درس بیستم و دوم: اختلال وابسته به زمان

۱ مقدمه

مطابق با اصول موضوع مکانیک کوانتومی، دینامیک یک سیستم میکروسکوپی بسته توسط یک عملگر هرمیتی به نام هامیلتونی معین می شود. معادله شرودینگر نحوه تحول حالت ها را در طول زمان مشخص می کند:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle. \tag{1}$$

این معادله هرگاه که H مستل از زمان باشد حل ساده ای دارد که عبارت است از:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle. \tag{2}$$

به عبارت دیگر عملگر تحول یک سیستم بسته وقتی که هامیلتونی آن صراحتاً وابسته به محیط نباشد برابراست با:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \tag{3}$$

اما حل این معادله برای وقتی که H تابع زمان باشد به صورت فوق ساده نیست. در نگاه اول به نظر می رسد که دراین شرایط عملگر تحول می بایست به شکل زیر باشد:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')dt'}, \tag{4}$$

اما کمی دقت نشان می دهد که این رابطه تنها وقتی درست است که عملگرهای هامیلتونی در همه زمان ها با هم جابجا شوند یعنی

$$[H(t), H(t')] = 0 \quad \forall\ t,\ \ t' \tag{5}$$

و طبیعی است که این اتفاق خیلی نادری است.

تمرین: نشان دهید که هرگاه دو عملگر A و B با هم جابجا شوند آنگاه

$$e^A e^B = e^{A+B}. \tag{6}$$

تمرین: لم – بیکر هاسدورف [1] به صورت زیر بیان می شود:

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[A,B]]+\cdots} \tag{7}$$

که درآن علامت $\cdots$ نشان دهنده‌ی جابجاگرهای مرتبه بالاتراست. نشان دهید که هرگاه $[A,B]=icI$ که درآن c یک عدد ثابت است، آنگاه

$$e^A e^B = e^{\frac{ic}{2}} e^{A+B} \tag{8}$$

حال فرض کنید که عملگرهای هامیلتونی در همه زمان ها با هم جابجا می شوند. دراین صورت فاصله زمانی 0 تا t را می توانیم به N فاصله بسیار کوچک به طول ϵ تقسیم کنیم به نحوی که $N\epsilon = t$. دراین صورت خواهیم داشت:

$$t_0 = 0, \quad t_1 = \epsilon, \quad t_2 = 2\epsilon, \quad t_3 = 3\epsilon, \quad t_n = n\epsilon, \quad \cdots \quad t_N \equiv t = N\epsilon, \tag{9}$$

فاصله های ϵ را آنقدر کوچک می گیریم که هامیلتونی در طول هربازه‌ی کوچک عملاً ثابت باشد و بتوانیم از رابطه‌ی (3) استفاده کنیم. دراین صورت می نویسیم

$$\begin{aligned}
|\psi(t_1)\rangle &= e^{-iH(t_0)\epsilon}|\psi(0)\rangle \\
|\psi(t_2)\rangle &= e^{-iH(t_1)\epsilon}|\psi(t_0)\rangle \\
|\psi(t_3)\rangle &= e^{-iH(t_2)\epsilon}|\psi(t_1)\rangle \\
&\cdots \\
|\psi(t_N)\rangle &= e^{-iH(t_{N-1})\epsilon}|\psi(t_{N-1})\rangle,
\end{aligned} \tag{10}$$

که از آن نتیجه می گیریم

$$|\psi(t)\rangle \approx e^{-iH(t_{N-1})\epsilon} e^{-iH(t_{N-2})\epsilon} e^{-iH(t_{N-3})\epsilon} \cdots e^{-iH(t_1)\epsilon} e^{-iH(t_0)\epsilon}|\psi(0)\rangle. \tag{11}$$

[1] Baker-Hasudorf

علامت تقریب به این دلیل به کار رفته است که در فاصله زمانی به طول ϵ فرض شده است که هامیلتونی ثابت است. بنابراین عبارت دقیق وقتی به دست می آید که ϵ به سمت صفر میل کند (و البته N به سمت بی نهایت، مشروط بر این که حاصل ضرب آنها که همان t است ثابت باقی بماند.) بنابراین عملگرتحول به صورت دقیق برابر است با:

$$U(t) = \lim_{N\longrightarrow\infty, N\epsilon=t} e^{-iH(t_{N-1})\epsilon}e^{-iH(t_{N-2})\epsilon}e^{-iH(t_{N-3})\epsilon}\cdots e^{-iH(t_1)\epsilon}e^{-iH(t_0)\epsilon}. \tag{12}$$

