الباب السادس عشر

نظرية الاضطراب الزمنية

(Time-Dependent Perturbation Theory)

الباب السادس عشر

نظرية الاضطراب الزمنية

حتى الآن تجنبنا التعامل مع المؤثرات التي تحتوي على الزمن صراحةً. ذلك لسبب بسيط وهو أن محاولة إيجاد حل متكامل لمعادلة شرودنجر الزمنية يعد بعيد المنال.

إن اعتماد الهملتونيان على الزمن يجعلنا لا نستطيع استخدام فصل المتغيرات للوصول إلى معادلة مميزة لها القيم والدوال الخاصة بها. وقد تعاملنا سابقاً مع معادلة شرودنجر بالصورة:

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

ومنها 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) التي يظهر تأثيرها من خلال الفوتونات والإلكترونات. هذه الإشعاعات لها ترددات مختلفة، ومن ثم تتغير مع الزمن ولهذا نتعامل معها كاضطرابات زمنية. ونتيجة لهذه الاضطرابات الزمنية تصبح المستويات (الدوال) غير مستقرة؛ ولهذا تنتقل الإلكترونات من مستوى أعلى إلى مستوى أدنى عن طريق الانبعاث التلقائي (Spontaneous emission) **أو عن طريق** الانبعاث المحثوث (Stimulated emission) **وهو أساس لنظرية عمل الليزر**. وتنتقل الإلكترونات من مستوى أدنى إلى مستوى أعلى عن طريق الامتصاص المحثوث (القسري) (Stimulated absorption)**.**

ودراستنا في هذا الباب ترتكز على تأثير الاضطرابات الصغيرة فقط، التي تضاف إلى الهملتونيان الابتدائي غير المعتمد 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)، ومن ثم فإنّ اختياراتنا المعتادة، التي تعتمد على الدوال المميزة (حلول المعادلات المميزة) كأساس لمفكوك أي دالة مجهولة تصبح غير عملية. وللتغلب على

هذه العقبة فقد اقترح العالم ديراك استخدام الدوال المميزة كمفكوك للدوال الزمنية المجهولة، ولكن مع استخدام معاملات 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 $\langle \varphi_i|$. **عند الزمن** $t > t_o$، **أي بعد** شروق الشمس، تكون حالة الحركة للأشخاص، ولنفترض أنها تعرف بالدالة النهائية $|\varphi_f\rangle$. من ثم سوف نتعامل مع دالتين أساسيتين، الدالة الأولي الابتدائية وهى $\langle \varphi_i|$ **وتنتقل إلى (تترافق مع)** الدالة الثانية النهائية $|\varphi_f\rangle$ نتيجة للمؤثر $\hat{H}'$، وهو هنا شروق الشمس. وهنا يظهر السؤال كالتالي: ماهو احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle \varphi_i|$ إلى المستوى النهائي $|\varphi_f\rangle$ **في وجود المؤثر** $\hat{H}'$ ؟ وللإجابة عن هذا السؤال، سوف نتبع الشرح التالي.

١- معدل الانتقال للمستويات المنفصلة

للإجابة عن السؤال السابق دعونا نبدأ هنا بالهملتونيان الكلي $\hat{H}$ ، الذي يتكون من مجموع جزئين: الأول: هو الهملتونيان غير المضطرب $\hat{H}_o$ (وهو الجزء الذي يمكننا إيجاد حل كامل له تحليلياً) والثاني: $\hat{H}'$ سوف نعده جزءاً صغيراً جداً بالنسبة إلى $\hat{H}_o$ ، وهو المسؤول عن الاضطراب، ويعتمد على الزمن بشكل واضح، كالتالي:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \lambda \hat{H}'(t), \qquad \hat{H}'(t) \ll \hat{H}_o \tag{1}$$

وبافتراض وجود حل لمعادلة شرودنجر المميزة:

$$\hat{H}_o |\varphi_k\rangle = E_k |\varphi_k\rangle \tag{2}$$

والتي تظهر كمعادلة زمنية بالشكل:

$$\hat{H}_o |\psi_o\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_o\rangle \tag{3}$$

حيث

$$|\psi_o\rangle = \sum_k C_k^{(0)} e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle \tag{4}$$

