستطيع أن نستنتج شروط (مدى سماحية) الانتقال من مستوي لأخر وهذه الشروط تسمى قواعد الاختيار(selection rules **). دعونا نري هذه القواعد من هذا التكامل.**

من تعاملنا بالباب الأول (نظرية المؤثرات) نجد أن التكامل يعطى بالشكل:

$$\langle m | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1}\ \delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\ \delta_{m,n-1} \right]$$

وله قيمة غير صفرية بتحقق الشرط $m = n \pm 1$ فقط. وحيث أن $n = 0$ فإن m تأخذ القيمة 1 فقط، وبالتالي نجد أن:

$$\langle 1 | x | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{0+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

وسعة الانتقال من المستوي الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$C_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1}\int_{t_o}^{t} \hat{H}'_{mk}(t')\, e^{i\omega_{km}t'} dt'$$

$$= (i\hbar)^{-1} qE\, \langle 1 | x \,|\, 0 \rangle \int_0^T e^{i\omega_{10}t'} dt' = \frac{qE}{i\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\frac{e^{i\omega_{10}t'}}{i\omega_{10}}\right]_0^T$$

$$= -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[e^{i\omega_{10}T} - 1\right] = -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, e^{i\omega_{10}T/2}\left[e^{i\omega_{10}T/2} - e^{-i\omega_{10}T/2}\right]$$

$$= -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, e^{i\omega_{10}T/2}\, 2i\, \sin(\frac{\omega_{10}T}{2})$$

واحتمالية الانتقال من المستوي الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$P_{10} = \left|C_1^{(1)}\right|^2 = \frac{2q^2E^2}{m\hbar\omega^3}\sin^2(\frac{\omega_{10}T}{2})$$

يتضح من المعادلة السابقة أن المستوي الابتدائي $\langle 0|$ سيظل كما هو بدون إنتقال إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ طالما المجال الكهربي E صغير وسيظل احتمالية الانتقال P_{10} تتذبذب خلال زمن تأثير الاضطراب. نستطيع أن نؤكد هنا أيضاً أن باستخدامنا مجال كهربي متذبذب (متردد) فإن احتمالية الانتقال P_{10} سوف تزداد إلي أن نصل إلي التردد ألرنيني (Resonance frequency) المطلوب لبدء عملية الانتقال.

مثال: كما بالمثال السابق، اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور X بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -qxE(t), \qquad E(t) = \varepsilon e^{-t/\tau}.$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t \le 0$، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوي أخر في اللحظة $t \to \infty$.

الحل: من المثال السابق وجدنا أن الانتقال المسموح هو:

$$\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\hat{H}'_{mk}(t) = \langle \varphi_m|\hat{H}'(t)|\varphi_k\rangle = -qE(t)\langle \varphi_m|x|\varphi_k\rangle$$

وبالتالي احتمالية الانتقال من المستوي الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هو:

$$P_{10}(t\to\infty) = \left|C_0^{(1)}\right|^2 = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\left|\int_0^\infty e^{(i\omega-\frac{1}{\tau})t}dt\right|^2$$

$$= \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2+1}$$

حيث استخدمنا التكامل القياسي $\left|\int e^{-br+i\omega r}dr\right|^2 = \dfrac{1}{b^2+\omega^2}$**. يتضح من المعادلة السابقة أن** P_{10} **تؤول للصفر عندما** $\tau = 0$ **أي قبل بدأ الاضطراب، و** $P_{10} \propto \dfrac{1}{\omega^3}$ **عندما** $\tau\to\infty$ **.**

مثال:لاضطراب صغير يعطى بالعلاقة:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} H' & 0\le t\le\tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}$$

حيث H' **مؤثر ثابت لا يعتمد علي الزمن. اثبت أن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي** m **إلــى المستوى النهائي** n **يعطى بالعلاقة:**

$$P_{nm} = \frac{2\pi\tau}{\hbar}\left|H'_{nm}\right|^2\delta(E_m - E_n) \qquad (5.20)$$