چنانچه شرط 5 برقرار باشد، می توانیم از نتیجه تمرین قبلی استفاده کنیم و این عبارت را به صورت خیلی ساده زیر بنویسیم:

$$U(t) = \lim_{N\longrightarrow\infty, N\epsilon=t} e^{-i\sum_{i=0}^{N-1} H(t_i)\epsilon} = e^{-i\int_0^t H(t')dt'}. \tag{13}$$

اما همان طور که پیشتر هم گفتیم شرطِ 5 معمولا برقرار نیست و عملگر تحول را نمی توان به شکل ساده بالا نوشت . در چنین شرایطی عبارت دقیق و صحیح همان است که در رابطه‌ی 12 آمده است که به طور نمادین آن را به صورت زیر می نویسند:

$$U(t) = \mathcal{T}e^{-i\int_0^t H(t')dt'}. \tag{14}$$

این عبارت اصطلاحاً تابع نمایی زمان مرتب یا $Time\ Ordered\ Exponential$ گفته می شود و برای تاکید بر تفاوت آن با تابع نمایی معمولی نمادِ $\mathcal{T}$ قبل از آن به کار رفته‌است. دقت کنید که در چنین تابعی نمی توان نخست انتگرال را محاسبه و سپس مقدار حاصل را در تابع نمایی قرار داد.

می توان به شیوه دیگری نیز در باره عملگر تحول یکانی فکر کنیم و آن را به صورت یک بسط بنویسیم. این شکل از بسط به خاطر کاربردش در نظریه اختلال اهمیت دارد. برای این کار نخست معادله دیفرانسیل شرودینگر را به شکل انتگرالی زیر می نویسیم:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \int_0^t \frac{d}{dt'}|\psi(t')\rangle dt' \tag{15}$$

ویا

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')|\psi(t')\rangle dt'. \tag{16}$$

این معادله یک معادله انتگرالی است و ارزش آن بیشتر صوری است و به این معنانیست که ما توانسته ایم حلی برای $|\psi(t)\rangle$ بیابیم، زیرا $|\psi(t)\rangle$ در طرف راست معادله نیز وجود دارد. می توان با تکرار آن به روابط معادلی رسید که همگی درست و دقیق هستند و هیچ تقریبی در آنها به کار نرفته است. به عنوان مثال می توان نوشت:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 H(t_1)|\psi(0)\rangle + (\frac{i}{\hbar})^2\int_0^t dt_1 H(t_1)\int_0^{t_1} dt_2 H(t_2)|\psi(t_2)\rangle. \tag{17}$$

این کار را می توان همینطور ادامه داد و به یک سری رسید که درآن هرجمله نسبت به جمله قبلی یک توان بیشتر از H دارد:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= |\psi(0)\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 H(t_1)|\psi(0)\rangle + (\frac{i}{\hbar})^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2)|\psi(0)\rangle \\ &+ (\frac{i}{\hbar})^3\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\int_0^{t_2} dt_3 H(t_1)H(t_2)H(t_3)|\psi(0)\rangle + \cdots . \end{aligned} \tag{18}$$

اگر H کوچک بود می شد ازاین سری به صورت یک سری اختلالی برای حل تقریبی معادله شرودینگر استفاده کرد به این معنا که سری را دریک مرتبه قطع کرد و ازجملات بالاتر بدلیل کوچکی شان صرف نظر کرد. ولی اشکال کار دراین است که H لزوماً کوچک نیست. دربهترین حالت H به صورت زیراست

$$H(t) = H_0 + V(t), \tag{19}$$

که درآن H_0 آن قسمت از هامیلتونی است که اولاً با زمان ثابت است و ثانیاً طیف آن کاملاً مشخص است و معمولا هامیلتونی سیستم آزاد خوانده می شود. $V(t)$ نشان دهنده برهم کنش های کوچکی است که به H_0 اضافه شده اند و عموماً نیز بستگی صریح به زمان دارند.
به عنوان مثال اتمی را درنظر می گیریم که با هامیلتونی $H_0 = \frac{P^2}{2m} + V(r)$ مشخص می شود. هرگاه یک اتم دیگر از فاصله دور به این اتم نزدیک شود بین آنها یک برهم کنش ضعیف ناشی از قطبش ابرهای الکترونی آنها بوجود می آید. این قطبش و پتانسیل ناشی ازآن در مقایسه با H_0 بسیار کوچک است . بنابراین هامیلتونی کاملی که یک اتم را توصیف می کند به شکل زیراست:

$$H(t) = H_0 + V(t), \tag{20}$$

که درآن $V(t)$ در مقایسه با H_0 کوچک است. پتانسیلِ V به این دلیل به زمان وابسته است که اتم دیگر فاصله ای متغیر از اتم مورد نظر دارد و پتانسیل نیز به فاصله وابسته است.
سوالی که با آن مواجه هستیم آن است که تحت این شرایط آیا می توان یک سری اختلالی برای عملگر تحول نوشت یاخیر. پاسخ به این سوال مثبت است و سری بدست آمده چیزی است که سری دایسون[2] نامیده می شود.

۲ سری دایسون

چگونه می توان کاری کرد که جملات متوالی بسط کوچک و کوچک ترشوند؟

[2] Dyson Series

برای این کار می بایست کاری کنیم که درجملات متوالی بجای تمامِ H تنها قسمت کوچک ِآن که ناشی از برهم کنش اضافه سیستم هستند یعنی $V(t)$ یا چیزی معادل آن قرارگیرند. می دانیم که اگر هامیلتونی تنها H_0 بود حالت سیستم به صورت $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi(0)\rangle$ حرکت می کرد. اگر حالت زیر $|\phi(t)\rangle$ را به شکل

$$|\phi(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi(t)\rangle \tag{21}$$

تعریف کنیم، واضح است که حالتِ $|\phi(t)\rangle$ با زمان تغییر نمی کند، درست مثل این است که دنیا از نظر کسی که روی حالت $|\psi(t)\rangle$ نشسته است و باآن حرکت می کند ساکن است.

درحالت کلی که $V(t)$ صفر نیست، بیایید برای از بین بردن اثر H_0، دنیا را از چشم همین شخص یعنی که روی حالت $|\psi(t)\rangle$ نشسته است نگاه کنیم. بنابراین معادله حاکم بر $|\phi(t)\rangle$ را بدست می آوریم. خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle &= i\hbar\left(e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi(t)\rangle\right) = -H_0e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi(t)\rangle + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \\ &= -H_0e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\psi(t)\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}(H_0+V(t))|\psi(t)\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}V(t)e^{\frac{-i}{\hbar}H_0t}|\phi(t)\rangle. \end{aligned} \tag{22}$$

با تعریف ِ

$$V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}V(t)e^{\frac{-i}{\hbar}H_0t}, \tag{23}$$

می توان معادله تحول $|\phi(t)\rangle$ را به شکل زیرنوشت:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle = V_I(t)|\phi(t)\rangle. \tag{24}$$

بنابراین حالت $|\phi(t)\rangle$ نیز درست مطابق با معادله شرودینگر تحول پیدا می کند ولی با هامیلتونی $V_I(t)$ که کوچک است زیرا چیزی نیست جز یک تبدیل تشابهی از $V(t)$. از نظر فیزیکی این پدیده ناشی ازآن است که دنیا از نظر ناظری که با سرعت ناشی از H_0 حرکت می کند آهسته شده است و تنها تغییرات ناشی از V_0 دیده می شوند. بنابراین مشابه با رابطه 26 می توان نوشت:

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= |\phi(0)\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1V_I(t_1)|\phi(0)\rangle + (\frac{i}{\hbar})^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2V_I(t_1)V_I(t_2)|\phi(0)\rangle \\ &+ (\frac{i}{\hbar})^3\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\int_0^{t_2}dt_3V_I(t_1)V_I(t_2)V_I(t_3)|\phi(0)\rangle + \cdots. \end{aligned} \tag{25}$$

اما این بار می توان برخلاف رابطه 26 از این سری برای یک بسط اختلالی استفاده کرد، زیرا $V_I(t)$ کوچک است. بااستفاده از این رابطه و 21 می توان یک بسط اختلالی برای $|\psi(t)\rangle$ بدست آورد. ازاین موضوع نیز استفاده می کنیم که $|\phi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$. نتیجه آن خواهد بود که:

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(0)\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_1)}V(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t_1}|\psi(0)\rangle \\
&+ (\frac{i}{\hbar})^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_1)}V(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t_1-t_2)}V(t_2)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t_2}|\psi(0)\rangle \\
&+ (\frac{i}{\hbar})^3\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\int_0^{t_2} dt_3 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_1)}V(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t_1-t_2)}V(t_2)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t_2-t_3)}V(t_3)|\psi(0)\rangle + \cdots
\end{aligned} \tag{26}
$$

این بسط که به آن به سری دایسون می گویند به ما امکان می دهد که باهرمرتبه ای از تقریب که بخواهیم معادله شرودینگر را حل کنیم.

