الباب السابع عشر

تفاعل الإشعاع مع المادة

(Interaction of radiation with matter)

الباب السابع عشر
تفاعل الإشعاع مع المادة

تعاملنا سابقاً مع جسيمات مجهرية، إلكترونات مثلاً، تتحرك في الفراغ أو تتحرك تحت تأثير جهد خارجي ثابت، كولومب أو كهربي أو مغناطيسي. في هذا الباب سوف ندرس تأثير، أو تفاعل، مجال كهرومغناطيسي على الجسيمات، أو المادة.

لدراسة هذا التأثير يوجد عندنا طريقتان للدراسة؛ الأولى: أن نتعامل مع المجال الكهرومغناطيسي بطريقة شبه تقليدية، وذلك باستخدام قوانين ماكسويل، ومنها نحسب معدل الانبعاث والامتصاص. الطريقة الثانية: أصح وأقوى من الأولى، وهي أن نتعامل مع المجال الكهرومغناطيسي ككمات ومنه نحسب معدل الانبعاث والامتصاص. في كلتا الطريقتين يكون الجسم مكمماً. لكننا سوف نستخدم هنا الطريقة الأولى لأنها بسيطة، وتسمى "الطريقة شبه التقليدية".

في حالة تفاعل إلكترون الذرة مع الإشعاع الكهرومغناطيسي التقليدي (غير المكمم) نجد أن الهملتونيان هو:

$$\hat{H} = \hat{H}_m + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau + \hat{V}_{\text{int}} \qquad (1)$$

حيث: H_m هو الهملتونيان للجسيم، $\frac{1}{8\pi}\int\left(E^2+B^2\right)d\tau$ هو الهملتونيان للمجال الإشعاعي، V_{int} يمثل التفاعل بين الإشعاع والمادة.

على سبيل المثال فإن الهملتونيان لإلكترون تقليدي في مجال إشعاعي هو:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} + \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau + V(r) \qquad (2)$$

حيث إن الوصفة التقليدية للحصول على الهملتونيان لجسيم شحنته q في مجال كهرومغناطيسي خارجي يتأتى بوضع $\hat{p} - \frac{q}{c}\hat{A}$ بدلاً من $\hat{p}$، حيث $\hat{A}(\vec{r})$ هو الجهد المتجه و $V(r)$ هو طاقة الوضع للإلكترون.

المعادلة (2) يمكن كتابتها بالشكل:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau - \frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\cdot\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \quad (3)$$

والتي تكتب كالتالي:

$$\left.\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}, \\ \hat{H}_o &= \hat{H}_m + \frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau, \\ \hat{H}_m &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\boldsymbol{r}); \\ V_{\text{int}} &= -\frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\cdot\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \end{aligned}\right\} \quad (4)$$

هنا سوف نتعامل مع V_{int} على أنه اضطراب يعتمد على الزمن لندرس بواسطته الانتقال بين المستويات المميزة للمؤثر $\hat{H}_o$.

١- الطريقة شبه التقليدية

نبدأ بتبسيط الاضطراب كالتالي:

$$\begin{aligned} V_{\text{int}} &= -\frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\cdot\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \\ &\approx -\frac{e}{mc}\hat{p}\cdot\hat{A} = -\frac{e}{mc}\hat{A}\cdot\hat{p} \end{aligned} \quad (5)$$

حيث تم إهمال الحد $\frac{e^2}{2mc^2}A^2$ نظراً لصغره، واستخدمنا المتطابقة:

$$\begin{aligned} \hat{p}.\left(\hat{A}\psi\right) &= \left(\hat{p}.\hat{A}\right)\psi + A_i P_i \psi \\ &= -i\hbar\underbrace{\left(\nabla\cdot\hat{A}\right)}_{=0}\psi + \hat{A}\cdot\left(\hat{p}\psi\right) \\ &= \hat{A}\cdot\left(\hat{p}\psi\right) \end{aligned} \quad (6)$$

وذلك باستخدام مقياس كولومب وهو $\nabla\cdot\vec{A}=0$.

دعونا نفترض أن المستويان الابتدائي والنهائي لذرة يعرفان بالشكل $\langle i|$ و $\langle f|$، بالترتيب. لذلك نستطيع أن نكتب عناصر مصفوفة الانتقال بأي من الشكلين التاليين:

$$\langle f|V_{\text{int}}|i\rangle=-\frac{e}{mc}\langle f|\hat{p}\cdot\hat{A}|i\rangle \qquad \text{for absorption} \qquad (7.a)$$

$$=-\frac{e}{mc}\langle f|\hat{A}\cdot\hat{p}|i\rangle \qquad \text{for emission} \qquad (7.b)$$