حيث $C_k^{(0)}$ ثوابت لا تعتمد على الزمن. الكمية و $\left|C_k^{(0)}\right|^2$ تعبر هنا عن احتمالية وجود النظام في المستوى المستقر k قبل بدء الاضطراب. مع ملاحظة أن التجميع فى المعادلة (٤) يتم على جميع المستويات المنفصلة (discrete states) منها والمتصلة (contiuous states). وحيث إن الدوال $\langle \varphi_k|$ تكون مجموعة متكاملة، من ثم فإن الحل العام لمعادلة شرودنجر العامة الزمنية:

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle \tag{5}$$

يمكننا وضعه بالصورة:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle, \qquad \sum_k \left|C_k(t)\right|^2 = 1 \tag{6}$$

حيث افترض ديراك أن المعاملات $C_k(t)$ تعتمد صراحةً على الزمن. وإذا علمنا أن الدوال المميزة $\langle \varphi_k|$ لها خواص التعامد والمعايرة وأن الدالة $\langle \psi|$ 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 (٤) و(٦) نلاحظ أنه مع استخدام الشرط $\hat{H}'(t) = 0$ فإن المعامل الزمني $C_k(t)$ يؤول إلى الثابت $C_k^{(0)}$. ولهذا تعده قيمة ابتدائية (شرط ابتدائي) للمعامل $C_k(t)$.

نلاحظ هنا تحولا جذرياً بالمسألة، فبدلاً من إيجاد قيم ودوال مميزة لمعادلة شرودنجر المميزة (٥)، فإننا من الآن فصاعدا سوف نبحث عن إيجاد قيم المعاملات $C_k(t)$. ولحل هذه المعضلة نقوم بالتعويض بالمعادلة (٦) في المعادلة (٥) مع استخدام المعادلتين (١) و(٢) لنجد:

$$i\hbar\sum_k \dot{C}_k(t)\left|\varphi_k\right\rangle e^{-iE_k t/\hbar} = \sum_k C_k(t)\lambda\hat{H}'(t)\left|\varphi_k\right\rangle e^{-iE_k t/\hbar} \tag{7}$$

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

مثال: اشتق العادلة (٨) باستخدام المعادلة:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle = (\hat{H}_o + \lambda\hat{H}')\sum_k C_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}\left|\varphi_k\right\rangle \tag{8}$$

الحل:

الطرف الأيسر من المعادلة (٨) 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 (٨) 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 (٧).

باستخدام الضرب القياسي بواسطة $\left\langle\varphi_m\right|e^{iE_mt/\hbar}$ من اليسار بكلا الطرفين للمعادلة (٧) وإجراء التكامل على الفراغ بأكمله ومراعاة أن $\left\langle\varphi_m\middle|\varphi_k\right\rangle=\delta_{mk}$ نجد أن المعادلة (٧) تؤول إلى فئة من المعادلات التفاضلية المترافقة وهي:

$$\dot{C}_m(t)=\frac{1}{i\hbar}\sum_k C_k(t)\lambda\hat{H}'_{mk}(t)\,e^{i\omega_{mk}t} \qquad \textbf{(9)}$$

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

$$\hat{H}'_{mk}(t)=\left\langle\varphi_m\right|\hat{H}'(t)\left|\varphi_k\right\rangle \qquad (10)$$

وعرفنا تردد بور الزاوي ω_{mk} كالتالي:

$$\omega_{mk}=\frac{E_m-E_k}{\hbar} \qquad \textbf{(11)}$$

المعادلات التفاضلية المترافقة (٩)، للمعاملات $C_k(t)'s$، مكافئة تماماً لمعادلة شرودنجر الزمنية (٥) وبدون أي تقريب حتى الآن. ويمكننا وضع المعادلة (٩) بشكل المصفوفة التالي:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{C}_1\\ \dot{C}_2\\ \dot{C}_3\\ \cdot\\ \cdot\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{H}'_{11} & \hat{H}'_{12}e^{i\omega_{12}t} & \cdot & \cdot & \cdot\\ \hat{H}'_{21}e^{i\omega_{21}t} & \hat{H}'_{22} & \cdot & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & \hat{H}'_{33} & \cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot & & & \\ & & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\\ C_3\\ \cdot\\ \cdot\end{pmatrix}$$

بحل هذه المعادلات المترافقة نحصل على المعاملات $C_k(t)'s$ ومنه نحسب احتمالية وجود النظام في حالة معينة في زمن معين.