الحل: بالإمكان إيجاد P_{km} **بالمعادلة (5.17) وذلك لأن** H'_{km} **مؤثر ثابت ولا يعتمد على الزمن، وبالتالي يمكن إخراجه من التكامل. حيث أن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي** m **إلى المستوى النهائي** n **يعطى بالعلاقة**

$$P_{nm} = \left|C_m^{(1)}\right|^2 = \left| -\frac{i}{\hbar}\int_0^{\tau} \langle n|H'|m\rangle e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2$$

$$= \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\left|\int_0^{\tau} e^{i\omega_{nm}t} dt\right|^2 = \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\omega_{nm}\tau}-1}{i\omega_{nm}}\right|^2$$

$$= \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\left|\frac{2e^{i\omega_{nm}\tau/2}}{i\omega_{nm}}\left(\frac{e^{i\omega_{nm}\tau/2}-e^{-i\omega_{nm}\tau/2}}{2}\right)\right|^2$$

$$= \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\frac{\omega_{nm}\tau}{2})}{(\frac{\omega_{nm}}{2})^2} = \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{\hbar^2}F(\omega,\tau)$$

حيث استخدمنا $\omega = \frac{\omega_{nm}}{2} = \frac{E_n - E_m}{2\hbar}$. **وباستخدام الملحق 5.A والخاصية** ($\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$) **نجد أن:**

$$\lim_{\tau\to\infty} F(\omega,\tau) \sim \pi\tau\delta(\frac{\omega_{nm}}{2}) = \pi\tau\delta(\frac{E_m - E_n}{2\hbar}) = 2\pi\tau\hbar\delta(E_m - E_n)$$

ومنها نصل للنتيجة المطلوبة(5.20) .

لنتوقف هنا لنسأل، ماذا نستنتج من المعادلة(5.20)؟ نستنتج التالي:

1- **احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي** m **إلى المستوى النهائي** n **تزداد بزيادة زمن الاضطراب** τ **.**

2- **من خواص الدالة** δ **، فإن المعادلة (5.20) تعني أن الانتقال يحدث بين المستويين** m **و** n **فقط. بالتالي فإنه لا يحدث أي تغيير في الطاقة الكلية للنظام، بمعنى أن الطاقة الكلية محفوظة.**

3- من الخاصية السابقة نستنتج أن الاضطراب الزمني لا يغير من طاقة النظام الكلية، بمعني أنه لا يضيف ولا ينقص من طاقة النظام.

ومعدل الانتقال يعطي بالعلاقة:

$$\Gamma_{nm} = \frac{P_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| H'_{nm} \right|^2 \delta(E_m - E_n)$$

وتسمى هذه العلاقة "قاعدة فيرمي الذهبية"

مثال: لاضطراب صغير توافقي يعطى بالعلاقة:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} 2H_1 \sin(\omega t) & 0 \le t \le \tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}.$$

حيث H_1 مؤثر هيرميتي لا يعتمد على الزمن. أوجد احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m الى المستوى النهائي n.

الحل: قبل أن نبدأ بحل المثال سنقوم بإعادة كتابة الاضطراب بشكل جديد يبسط الحسابات وهو:

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} \frac{H_1}{i}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) & 0 \le t \le \tau \\ 0 & \tau < t < 0 \end{cases}$$

حيث استخدمنا المفكوك $\sin(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$. والآن سعة الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n تحسب كالتالي:

$$C_m^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^{\tau} \langle n|2H_1 \sin(\omega t)|m\rangle e^{i\omega_{nm}t}dt =$$

$$= -\frac{\langle n|H_1|m\rangle}{\hbar}\int_0^{\tau}\left[e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right]e^{i\omega_{nm}t}dt$$

$$= -\frac{\langle n|H_1|m\rangle}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{nm}+\omega)\tau}-1}{\omega_{nm}+\omega} - \frac{e^{i(\omega_{nm}-\omega)\tau}-1}{\omega_{nm}-\omega}\right]$$