تعليق: بالرغم من أن المعادلتين تعدان مبدئياً متشابهتان، ولكن المعادلة الأولى تصف حالة امتصاص الأشعة، والثانية تصف انبعاثها. المعادلة الأولى يمكن اعتبار أن $\hat{A}|i\rangle$ يمثل المستوى الابتدائي (يصف حالة الإشعاع مع الذرة) و $\langle f|$ هو المستوى النهائي و $-\frac{e}{mc}\hat{p}$ هو المؤثر المسئول عن الانتقال. بالمثل، يمكن وصف المعادلة الثانية كالتالي: يمكن اعتبار أن $\langle f|\hat{A}$ يمثل المستوى النهائي (يصف حالة الإشعاع مع المستوى النهائي للذرة) و $|i\rangle$ هو المستوى الابتدائي و $-\frac{e}{mc}\hat{p}$ هو المؤثر المسئول عن الانتقال.

٢- حساب الجهد المتجهي $\hat{A}$

نفترض أن الجهد المتجهي يأخذ الشكل:

$$\hat{A}=\hat{e}\,A_o\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t) \qquad (8)$$

حيث $\hat{e}$ يمثل متجه الوحدة (اتجاه الاستقطاب) باتجاه $\hat{A}$، و $\boldsymbol{k}=\frac{\omega}{\mathbf{c}}\hat{k}$. $\hat{k}$ تمثل متجه الوحدة باتجاه انتشار الإشعاع. باستخدام مقياس كولومب $\nabla\cdot\vec{A}=0$ يتحقق الشرط:

$$\hat{e}\cdot\boldsymbol{k}=0 \qquad (9)$$

وهذا يعني أن متجه الوحدة $\hat{e}$ يكون متعامداً على اتجاه انتشار الإشعاع.

نستطيع أيضاً حساب المجال الكهربي من العلاقة:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\frac{\omega}{c}\hat{e}\, A_o \sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \qquad (10)$$

وأيضاً كثافة الطاقة (الطاقة لوحدة الحجوم) تعرف بالعلاقة:

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{\frac{1}{8\pi}\int\left(E^2 + B^2\right)d\tau}{V} = \frac{1}{8\pi}\left(E^2 + B^2\right) \\ &= \frac{E^2}{4\pi}, \qquad\qquad |E| = |B| \\ &= \frac{\omega^2 A_o^2}{4\pi c^2}\sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \end{aligned}\right\} \qquad (11)$$

ومنها نجد أن كثافة الطاقة المتوسطة هي:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\omega^2 A_o^2}{4\pi c^2}\underbrace{\left\langle \sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)\right\rangle}_{\frac{1}{2}} = \frac{\omega^2 A_o^2}{8\pi c^2} \qquad (12)$$

لكن لفوتون وحيد يوجد بالحجم V، نعلم أن:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\hbar\omega}{V} \qquad (13)$$

بمساواة المعادلتين (١٢) أو (١٣) نحصل على القيمة القياسية:

$$A_o = \left[\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2} \qquad (14)$$

ومنها نجد:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{e}\left[\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2} \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \\ &= \hat{e}\left[\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2} \left\{e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)} + e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)}\right\} \end{aligned} \qquad (15)$$

من العلاقات السابقة نجد أن السعة الاحتمالية للانتقال من المستوى الابتدائي $\left|i\right\rangle$ إلى المستوى النهائي $\left|f\right\rangle$ يعطى بالمعادلة:

$$C_{fi} = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f|V_{\text{int}}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t}\,dt; \qquad (16)$$

حيث $\omega_{fi} = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$ و

$$\langle f|V_{\text{int}}|i\rangle = -\frac{e}{mc}\left[\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right]^{1/2}\left\{\langle f|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i\omega t} + \langle f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{i\omega t}\right\} \qquad (17)$$

وبإجراء التكامل على الزمن في المعادلة (16) نحصل على:

$$C_{fi} = \frac{i}{\hbar}\frac{e}{m}\left[\frac{2\pi\hbar}{\omega V}\right]^{1/2}\left\{\langle f|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega-\omega_{fi})t/2}\frac{\sin[(\omega-\omega_{fi})t/2]}{(\omega-\omega_{fi})t/2} + \langle f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega+\omega_{fi})t/2}\frac{\sin[(\omega+\omega_{fi})t/2]}{(\omega+\omega_{fi})t/2}\right\} \qquad (18)$$

بالمعادلة (18)، عندما يأخذ الزمن $t \to \infty$ فإن الحد الأول يأخذ قيم عظمى حول القيمة $\omega = \omega_{fi}$ والحد الثاني يأخذ قيم عظمى حول القيمة $\omega = -\omega_{fi}$. من الواضح أنه في حالة الامتصاص يكون $E_f > E_i$ و $\omega_{fi} > 0$ ؛ من ثم يصبح الحد الأول معبراً عن حالة الامتصاص والحد الثاني يكون منعدماً. في حالة الانبعاث يكون $E_f < E_i$ و $\omega_{fi} < 0$ ؛ من ثم يصبح الحد الثاني معبراً عن حالة الانبعاث، والحد الأول يكون منعدماً