۳ سوال اساسی در نظریه اختلال

سوال اساسی ای که با آن مواجه هستیم این است. درلحظه‌ای که آن را $t = 0$ می گیریم سیستم دریکی از ویژه حالت های هامیلتونی H_0 مثل $|i\rangle$ با انرژی E_i است. بدلیل وجود پتانسیل $V(t)$ این حالت یک حالتِ پایا نیست . بعد از گذشت زمان t با چه احتمالی سیستم در یکی دیگر از ویژه حالت های دیگرِ هامیلتونی مثل $\langle f|$ خواهد بود؟
هرگاه عملگر تحول را $U(t)$ بنامیم پاسخ این سوال برابراست با:

$$
P_{i,f} = |\langle f|U(t)|i\rangle|^2 =: |M_{i,f}|^2, \tag{27}
$$

که درآن

$$
M_{i,f} \equiv \langle f|U(t)|i\rangle, \tag{28}
$$

دامنه گذار و $P_{i,f}$ احتمال گذار خوانده می شوند. هرگاه در بسط دایسون تنها جمله صفرم و اول را نگاه داریم که به معنای آن است که دراین تقریب

$$
U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_1)}V(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t_1} \tag{29}
$$

و به قید $\langle f| \neq |i\rangle$ نیز توجه کنیم بدست می آوریم:

$$
M_{i,f} = \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'}\langle f|V(t')|i\rangle. \tag{30}
$$

که درآن

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}. \tag{31}$$

۴ مثال های کلی

دراین بخش بدون توجه به یک پدیده خاص چند مثال کلی را مطالعه می کنیم. این مثال های کلی نتایجی دربردارند که برای بسیاری مثال های خاص که بعداً خواهیم دید کاربرد دارند.

۱.۴ اختلال بی در رو

منظور از اختلال بی در رو آن است که تغییری بسیار آرام در هامیلتونی ایجاد شود و هامیلتونی به آهستگی از H_0 به $H_0 + V$ که درآن V ثابت است تغییر کند. منظور از تغییرآرام بزودی روشن خواهد شد.
می توانیم چنین تغییری را به شکل زیر نشان دهیم

$$H(t) = H_0 + e^{\frac{t}{\tau}} V. \tag{32}$$

بنابراین درلحظه $t = -\infty$، هامیلتونی برابر با H_0 و درلحظهٔ $t = 0$ هامیلتونی برابر است با $H_0 + V$. درچنین حالتی خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} M_{if}(0) &= \delta_{if} + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} dt' e^{i\frac{E_f - E_i}{\hbar}t'} \langle f|e^{\frac{t'}{\tau}} V|i\rangle \\ &= \delta_{if} + \frac{1}{i\hbar}\langle f|V|i\rangle \frac{1}{\frac{1}{\tau} + i\frac{E_f - E_i}{\hbar}} \end{aligned} \tag{33}$$

وقتی که تغییرات خیلی آرام باشد به این معناست که پارامتر τ بسیار بزرگ خواهد بود. هرگاه $\frac{E_f - E_i}{\hbar} << \tau$ باشد می توان عبارت بالا را به شکل زیر ساده کرد:

$$M_{if}(0) = \delta_{if} + \frac{1}{i\hbar}\frac{\langle f|V|i\rangle}{E_f - E_i}, \tag{34}$$

می دانیم که دامنه احتمال درواقع برابراست با $M_{if} = \langle f|\psi(0)\rangle$ که درآن $|\psi(0)\rangle$ تحول یافته حالت اولیه یعنی $|i\rangle$ بوده است. بنابراین داریم

$$|\psi(0)\rangle = |i\rangle - \sum_{f\neq i}\frac{|f\rangle\langle f|V|i\rangle}{E_f - E_i}. \tag{35}$$