مثال: ادرس حالة نظام ذي مستويين.

الحل: للحالة الخاصة لنظام ذي مستويين، أحدهما: أرضي، والآخر: مثار يؤثر عليه مجال متردد خارجي، سوف نجد أن مصفوفة المعادلات لها حل كامل. بالتأكيد،

إن النظام الفيزيائي الحقيقي، كما هو معلوم، يتكون من أكثر من مستويين، ولكن يوجد أيضاً أنظمة عديدة يكون فيها من هذه المستويات مستويان مهمان أساسيان. أشهر مثال على ذلك هو أمونيا الميزر.

لنظام ذي مستويين ١ و٢، يمكن وضع الدالة العامة له بالصورة:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = c_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}\left|1\right\rangle + c_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}\left|2\right\rangle$$

والمعادلة التفاضلية للمعاملات $c_n(t)$'s هي:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1\\ \dot{c}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & Ve^{i\omega t}e^{i\omega_{12}t}\\ Ve^{-i\omega t}e^{-i\omega_{12}t} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}.$$

للتبسيط تم وضع $\hat{H}'_{11}=\hat{H}'_{22}=0$ ، $\hat{H}'_{12}=\hat{H}'_{21}=Ve^{i\alpha t}$ وكتابة $\omega+\omega_{12}=\alpha$. ومن المصفوفة السابقة نحصل على المعادلتين المترافقتين:

$$i\hbar\dot{c}_1 = Ve^{i\alpha t}c_2$$
$$i\hbar\dot{c}_2 = Ve^{-i\alpha t}c_1.$$

المعادلتان السابقتان من الدرجة الأولى يمكن تحويلهما إلى معادلة تفاضلية واحدة من الدرجة الثانية، وذلك بتفاضل المعادلة الثانية، والتعويض بالمتغير $\dot{c}_1$ من المعادلة الأولى و c_1 من المعادلة الثانية للحصول على:

$$\ddot{c}_2 = -i\alpha\dot{c}_2 - \frac{V^2}{\hbar^2}c_2.$$

هذه المعادلة التفاضلية المعروفة يمكن حلها باستخدام الحل التجريبي $c_2(t) = c_2(0)e^{i\Omega t}$. هذا الحل التجريبي يكون متحققاً في حالة إن $\Omega = -\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \frac{V^2}{\hbar^2}}$. وباستخدام قيمة Ω، فإن الحل العام يكون:

$$c_2(t) = e^{-i\frac{(\omega-\omega_{21})}{2}t}\left(Ae^{i\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\,t} + Be^{-i\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\,t}\right)$$

باستخدام الشروط الابتدائية $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$ نجد أن $A = -B$. باستخدام الفرض عند بداية الزمن $t = 0$:

$$\dot{c}_2(0) = \frac{V}{i\hbar}c_1(0) = \frac{V}{i\hbar}.$$

لذلك نجد أن احتمالية تواجد الجسيم بالمستوى المثار يتحقق بالمعادلة:

$$\left|c_2(t)\right|^2 = \frac{\frac{V^2}{\hbar^2}}{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\sin^2\left(\sqrt{\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}\;t\right).$$

من السهل إثبات أن

$$\left|c_1(t)\right|^2 = 1 - \left|c_2(t)\right|^2$$

هذه المعادلات تسمى صيغ رابي ***Rabi's formula***.

لاحظ هنا أنه في الحالة الخاصة $\omega = \omega_{12}$ نجد أن:

$$\left|c_2(t)\right|^2 = \sin^2\left(\frac{Vt}{\hbar}\right);$$

$$\left|c_1(t)\right|^2 = \cos^2\left(\frac{Vt}{\hbar}\right)$$

إذا اعتبرنا $E_2 > E_1$ وأن النظام بدايةً يتواجد في المستوى الأرضي $\langle 1|$، هذا يعني أنه بعد زمن مقداره $h/4V$ فإن النظام بالتأكيد سوف يتواجد بالمستوى المثار $\langle 2|$، ويتذبذب ذهاباً وإياباً بين المستويين بزمن دوري مقداره $h/2V$.