دعونا الآن نعتبر حالة انبعاث الإشعاع من الذرة، لذلك:

$$C_{fi} = \frac{i}{\hbar}\frac{e}{m}\left[\frac{2\pi\hbar}{\omega V}\right]^{1/2}\langle f|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega+\omega_{fi})t/2}\frac{\sin[(\omega+\omega_{fi})t/2]}{(\omega+\omega_{fi})t/2}$$

أو

$$C_{fi} = \frac{i}{\hbar}\frac{e}{m}\left[\frac{2\pi\hbar}{\omega V}\right]^{1/2} \left\langle f \left| e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \hat{\boldsymbol{p}} \right| i \right\rangle \cdot \hat{e}\, e^{-i(\omega-\omega_{if})t/2} \frac{\sin\left[(\omega-\omega_{if})t/2\right]}{(\omega-\omega_{if})t/2};$$

$$\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$$

٣- تقريب ثنائي القطب

الحد $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ يلعب دوراً أساسياً في مصفوفة الانتقال، ولكن من الصعب حساب قيم المصفوفة بهذا الحد في هذه الصورة. لذلك نلجأ إلى التقريب

$$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 1 - i\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^2}{2!} + \cdots$$
$$\approx 1$$

ويسمى تقريب "*ثنائي القطب الكهربائي*". وقد تم إهمال الحدود العليا من المتسلسلة وذلك من معرفتنا بأبعاد الذرة التي تكون بحدود القيمة $r \sim 10^{-8}\ \text{cm}$ والطول الموجي للضوء المرئي يكون:

$$k\left(=\frac{2\pi}{\lambda}\right) \sim 10^5\ \text{cm}^{-1}$$

من ثم في مدى التكامل يكون $kr << 1$ ، ويمكن استخدام التقريب:

$$\left\langle f \left| e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \hat{\boldsymbol{p}} \right| i \right\rangle \approx \left\langle f \left| \hat{\boldsymbol{p}} \right| i \right\rangle$$

مثال: أثبت أن $\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{H}_0\right]$ حيث $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\boldsymbol{r})$.

الحل: بفرض أن المستويين $\left|i\right\rangle$ و $\left|f\right\rangle$ هما مستويات مميزة للهملتونيان $\hat{H}_o$ ، بمعنى أن:

$$\hat{H}_o \left|f\right\rangle = E_f \left|f\right\rangle;$$
$$\hat{H}_o \left|i\right\rangle = E_i \left|i\right\rangle$$

نجد أن:

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{x},\hat{H}_0\right] &= \left[\hat{x},\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m}+\hat{V}(\boldsymbol{r})\right]\\
&= \frac{1}{2m}\left[\hat{x},\hat{p}_x^2\right]+\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\hat{x},\hat{p}_y^2\right]}_{=0}+\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\hat{x},\hat{p}_z^2\right]}_{=0}+\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\hat{x},\hat{V}(\boldsymbol{r})\right]}_{=0}\\
&= \frac{1}{2m}\left\{\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\hat{p}_x+\hat{p}_x\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\right\}\\
&= \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x
\end{aligned}
$$

من هنا نستنتج أن:

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{H}_0\right]$$

مثال: أثبت أن $\langle f|\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle = \frac{m}{i}\omega_{if}\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle$.

الحل: من المثال السابق نستطيع تبسيط المصفوفة $\langle f|\boldsymbol{p}|i\rangle$ كالتالي:

$$
\begin{aligned}
\langle f|\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle &= \frac{m}{i\hbar}\left\langle f\left|\left[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{H}_0\right]\right|i\right\rangle = \frac{m}{i\hbar}\left\langle f\left|\hat{\boldsymbol{r}}\hat{H}_0-\hat{H}_0\hat{\boldsymbol{r}}\right|i\right\rangle\\
&= \frac{m}{i\hbar}\left\{E_i\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle - E_f\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\right\}\\
&= \frac{m}{i\hbar}\left(E_i-E_f\right)\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\\
&= \frac{m}{i}\omega_{if}\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle
\end{aligned}
$$

تعليق: من هذا المثال نجد أنه قد تم تحويل المؤثر التفاضلي $\hat{\boldsymbol{p}}$ إلى مؤثر المسافة $\hat{\boldsymbol{r}}$ ، ويرتبط الأخير بعزم ثنائي القطب $\vec{\mu} = q\vec{r}$.