این رابطه معنای خیلی ساده ای دارد و می گوید که حالت $|i\rangle$ به حالتِ متناظرش که یک ویژه حالت از H_0+V است تحول یافته است . به عبارت دیگر حالت هرگاه تغییرات یک هامیلتونی بسیارآرام باشد که معنای آرام بودن نیز با توجه به رابطه () آن است که مقیاس تغییرات زمانی τ در رابطه

$$\tau >> \frac{\hbar}{E_m - E_n}, \tag{36}$$

آنگاه یک ویژه حالتِ $|i(0)\rangle$ از $H(0)$ تحت تغییرات آهستهٔ $H(\tau)$ به $|i(\tau)\rangle$ تغییر می یابد.

۲.۴ اختلال گاووسی

حال فرض کنید که اختلال به صورت یک تابع گاووسی است، یعنی $V(t)=V_0 e^{-\frac{1}{2\tau^2}t^2}$. هم چنین برای سادگی زمان اولیه را $-\infty$ و زمان نهایی را ∞ می گیریم. دراین صورت داریم

$$\begin{aligned} M_{i,f} &= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{fi}t'-\frac{1}{2\tau^2}t'^2}dt'\langle f|V_0|i\rangle \\ &= \frac{\tau\sqrt{2\pi}}{i\hbar}\tau e^{-\frac{1}{2}\omega_{fi}^2\tau^2}\langle f|V_0|i\rangle, \end{aligned} \tag{37}$$

و درنتیجه

$$P_{i,f} = \frac{\tau^2 2\pi}{\hbar^2} e^{-\omega_{fi}^2\tau^2}|\langle f|V_0|i\rangle|^2. \tag{38}$$

دقت کنید که طرف راست این عبارت همانطور که باید، یک کمیت بدون دیمانسیون است. این رابطه چه چیزی را بیان می کند؟ مقیاس زمانی ای که درخود سیستم وجود دارد، عبارت است از $\frac{1}{|\omega_{fi}|}$. مقیاس زمانی که اختلال را تعریف می کند عبارت است از τ، بدین معنا که τ های بزرگ به معنای اختلال آرام و τ های کوچک به معنای اختلال ناگهانی است. این رابطه بیان می کند که هرگاه $\tau \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|}$، آنگاه احتمال $P_{i\longrightarrow f}$ بسیار کوچک است. بنابراین حالت $|i\rangle$ تنها به حالت هایی می تواند گذر کند که برای آنها شرط

$$|\omega_{fi}|\tau \lesssim 1$$

برقرارباشد.

تمرین: یک ذره اسپین ۱/۲ با ممان مغناطیسی μ در میدان مغناطیسی ثابتِ $B\hat{z}$ قرار داده شده و در حالت پایه خود قرار گرفته است. حال یک موج الکترو مغناطیسی که جهت میدان مغناطیسی آن در جهت x است به صورت $B(t)=B_0\hat{x}\cos\omega t$ به این ذره می تابد. احتمال گذار این ذره را به حالت برانگیخته‌اش به عنوان تابعی از زمان بدست آورید. فرض کنید که B_0 نسبت به B آنقدر کوچک است که استفاده از رتبه اول اختلال برای بدست آوردن نتایج خوب کافی است.

تمرین: یک ذره اسپین ۱/۲ با یک نوسانگر هارمونیک که فرکانس آن ω است در برهم کنش قرار دارند. در واقع این نوسانگر هارمونیک نشان دهنده‌ی فوتونی است با فرکانس ω که با این ذره برهم کنش الکترومغناطیسی انجام می دهد. هامیلتونی این سیستم به صورت زیراست:

$$H = B\sigma_z \otimes I + I \otimes \omega a^\dagger a + \lambda(t)(\sigma_+ \otimes a + \sigma_- \otimes a^\dagger) \equiv H_0 + V(t). \tag{39}$$

اگر در لحظه صفر ذره و فوتون در حالتِ $|E_0\rangle \otimes |n\rangle$ باشند، احتمال این را پیدا کنید که در زمان t ذره به حالت برانگیخته رفته باشد و یک فوتون از محیط جذب کره باشد؟ **توضیح:** وقتی که نوسانگر در حالتِ $|n\rangle$ است معنایش این است که n فوتون در محیط وجود دارد.