ماهو المعنى الفيزيائي لهذه المعادلة؟ المعنى هو أن المجال الخارجي المتذبذب يستطيع أن يحث (يدفع) جميع (معظم) الجزيئات التي هي في المستوى الأرضي إلى جزيئات بالمستوى المثار الأول وذلك باختيار زمن دوري دقيق للمجال. وكتطبيق لذلك فإن أمونيا الميزر تعمل بواسطة إرسال فيض من جزيئات الأمونيا، بسرعة معلومة بالمستوى الأرضي خلال أنبوب واقع في مجال خارجي متذبذب له زمن دوري محدد، ويخرج الأمونيا من نهاية الأنبوب وقد تمت إثارته إلى المستوى الأول. وباستخدام كمية صغيرة من الأشعة الكهرومغناطيسية لها نفس تردد الأمونيا الخارجة، فإنّ جزءاً كبيراً من الأمونيا المثارة سوف ينتقل إلى المستوى الأرضي، وينتج عنه أشعة طاقتها مرتفعة وتكون ترابطاً طورياً (coherent).

للبدأ في استخدام التقريب لحل المعادلة (٩)، سنفترض أن الاضطراب $\lambda\hat{H}'_{mk}$ يمثل كمية صغيرة وأيضاً مفكوك المعاملات C_k يتم بدلالة الوسيط λ بالمتسلسلة:

$$C_k = C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)} + \lambda^2 C_k^{(2)} + \cdots \qquad \textbf{(12)}$$

باستخدام المفكوك (١٢) في المعادلة (٩) ومساواة معاملات الوسيط λ (لنفس الدرجة) بكلا الطرفين، نجد أن:

مساواة معاملات λ^0 تعطي:

$$\dot{C}_m^{(0)} = 0, \qquad \textbf{(13a)}$$

ومساواة معاملات λ^1 تعطي:

$$\dot{C}_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_k \hat{H}'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} C_k^{(0)}, \qquad \textbf{(13b)}$$

وعامةً مساواة معاملات λ^s تعطي:

$$\dot{C}_m^{(s+1)} = (i\hbar)^{-1} \sum_k \hat{H}'_{mk}(t)\, e^{i\omega_{mk}t} C_k^{(s)} \quad , \quad s = 0,1,2,\cdots \qquad \textbf{(13c)}$$

نتوقف هنا لنسأل أنفسنا، ماذا تعني لنا المعادلات (**a-c**١٣)؟ الجواب ببساطة فهي: تعني أن المعادلة الأصلية (٧) قد انفصلت بطريقة ما إلى مجموعة من المعادلات ((**a-c**١٣ التي يمكن تكاملها لأي درجة. لكن المعادلات (**a-c**١٣) لا يمكن حلها حلاً تاماً، وذلك لارتباط معدل تغير كل معامل، مثلاً $\dot{C}_m^{(s+1)}$، مع المعاملات الأخرى، C_k^s. ولكن، لاضطرابات صغيرة نستطيع لدرجة جيدة من التقريب أن نفترض أن معدل تغير المعاملات صغير جداً، بحيث إن المعاملات تعامل على أنها ثوابت.

بالنظر للمعادلة (**13a**)، الشرط $\dot{C}_m^{(0)} = 0$ يؤكد ببساطة أن $\dot{C}_m^{(0)}$ هو معامل ثابت لا يعتمد على الزمن. وكما رأينا سابقاً أن $\dot{C}_m^{(0)}$ 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 $\langle \varphi_k|$ وطاقتها المناظرة E_k. ولهذا:

$$C_k^{(0)} = \begin{cases} \delta_{km} & \text{for discrete states} \\ \delta(k-m) & \text{for continuous states} \end{cases} \qquad \textbf{(14)}$$

بالتعويض من (١٤) في المعادلة (**13b**) نجد أن التصحيح الأول يعطي:

$$\dot{C}_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \hat{H}'_{km}(t)\, e^{i\omega_{km}t} \qquad \textbf{(15)}$$

وبتكاملها نجد:

$$C_m^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \int_{t_o}^{t} \hat{H}'_{km}(t')\, e^{i\omega_{km}t'} dt' \qquad \textbf{(16)}$$

حيث ثابت التكامل اختير بحيث إن 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 المستوى الابتدائي $\langle \varphi_k|$ إلى المستوى النهائي $|\varphi_m\rangle$ بالعلاقة:

$$P_{km} = \left|C_m^{(1)}\right|^2 \qquad \textbf{(17)}$$

ومعدل الانتقال(Transition rate) $\Gamma_{k\,m}$ (ويعرف بأنه احتمالية الانتقال لوحدة الزمن) بالعلاقة:

$$\Gamma_{k\,m} = \frac{P_{k\,m}}{t} \qquad (١٨)$$

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

$$\tau(\text{Mean life time}) = 1/\Gamma \qquad (١٩)$$

وهو متوسط الزمن اللازم لانحلال المستوى.