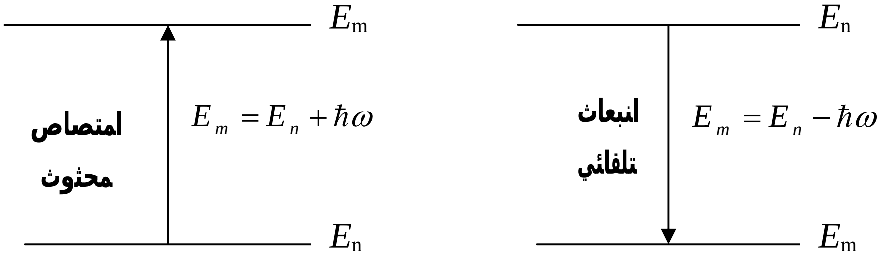
وقد افترضنا سابقاً أن عناصر مصفوفة التفاعل $\langle n|H_1|m\rangle$ صغيرة ومتماثلة، بمعني أن $\langle n|H_1|m\rangle = \langle m|H_1|n\rangle$. وبالتالي نجد هنا أن سعة الانتقال تبلغ قيماً منفردة (singular**) بحالتين اثنتين وهما:**

الحالة الأولى: عند امتصاص طاقة كوانتمية absorption a quana of energy

$$\omega_{nm} - \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad E_m = E_n + \hbar\omega$$

الحالة الثانية: عند انبعاث طاقة كوانتمية emission a quana of energy

$$\omega_{nm} + \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad E_m = E_n - \hbar\omega$$



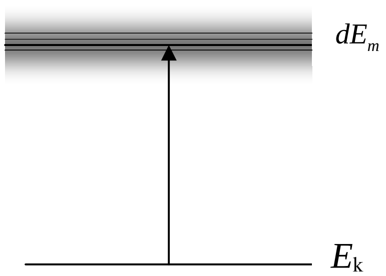
بالتالي في الحالة الأولى، أي عند امتصاص طاقة كوانتمية، نجد أن معدل الانتقال(انظر المثال السابق):

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle m|H_1|n\rangle\right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega)$$

والحالة الثانية، أي عند انبعاث طاقة كوانتمية، نجد أن معدل الانتقال:

$$\Gamma_{n\to m}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle m|H_1|n\rangle\right|^2\delta(E_m-E_n+\hbar\omega)$$

معدل الانتقال للمستويات المتصلة:



غالباً ينصب اهتمامنا في تجميع معدلات الانتقال للمستويات النهائية القريبة جداً من بعضها البعض. لنفترض مثلاً أن عدد المستويات النهائية القريبة من بعضها لوحدة الطاقة وتسمى كثافة المستويات (density of states **) ويعبر عنه بالرمز** $\rho(E_m)$ **. بالتالي فإن**

$$\Gamma=\sum_{\Delta m}\Gamma_{k\to m}=\frac{2\pi}{\hbar}\int\left|\langle m|H_1|k\rangle\right|^2\delta(E_k-E_m)\rho(E_m)dE_m$$
$$=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{\left|\langle m|H_1|k\rangle\right|^2}\rho(E_m)\Big|_{E_m=E_k\pm\hbar\omega}$$

وهي صورة اخري من صور "قاعدة فيرمي الذهبية". مع ملاحظة أن عناصر المصفوفة $\overline{\left|\langle m|H_1|k\rangle\right|^2}$ **تعبر عن القيمة المتوسطة لجميع المستويات النهائية.**

تمارين عامة

1- اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور x بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -xE(t), \qquad E(t) = \varepsilon e^{-t^2/\tau^2}.$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t=-\infty$، اثبت أن احتمال أن يكون المتذبذب بالمستوي $n=1$ في اللحظة $t=\infty$ هو $P_{10} = \frac{\pi\tau^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2\tau^2/2}$.

2- اعتبر المتذبذب التوافقي الخطي للشحنة q قد وقع تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور x بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -qxE(t), \qquad E(t) = \varepsilon \frac{\tau}{t^2+\tau^2}.$$

حيث ε و τ ثوابت. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوي الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t=-\infty$، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوي أخر في اللحظة $t=\infty$. [استخدم التكامل القياسي $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{t^2+\tau^2} dt = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega\tau}$]

3- وضعت ذرة هيدروجين تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور الصادي Z بحيث أن:

$$\hat{H}'(t) = -er\cos\theta E(t), \qquad E(t) = \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\tau}{t^2+\tau^2}$$