أخيراً نجد أن:

$$C_{fi} = e\omega_{if}\left[\frac{2\pi}{\omega\hbar V}\right]^{1/2}\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\cdot\hat{e}\,e^{-i(\omega-\omega_{if})t/2}\frac{\sin\left[\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2\right]}{\left(\omega-\omega_{if}\right)t/2}$$

و

$$|C_{fi}|^2 = (e\omega_{if})^2 \left[\frac{2\pi}{\omega\hbar V}\right] |\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\cdot\hat{e}|^2 \frac{\sin^2[(\omega-\omega_{if})t/2]}{[(\omega-\omega_{if})t/2]^2}$$

أو

$$|C_{fi}|^2 = (e\omega_{if})^2 \left[\frac{2\pi}{\omega\hbar V}\right] |\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\cdot\hat{e}|^2\, 2\pi\hbar t\,\delta[E-(E_i-E_f)]$$

حيث استخدمنا نتائج الباب السابق. من المعادلة الأخيرة نجد أن الاحتمالية لوحدة الزمن للانبعاث الإشعاعي هي:

$$\Gamma = \frac{(2\pi e)^2\,\omega}{V} |\langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle\cdot\hat{e}|^2\,\rho(E)$$

حيث $\rho(E)$ هي كثافة المستويات النهائية، التي تعبر عن الفوتون المنبعث و

$$E = E_i - E_f = \hbar\omega$$

٤- كثافة المستويات

إذا اعتبرنا الزاوية المجسمة $d\Omega$، فإن عدد المستويات dn التي يكون فيها تردد الفوتون بين ω و $\omega + d\omega$ تكون:

$$dn = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p^2\,dp\,d\Omega = \frac{V}{(2\pi c)^3}\omega^2\,d\omega\,d\Omega$$

حيث استخدمنا العلاقات:

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$$

و V هو حجم الصندوق. لذلك:

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{V\,\omega^2}{(2\pi c)^3\,\hbar}\,d\Omega$$

ومنها نجد:

$$\Gamma = \frac{(2\pi e)^2 \omega}{V} \left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 \frac{V \omega^2}{(2\pi c)^3 \hbar} d\Omega$$
$$= \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 d\Omega$$

نلاحظ هنا أن $\hat{e}$ متجه يعبر عن استقطاب الإشعاع. من ثم إذا أردنا أن نحسب الاحتمال الكلي للانتقال الإشعاعي يجب أن نجمع قيمة الاستقطابين ونكامل على الزاوية المجسمة. اعتبر أن اتجاه $\boldsymbol{k}$ هو $\hat{z}$، لذلك فإن المتجه $\hat{e}$ يأخذ الاتجاه $\hat{x}$ أو $\hat{y}$. لذلك إذا تم تجميع $\left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2$ لاتجاهي الاستقطاب نحصل على:

$$\left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 = \left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \cdot \hat{x} \right|^2 + \left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \cdot \hat{y} \right|^2$$
$$= p_x^2 + p_y^2 = p^2 - p_z^2 = p^2 - p^2 \cos^2 \theta$$
$$= p^2 \sin^2 \theta$$

حيث عرفنا $\hat{\boldsymbol{p}} \equiv \langle f | \hat{r} | i \rangle$ وتسمى مصفوفة انتقال ثنائي القطب و θ هي الزاوية بين p والمحور z. أخيراً بالتكامل على الزاوية المجسمة نحصل على:

$$\Gamma = \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left| \langle f | \hat{r} | i \rangle \right|^2 \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \sin\theta d\theta d\varphi$$
$$= \frac{4}{3} \alpha \frac{\omega^3}{c^2} |\hat{\boldsymbol{r}}_{fi}|^2 = \frac{4}{3} \alpha \frac{\omega^3}{c^2} \left\{ |x_{fi}|^2 + |y_{fi}|^2 + |z_{fi}|^2 \right\}, \qquad |x_{fi}|^2 \equiv \left| \langle f | x | i \rangle \right|^2$$

و $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ هو ثابت التركيب الدقيق.

٥- قواعد الاختيار لمصفوفة انتقال ثنائي القطب

تم سابقاً، في تأثير "شتارك"، التحدث عن قواعد الاختيار. وعلى نفس الخطوات سوف نشتق قواعد الاختيار لمصفوفة انتقال ثنائي القطب $\langle f | \hat{r} | i \rangle$. دعونا نأخذ اتجاه استقطاب ثنائي القطب باتجاه المحور Z. باعتبار الأعداد الكمية ℓ_1, m_1 و ℓ_2, m_2 تمثل المستوى الابتدائي i والنهائي f بالترتيب.