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

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

ويؤثر في الفترة الزمنية $0 < t < T$ فقط. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي ($n = 0$) في اللحظة $t \le 0$، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوى آخر 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 تكاملاً من النوعية $\langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$، الذي لا يعتمد على الزمن، سوف نتعامل معه بكثرة بحساباتنا المستقبلية. ومن خواص هذا التكامل البسيط نستطيع أن نستنتج شروط (مدى سماحية) الانتقال من مستوى إلى مستوى آخر. هذه الشروط تسمى قواعد الاختيار(selection rules)، فدعونا نشق هذه القواعد.

من تعاملنا سابقا مع نظرية المؤثرات وجدنا أن التكامل $\langle \varphi_m | x | \varphi_k \rangle$ 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 إن $n = 0$ فإن m تأخذ القيمة ١ فقط، حيث إن القيم السالبة غير مسموح بها في هذا النظام الفيزيائي. من ثم نجد أن:

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

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

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

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

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

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

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

$$P_{01} = \left|C_1^{(1)}\right|^2 = \frac{2q^2E^2}{m\hbar\omega^3}\sin^2\!\left(\frac{\omega_{10}T}{2}\right)$$

يتضح من المعادلة السابقة أن المستوى الابتدائي $\langle 0|$ سيظل كما هو بدون انتقال إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ طالما المجال الكهربي E صغيراً وسيظل احتمالية الانتقال P_{01} تتذبذب خلال زمن تأثير الاضطراب. نستطيع أن نؤكد هنا أيضاً أنه لو استخدمنا مجالاً كهربياً متذبذباً (متردداً) فإن احتمالية الانتقال P_{01} سوف تزداد إلى أن تصل إلى التردد الرنيني المطلوب لبدء عملية الانتقال (Resonance frequency).

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

$$\hat{H}'(t) = -qxE(t), \qquad E(t) = \varepsilon e^{-\gamma t}, \qquad \gamma = \frac{1}{\tau}$$

حيث ε و τ قيم ثابتة. افترض بدايةً أن المتذبذب يتواجد بالمستوى الأرضي ($n=0$) في اللحظة $t \le 0$ ، فما هو احتمال أن يكون المتذبذب بأي مستوى آخر في اللحظة $t \to \infty$.

الحل: من المثال السابق وجدنا أن الانتقال المسموح به يأتي من:

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

$$\hat{H}'_{10}(t) = \langle 1|\hat{H}'(t)|0\rangle = -qE(t)\langle 1|x|0\rangle$$

ومن ثم فإنّ احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي $\langle 0|$ إلى المستوى النهائي $|1\rangle$ هي:

$$P_{10}(t) = \left|C_0^{(1)}\right|^2 = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\left|\int_0^\infty e^{(i\omega-\gamma)t'}dt'\right|^2$$

$$= \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\left(\left[\frac{e^{i(\omega-\gamma)t'}}{i(\omega-\gamma)}\right]_0^t\right)^2 = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2+1}\left(e^{i(\omega-\gamma)t}-1\right)^2$$

ومنها نجد أن:

$$P_{10}(t\to\infty) = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\frac{\tau^2}{(\tau\omega)^2+1}$$

حيث استخدمنا التكامل القياسي $\left|\int e^{-br+i\omega r}dr\right|^2 = \frac{1}{b^2+\omega^2}$. يتضح من المعادلة السابقة أن P_{10} تؤول للصفر عندما $\tau = 0$ أي قبل بدء الاضطراب، و $P_{10} \propto \frac{1}{\omega^3}$ 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. أثبت أن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n يعطى بالعلاقة:

$$P_{mn} = \frac{2\pi\tau}{\hbar}\left|H'_{nm}\right|^2 \delta(E_m - E_n) \qquad (20)$$