حيث ε و τ ثوابت. باعتبار أن ذرة الهيدروجين تتواجد بالمستوي الأرضي ($|1,0,0\rangle$)في اللحظة $t=-\infty$ ، اثبت أن احتمال أن يكون ذرة الهيدروجين بالمستوي $|2,1,0\rangle$ في اللحظة $t=\infty$ هو $P_{21}=\frac{1}{\hbar^2}\frac{a_o^2 e^2 \varepsilon^2 2^{15}}{3^{10}}e^{-2\omega\tau}$. [استخدم $\langle 2,1,0|r\cos\theta|1,0,0\rangle=\frac{a_o 2^7\sqrt{2}}{3^5}$]

ملحق (5.A)

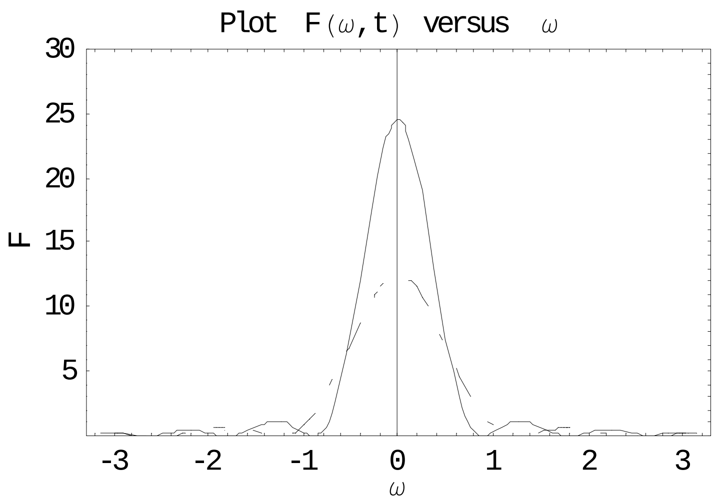
الدالة المترددة $F(\omega,t)$

Oscillating Function $F(\omega,t)$

تعرف الدالة $F(\omega,t)$ بالمعادلة:

$$F(\omega,t)=\frac{\left|e^{i\omega t}-1\right|^2}{|\omega|^2}=\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2}=\frac{\sin^2(\frac{\omega t}{2})}{(\frac{\omega t}{2})^2}$$

والرسم التالي يوضح شكل الدالة (عند قيمة ثابتة للزمن) ومنه يتعين لها الخواص التالية:



الدالة $F(\omega,t)$ لقيم مختلفة للزمن، $F(\omega,7)$ للخط المستمر و $F(\omega,5)$ للخط المتقطع.

1- من الرسم نجد أن الدالة (عند قيمة ثابتة للزمن) يوجد لها قمة حادة حول القيمة $\omega=0$.

2- ارتفاع القمة يتناسب مع t^2. وتحسب رياضياً كالتالي (باستخدام نظرية ليبنتز للنهايات):

$$\lim_{\omega\to 0} F(\omega,t) = \lim_{\omega\to 0}\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2} = \lim_{\omega\to 0}\frac{t\sin(\omega t)}{2\omega} = \lim_{\omega\to 0}\frac{t^2\cos(\omega t)}{2} = \frac{t^2}{2}$$

3- عرض الدالة (اتساعها) يتناسب تقريبياً مع $\frac{2\pi}{t}$. هذا ناتج من استخدامنا للشرط:

$$F(\omega,t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\omega t}{2} = n\pi$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{2\pi n}{t}, \quad n = 1, 2, \cdots$$

4- مساحة المنحني (area under the curve) تتناسب مع:

$$\text{Area} \propto t^2 \times \frac{2\pi}{t} \propto t$$

وبالتالي فإن المساحة تزداد مع الزمن وتكون أكبر مساحة مركزة حول القيمة $\omega = 0$. وعندما يزداد الزمن إلى قيمة لا نهائية, نجد أن الدالة تصبح دالة دلتا $\delta(\omega)$.

5- باستخدام التعويض $x = \frac{\omega t}{2}$ نجد أن:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega,t)d\omega = t\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx = \pi t$$

حيث استخدمنا التكامل القياسي $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx = \pi$.

6- من القمة الحادة حول القيمة $\omega = 0$ نجد أن هناك تشابهاً مع الدالة دلتا $\delta(\omega)$، ومنه نجد:

$$\lim_{t\to\infty} F(\omega,t) \sim \pi t\,\delta(\omega)$$