باستخدام الجزء الزاوي بالمستوى الابتدائي والنهائي دالة في الدالة التوافقية الكروية بالصورة:

$$z = r\cos\theta = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}$$

بحيث نجد أن التكامل الزاوي بمصفوفة انتقال ثنائي القطب $\langle 2|z|1\rangle$ يأخذ الشكل:

$$\int Y^*_{\ell_2,m_2}Y_{1,0}Y_{\ell_1,m_1}d\Omega$$

نجد أن التكامل ينعدم إلا إذا تحقق الشرط:

$$\ell_2 = |\ell_1 - 1| \text{ or } \ell_1 + 1 \Rightarrow \underline{\Delta\ell = \pm 1};$$
$$m_1 = m_2 \Rightarrow \underline{\Delta m = 0}$$

إذا افترضنا أن اتجاه استقطاب ثنائي القطب باتجاه المحور X فإننا نتعامل مع تكامل بالصورة $\langle 1|x|2\rangle$ ولكن من الأفضل استخدام الصورة $\langle 2|x+iy|1\rangle$ حيث:

$$x + iy = r\sin\theta e^{\pm i\varphi} \propto Y_{1,\pm 1}$$

من ثم فإن التكامل الزاوي بمصفوفة انتقال ثنائي القطب يأخذ الشكل:

$$\int Y^*_{\ell_2,m_2}Y_{1,\pm 1}Y_{\ell_1,m_1}d\Omega$$

ومنه نجد أن التكامل ينعدم إلا إذا تحقق الشرط:

$$\ell_2 = |\ell_1 - 1| \text{ or } \ell_1 + 1 \Rightarrow \underline{\Delta\ell = \pm 1};$$
$$\underline{\Delta m = \pm 1}$$

من هنا نستطيع أن نضع قواعد الاختيار العامة لمصفوفة انتقال ثنائي القطب $\langle f|\mathbf{r}|i\rangle$ وهي:

$$\Delta\ell = \pm 1;$$
$$\Delta m = 0, \pm 1$$

من ثم فإن الانتقال يجب أن يكون مصحوباً بتغير في الندية. مثال على ذلك: إلكترون بالمستوى $2P$ ، ذي الندية الفردية، مسموح له الانتقال إلى المستوى $1S$ ، ذي الندية الزوجية. بالطبع يوجد احتمالية للانتقال إلى المستوى $2S$ ولكن ذلك ضعيف جداً

مقارنةً بالانتقال $2P \to 1S$. الانتقال من المستوى $2S$ إلى المستوى $1S$ غير مسموح به ويسمى انتقال محرم (Forbidden transition).

الانتقال المحرم ليس محرماً قطعياً، بمعنى أنه يمكن حدوثه، ولكن بمعدل ضعيف جداً بالنسبة للانتقال المسموح، تبعاً لتقريب ثنائي القطب الكهربي. بعد تقريب ثنائي القطب الكهربي، يأتي انتقال ثنائي القطب المغناطيسي (Magnetic dipole transition) الناتج من تفاعل مغزل الإلكترون مع المركبة المغناطيسية المتذبذبة للإشعاع الكهرومغناطيسي الساقط. حدوث الانتقال ثنائي القطب المغناطيسي يقل بمقدار 10^{-5} عن انتقال ثنائي القطب الكهربي. بعد ذلك يظهر انتقال رباعي القطب الكهربي (Electric quadrupole transitions) ولكن يقل بمقدار 10^{-8} عن انتقال ثنائي القطب الكهربي. لانتقالات ثنائي القطب المغناطيسي و رباعي القطب الكهربي تظهر بعض قواعد الاختيار الأخرى، بحيث إنه إذا انعدم الانتقال تبعاً لتقريب ثنائي القطب الكهربي فإنه يمكن أن يكون مسموحاً تبعاً لتقريب رباعي القطب الكهربي.

مثال: احسب زمن العمر (Life-time) لإلكترون بالمستوى $2P$ لذرة الهيدروجين.

الحل: المستوى $2P$ له $m_\ell = 0, \pm 1, \ell = 1$ والانتقال التلقائي المسموح به، والعالي الاحتمالية، هو الانتقال $2P \to 1S$ حيث المستوى $1S$ له $m_\ell = 0, \ell = 0$.

لحساب المصفوفة $|r_{fi}|^2$ نعرف الدوال المميزة للمستويين، وهما:

$$|i\rangle \equiv |2P\rangle = R_{21} Y_{1,m}; \qquad R_{21} = \left(\frac{Z}{2a_o}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_o\sqrt{3}} e^{-\frac{Zr}{2a_o}};$$

$$|f\rangle \equiv |1S\rangle = R_{10} Y_{0,0}; \qquad R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_o}}$$