الحل: بالإمكان إيجاد P_{km} بالمعادلة (١٧) وذلك لأن H'_{km} مؤثر ثابت ولا يعتمد على الزمن، ومن ثم يمكن إخراجه من التكامل. حيث إن احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m إلى المستوى النهائي n يعطى بالعلاقة

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

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

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

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

حيث استخدمنا $\omega=\frac{\omega_{nm}}{2}=\frac{E_n-E_m}{2\hbar}$. وباستخدام الملحق **16.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 المعرفة بالمعادلة (20).

لنتوقف هنا لنسأل: ماذا نستنتج من المعادلة (20)؟ نستنتج التالي:

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

٢- من خواص الدالة δ، فإن المعادلة (20) تعني أن الانتقال يحدث بين المستويين m و n فقط. من ثم فإنه لا يحدث أي تغيير في الطاقة الكلية للنظام، بمعنى أن الطاقة الكلية تظل محفوظة.

٣- من الخاصية السابقة نستنتج أن الاضطراب الزمني لا يغير من طاقة النظام الكلية، بمعنى 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: أوجد احتمالية الانتقال من المستوى الابتدائي m الى المستوى النهائي n الناتج من اضطراب صغير توافقي يعطى بالعلاقة:

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

حيث H_1 مؤثر هيرميتي لا يعتمد على الزمن.

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

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

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

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

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

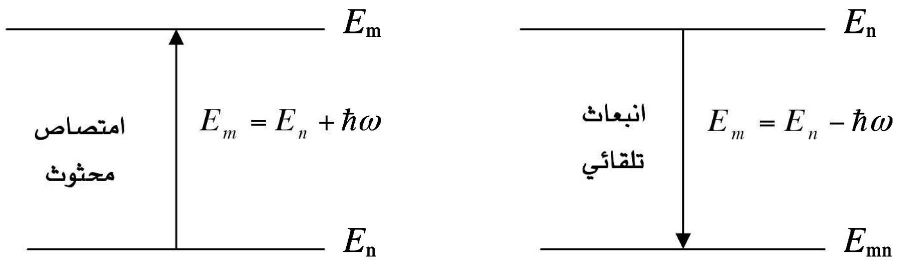
وقد افترضنا سابقاً أن عناصر مصفوفة التفاعل $\langle n|H_1|m\rangle$ صغيرة ومتماثلة، بمعنى أن $\langle m|H_1|n\rangle = \langle n|H_1|m\rangle$. ومن ثم نجد هنا أن سعة الانتقال تبلغ قيماً منفردة (singular) بحالتين اثنتين وهما:

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

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



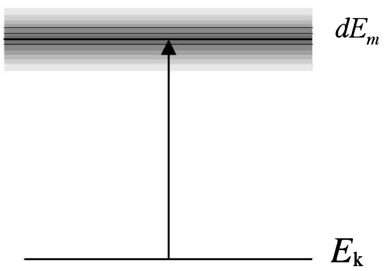
من ثم في الحالة الأولى، أي عند امتصاص طاقة كوانتمية، نجد أن معدل الانتقال (انظر المثال السابق):

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

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

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

٢- 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 $\rho(E_m)$. من ثم 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 أخرى 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.

٣- تمارين عامة

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

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

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

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

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

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

٣- وضعت ذرة هيدروجين تحت تأثير اضطراب خارجي صغير لمجال كهربي E باتجاه المحور Z بحيث إن:

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

حيث ε و τ ثوابت. باعتبار أن ذرة الهيدروجين تتواجد بالمستوى الأرضي ($|1,0,0\rangle$) في اللحظة $t=-\infty$ ، أثبت أن احتمال أن يكون ذرة الهيدروجين بالمستوى $|2,1,0\rangle$ 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 $\langle 2,1,0|r\cos\theta|1,0,0\rangle = \frac{a_o 2^7\sqrt{2}}{3^5}$]

٤- جسيم كتلته m يتواجد بجهد أحادي البعد بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x < a \\ \infty & \text{everywhere else} \end{cases}$$

عند بداية الزمن $t = 0$ كان الجسيم بالحالة $\varphi_3(x)$ وتم وضع جهد اضطراب بالشكل:

$$H'(x) = \begin{cases} W_o & \frac{a}{4} \le x < \frac{3a}{4} \\ 0 & \text{everywhere else} \end{cases}$$

احسب احتمالية وجود الجسيم بالحالة $\varphi_1(x)$ عند الزمن T.

الحل: احتمالية وجود الجسيم بالحالة $\varphi_1(x)$ عند الزمن T تحسب من العلاقة:

$$P_{31} = \left|C^{(1)}\right|^2 = \frac{\left|\langle\varphi_1|H'|\varphi_3\rangle\right|^2}{(\hbar\omega_{13})^2} 4\sin^2\left(\frac{\omega_{13}T}{2}\right), \qquad \omega_{13} = -\frac{8\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$= \frac{m^2a^4W^2}{4\pi^6\hbar^4} 4\sin^2\left(\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}T\right)$$

٥- جسيم كتلته m يتواجد بالمستوى الأرضي لجهد أحادي البعد بالصورة:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x < a \\ \infty & \text{everywhere else} \end{cases}$$

إذا تم التأثير على الجسيم باضطراب يعتمد على الزمن بالصورة:

$$H'(x) = C\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\delta(t) \qquad t > 0$$

احسب احتمالية وجود الجسيم بالمستوى الأول.

الحل: نعلم أن المستوى الأرضي والمستوى الأول لجسيم متواجد بجهد أحادي البعد هما:

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}x), \qquad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x), \qquad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

من ثم:

$$\hat{H}'_{mk}(t') = \langle\psi_2|H'(x)|\psi_1\rangle$$

$$= \frac{2}{a}C\underbrace{\int_0^a \sin(\frac{2\pi x}{a})\cos(\frac{\pi x}{a})\delta(t')\sin(\frac{\pi x}{a})dx}_{\frac{a}{4}\delta(t')} = \frac{C}{2}\delta(t')$$

وبالنسبة إلى الشروط الأولية لتواجد الجسيم نعرف أن:

$$C_b^{(1)}(-\infty) = 0, \qquad C_a^{(1)}(-\infty) = 1$$

لذلك:

$$C_b^{(1)} = (i\hbar)^{-1}\int_0^\infty \frac{C}{2}\delta(t')e^{i\omega_{21}t'}dt' = -\frac{i}{\hbar}\frac{C}{2}e^{i\omega_{21}\times 0} = -\frac{i}{\hbar}\frac{C}{2}$$

ومنها نحصل على احتمالية وجود الجسيم بالمستوى الأول وهي:

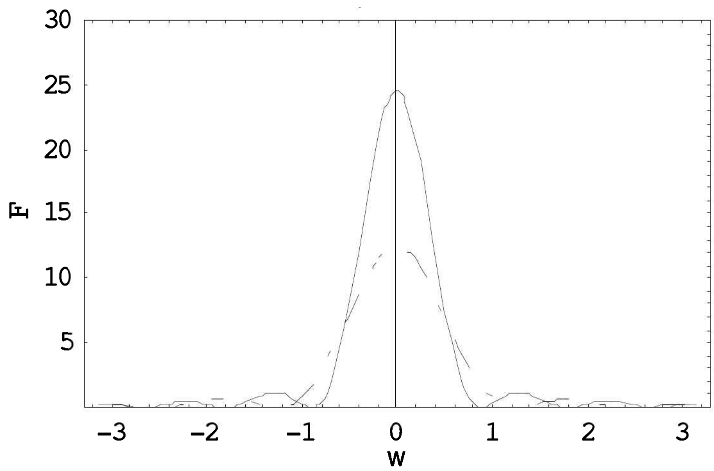
$$P = \left|C_b^{(1)}\right|^2 = \frac{C^2}{4\hbar^2}$$

ملحق (16.A)
الدالة المترددة $F(\omega,t)$

تعرف الدالة $F(\omega,t)$ بالمعادلة:

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

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.

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

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

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

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

$$F(\omega,t)=0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\omega t}{2}=n\pi$$
$$\Rightarrow \omega=\frac{2\pi n}{t}, \quad n=1,2,\cdots$$

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

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

ومن ثم 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 $\delta(\omega)$.

٥- 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 $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx=\pi$.

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

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