نحتاج الآن إلى عناصر مصفوفة ثنائية القطب وهي x_{fi} ، y_{fi} و z_{fi}. لحسابهما سوف نستخدم التعريفات التالية:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}r\left(-Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right);$$

$$x = r\sin\theta\sin\varphi = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}r\left(Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right);$$

$$z = r\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,0}$$

واجب منزلي: تحقق من نتيجة التكامل القطري التالي:

$$\int_0^\infty R_{10}^* r^3 R_{21} dr = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^4 \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3Zr}{2a_o}} dr$$

$$= 4\sqrt{6}\left(\frac{2}{3}\right)^5 \frac{a_o}{Z}$$

أما التكاملات التي تعتمد على الزاوية فيمكن حسابها لكل حد على حدة كالتالي:

أ- للحد x_{fi}

$$\int Y_{0,0}^*\left(-Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right)Y_{1,m} d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\left(Y_{1,-1}^* - Y_{1,1}^*\right)Y_{1,m} d\Omega$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(-\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}\right)$$

ب- للحد y_{fi}

$$\int Y_{0,0}^*\left(Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right)Y_{1,m} d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\left(Y_{1,-1}^* + Y_{1,1}^*\right)Y_{1,m} d\Omega$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}\right)$$

ج- للحد z_{fi}

$$\int Y_{0,0}^*\left(Y_{1,0}\right)Y_{1,m} d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\left(Y_{1,0}^*\right)Y_{1,m} d\Omega$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\delta_{m,0}\right)$$

باستخدام التكامل القياسي $\int_0^\infty e^{-ar}r^n dr = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}$ ، نجد:

$$x_{fi} = \frac{1}{6a_o^4}\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_o}}dr\left(-\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right) = 4\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_o\left(-\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right);$$

$$y_{fi} = -\frac{i}{6a_o^4}\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_o}}dr\left(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right) = -4i\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_o\left(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right);$$

$$z_{fi} = \frac{1}{3\sqrt{2}a_o^4}\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_o}}dr\left(\delta_{m,0}\right) = 4\sqrt{2}\left(\frac{2}{3}\right)^5 a_o\left(\delta_{m,0}\right)$$

من السهل التحقق من أنه لكل حالة من الحالات $m = 0, \pm 1$ فإن المجموع $|x_{fi}|^2 + |y_{fi}|^2 + |z_{fi}|^2$ هو نفسه ويساوي $2^5\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_o}{Z}\right)^2$. من هنا نجد أن المعدل هو (مع اعتبار أن جميع القيم للحالات m متساوية الاحتمال)

$$\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{4}{3}\alpha\frac{\omega^3}{c^2}|\boldsymbol{r_{fi}}|^2 = \frac{2^7}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_o}{Z}\right)^2\alpha\frac{\omega^3}{c^2}\left\{\delta_{m,0}+\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right\}$$

إذا كان المستوى الابتدائي $2P$ غير مستقطب (بمعنى أنه لا يأخذ اتجاه معين) فيجب أن نحسب المتوسط للنتيجة النهائية، على قيم m. حيث إن التجميع هنا لا يعتمد على m ماعدا كرونكر دلتا، وحيث إن:

$$\frac{1}{3}\sum_m\left\{\delta_{m,0}+\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right\} = 1$$

فإننا نحصل على:

$$\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{2^7}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_o}{Z}\right)^2\alpha\frac{\omega^3}{c^2}$$

لكن

$$\left(\hbar\omega\right)_{2P\to 1S} = E_{2P} - E_{1S} = \left[\frac{1}{2\times 2^2}-\frac{1}{2}\right]\frac{Z^2e^2}{a_o} = \frac{3}{8}\frac{Z^2e^2}{a_o};$$

حيث $a_o = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$.بعد أن نقوم بتبسيط القيم نحصل على:

$$\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{2^7}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^8 \frac{m\,e^{10}}{c^3\,\hbar^6} Z^4 \approx 6\times 10^8 Z^4 \ \mathrm{s}^{-1}$$

و

$$\tau = 1/\Gamma_{2P\to 1S} = \frac{2^7}{3}\left(\frac{3}{2}\right)^8 \left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^3 \frac{\hbar^3}{m\,e^4} \approx 1.6\times 10^{-9} Z^{-4} \ \mathrm{s}.$$

وتتطابق هذه النتيجة مع القيم العملية لهذا الانتقال.

تعليق: الانبعاث التلقائي هنا يكون له عرض محدد لخطوط الطيف، حيث يمكن حسابه من مبدأ عدم اليقين وهو $\Delta E \approx \dfrac{\hbar}{\tau}$. عملياً فإن عرض خطوط الطيف تكون أكبر من حساباتنا النظرية وذلك ناتج عن عدة عوامل منها: ظاهرة "دوبلر"، والتصادمات، والتفاعل مع الذرات المحيطة والقريبة.

ملحق (17.A)

حركة جسيم في مجال كهرومغناطيسي

في هــذا الملحــق ســوف نــشتق صــيغة للــهملتونيان لجــسيم يتحــرك في مجــال كهرومغناطيسي.

أ- تكوين الهملتونيان

افرض أنَّ جسيماً نقطياً كتلته m ، وشحنته q ، يتحرك في مجال كهرومغناطيسي خارجي. القوة الكلية المؤثرة على الجسيم تعطى بتعبير "لورنتز" بالشكل:

$$\vec{F} = q[\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}] \tag{1}$$

حيث $\vec{E}$ و $\vec{B}$ هما شدة المجال الكهربي والمغناطيسي بالترتيب و $\vec{v}$ هي سرعة الجسيم. المجالان الكهربي والمغناطيسي يحققان معادلات "ماكسويل" التي تأخذ الصور التالية، وذلك باستخدام نظام "جاوس":

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \tag{2.a}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho, \tag{2.b}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}, \tag{2.c}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \tag{2.d}$$

حيث $\vec{j}$ هي شدة التيار و ρ هي كثافة الشحنات. من المعادلة $(2.d)$ والمتطابقة $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0$ ، حيث $\vec{A}$ سوف يدعى الجهد المتجهي، نجد أن $\vec{B}$ يمكن التعبير عنها بدلالة المتجه $\vec{A}$ بالصورة:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \tag{3}$$

مثال: من المعادلة (٣) نجد أن المعادلة $(2.a)$ تحتفظ بصورتها العامة ولا تتغير، بمعنى أن:

$$\vec{\nabla}\times\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}=\vec{\nabla}\times\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)=\vec{\nabla}\times\left(\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right)=0$$

من المعادلة $(2.a)$ واستخدام المتطابقة $\vec{\nabla}\times(\nabla\varphi)=0$ ، حيث φ يدعى الجهد القياسي، نستطيع وضع شدة المجال الكهربي $\vec{E}$ بالشكل:

$$\vec{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\nabla\varphi \tag{4}$$

. بمعرفة الجهدين $\vec{A}$ و φ نجد أن قوة "لورنتز" تأخذ الشكل:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt}=\vec{F}=q\left[-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\nabla\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\times\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)\right] \tag{5}$$

باستخدام التعريف:

$$\begin{aligned}\left(\vec{v}\times\vec{\nabla}\times\vec{A}\right)_x&=v_y\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)-v_z\left(\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\\&=\frac{\partial}{\partial x}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)-\frac{dA_x}{dt}+\frac{\partial A_x}{\partial t}\end{aligned} \tag{6}$$

حيث استخدمنا العلاقة:

$$\frac{dA_x}{dt}=\frac{\partial A_x}{\partial t}+\left(v_x\frac{\partial A_x}{\partial x}+v_y\frac{\partial A_x}{\partial y}+v_z\frac{\partial A_x}{\partial z}\right) \tag{7}$$

لذلك نجد أن القوة في اتجاه المحور x تأخذ الشكل:

$$F_x=m\frac{dv_x}{dt}=q\left[-\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}-\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \tag{8}$$

أو بشكل آخر:

$$\frac{d}{dt}\left(mv_x+\frac{q}{c}A_x\right)=q\frac{\partial}{\partial x}\left[-\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \tag{9}$$

بالطبع يمكن استنتاج معادلات شبيهة بالمعادلة السابقة في الاتجاهين y و z . المعادلات الثلاث يمكن وضعهنَّ بالشكل المبسط المتجهي التالي:

$$\frac{d}{dt}\left(m\vec{v}+\frac{q}{c}\vec{A}\right)=q\nabla\left[-\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \qquad (10)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial v_j}\left[-q\varphi+\frac{q}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right]\right)=\nabla\left[-q\varphi+\frac{q}{c}\left(\vec{v}\cdot\vec{A}\right)\right] \qquad (10a)$$

المعادلة السابقة يمكن وضعها في صورة "لاجرانجيان" التي هي بالشكل:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}\right)=\frac{\partial L}{\partial x_j}; \qquad j\equiv 1,2,3 \qquad (11)$$

حيث L هو "لاجرانجيان" الذي يعرف من المعادلات السابقة بالمعادلة:

$$L=\frac{1}{2}m\vec{v}\cdot\vec{v}-q\varphi+\frac{1}{c}\left(\vec{A}\cdot\vec{v}\right) \qquad (12)$$

وكمية الحركة المرافقة تعطى بالشكل:

$$p_x=\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=mv_x+\frac{q}{c}A_x$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{p}=m\vec{v}+\frac{q}{c}\vec{A}} \qquad (13)$$

ويصبح الهملتونيان التقليدي بالشكل:

$$\begin{aligned} H &= \vec{p}\cdot\vec{v}-L \\ &= \vec{p}\cdot\left[\frac{1}{m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)\right]-\frac{m}{2}\left[\frac{1}{m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)\right]^2+q\varphi-\frac{q}{mc}\vec{A}\cdot\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right) \\ &= \frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\varphi \end{aligned} \qquad (14)$$

تدل المعادلة (١٤) على الهملتونيان للحركة غير النسبية لجسيم مشحون في مجال كهرومغناطيسي يتأتى بوضع $\hat{p}-\frac{q}{c}\hat{A}$ بدلاً من $\hat{p}$. أخيراً نستطيع التحويل من الصيغة التقليدية إلى الصيغة الكمية بتحويل المتغيرات إلى مؤثرات لنحصل على:

$$\boxed{\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\varphi} \qquad (15)$$

ب- حركة جسيم مشحون في مجال كهرومغناطيسي ثابت

في حالة حركة جسيم، كتلته m وشحنته q، في مجال كهرومغناطيسي ثابت نجد أن الزمن يظهر بمعادلة شرودنجر خلال الحد $e^{-iEt/\hbar}$، وتصبح معادلة شرودنجر كالتالي:

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2\psi+q\varphi\psi=E\psi \qquad (1)$$

أو

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{iq\hbar}{2mc}\left[\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)\psi+\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi\right]+\frac{q^2}{2mc^2}A^2\psi+q\varphi\psi=E\psi \qquad (2)$$

باستخدام المتطابقة:

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{A}\psi\right)=\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)\psi+\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi \qquad (3)$$

وباعتبار المجال المغناطيسي منتظم (متماثل) فإن هذا المجال يمكن التعبير عنه بالجهد المتجهي:

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\left(\vec{B}\times\hat{r}\right) \qquad (4)$$

واجب منزلي: تحقق من الحسابات التالية:

$$1-\ \vec{\nabla}\times\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{\nabla}\times\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{r}\right)\vec{B}-\left(\vec{B}\cdot\vec{\nabla}\right)\vec{r}\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left[3\vec{B}-\vec{B}\right]=\vec{B} \qquad (5)$$

$$2-\ \vec{\nabla}\cdot\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{B}\times\hat{r}\right)=\frac{1}{2}\left[\hat{r}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\vec{B}\right)-\vec{B}\cdot\left(\vec{\nabla}\times\hat{r}\right)\right]=0 \qquad (6)$$

$$3-\ \frac{iq\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi=\frac{iq\hbar}{2mc}\left(\vec{B}\times\hat{r}\right)\cdot\vec{\nabla}\psi=-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\left\{\vec{r}-i\hbar\vec{\nabla}\right\}\psi$$

$$=-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\left\{\underbrace{\vec{r}\times\vec{p}}_{\vec{L}}\right\}\psi$$

$$=-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{L}\,\psi \tag{7}$$

من الواجب المنزلي السابق نجد أن معادلة شرودنجر تبسط إلى:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-\frac{q}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{L}\,\psi+\frac{q^2}{8mc^2}\left(\vec{B}\times\hat{r}\right)^2\psi+q\varphi\psi=E\psi \tag{8}$$

من معلوماتنا السابقة، نعلم أن طاقة الوضع لعزم ثنائي القطب $\vec{\mu}$ في مجال خارجي متماثل يعطى بالعلاقة:

$$U=-\vec{\mu}\cdot\vec{B} \tag{9}$$

من ثم فإن الحد الثاني بمعادلة شرودنجر يمكن وصفه على أنه طاقة التفاعل المغناطيسية مع عزم ثنائي القطب $\vec{\mu}$ ، حيث

$$\vec{\mu}=\frac{q}{2mc}\vec{L} \tag{10}$$

من السهل تفهم هذا التعريف تقليدياً إذا افترضنا الجسيم يتحرك بسرعة v في مسار دائري نصف قطره r. لذلك فإن كمية الحركة الزاوية للجسيم تعرف بالمعادلة $L=mvr$. الشحنة المتحركة ينشأ عنها تيار يعرف بالقيمة وينساب في حلقة مساحتها πr^2. لهذا فإن هذا التيار يلازمه عزم ثنائي القطب وهو:

$$\mu=\frac{I}{c}\pi r^2=\frac{qv}{2\pi rmc}\pi r^2=\frac{q}{2mc}L \tag{11}$$

وهو نفس القانون المشتق سابقاً، المعادلة (١٠)، بواسطة ميكانيكا الكم.

الحد الثالث من معادلة شرودنجر لها أيضاً تفسير فيزيائي ولكن يتطلب بعض المصطلحات الخارجة عن نطاق هذا الكتاب. عامةً في معظم المسائل الفيزيائية يكون

المجال المغناطيسي الخارجي صغير بحيث نستطيع أن نحتفظ بالحد الخطي للمجال وهو $\vec{B}$ ونُهمل حدود المجال ذي القوى التربيعية.