۳.۴ اختلال پریودیک

دربسیاری از موارد پتانسیل اختلال شکل پریودیک دارد . مهمترین مثال ازاین نوع برهم کنش اتم با تابش الکترومغناطیسی است که منجر به پدیده های گوناگون دراتم نظیر یونش، تحریک اتم از یک تراز پایین به تراز بالاتر و جذب تابش، تحریک اتم و گسیل تابش و نظایرآن می شود. درچنین مواردی پتانسیل اختلال شکل کلی زیر را دارد:

$$V(t) = V_0 e^{i\omega t} + V_0^\dagger e^{-i\omega t}. \tag{40}$$

برای چنین پتانسیل هایی دامنه احتمال برابر می شود با

$$M_{i,f}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\langle f|V_0|i\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'}dt' + \langle f|V_0^\dagger|i\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'}dt'\right]. \tag{41}$$

حال دقت می کنیم که زمان t یعنی زمانی که مابرای پرسیدن سوال خود برای گذار انتخاب می کنیم معمولاً زمانی است که اگرچه از نظر ماکروسکوپی بسیار کوچک باشد، از نظر میکروسکوپی و درقیاس با زمان های مشخصه سیستم کوانتومی مثل ω_{fi}^{-1} بسیاربزرگ است. در نتیجه با توجه به رابطه‌ی

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt = 2\pi\delta(\omega)$$

انتگرال های فوق به تابع دلتای دیراک بسیار نزدیک می شوند. بنابراین برای زمان های بزرگ احتمال گذار تنها برای حالت هایی وجود خواهد داشت که دریکی از شرایط زیر صدق کنند:

$$\omega_{fi} + \omega \approx 0 \longrightarrow E_f \approx E_i - \hbar\omega, \tag{42}$$

یا

$$\omega_{fi} - \omega \approx 0 \longrightarrow E_f \approx E_i + \hbar\omega. \tag{43}$$

این دو رابطه نشان می دهند که یک اختلال پریودیک با فرکانس ω تنها می تواند گذاربین لایه هایی را القا کند که تفاوت انرژی آنها برابر با $\hbar\omega$ باشد. در حالتِ 42 سیستم کوانتومی از حالتِ با انرژی E_i به حالت با انرژی $E_f = E_i - \hbar\omega$ سقوط می کند و انرژی $\hbar\omega = E_i - E_f$ را به محیط پس می دهد، به همین دلیل دامنه چنین گذاری را با $M^{emission}$ نشان می دهیم. درحالت دوم سیستم کوانتومی از حالت با انرژی E_i به حالتِ با انرژی $E_f = E_i + \hbar\omega$ صعود می کند و انرژی $\hbar\omega = E_f - E_i$ را از محیط می گیرد. به همین دلیل دامنه چنین گذاری را با $M^{absorbtion}$ نشان می دهیم. می توانیم دامنه و احتمال چنین گذارهایی را به صورت ساده تر بنویسیم. برای این کارکافی است دقت کنیم که درنوشتن دامنه $M^{emission}$ براحتی می توان از جمله دوم که بسیارکوچک است صرف نظر کرد. درنتیجه خواهیم داشت:

$$M_{i,f}^{emission}(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle f|V_0|i\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'}dt' \tag{44}$$

هم چنین در نوشتن $M^{absorbtion}$ می توان براحتی از جمله اول که بسیار کوچک است صرف نظرکرد. درنتیجه

$$M_{i,f}^{absorbtion}(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle f|V_0^\dagger|i\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'}dt' \tag{45}$$

برای نوشتن احتمالات گذار بازهم روابط ساده ترخواهند شد. برای این کار توجه می کنیم که

$$\begin{aligned} |\int_0^t e^{ixt'}dt'|^2 &= |\int_{-t/2}^{t/2} dt' e^{ixt'}|^2 = \int_{-t/2}^{t/2} dt' e^{ixt'} \int_{-t/2}^{t/2} dt" e^{-ixt"} \approx \int_{-t/2}^{t/2} dt' e^{ixt'} \int_{-\infty}^{\infty} dt" e^{-ixt"} \\ &= \int_{-t/2}^{t/2} dt' e^{ixt'}[2\pi\delta(x)] = \int_{-t/2}^{t/2} dt' 2\pi\delta(x) = 2\pi t\delta(x). \end{aligned} \tag{46}$$

بنابراین بعدازکمی ساده کردن می توانیم نرخ احتمال های گذار یعنی احتمال های گذار در واحد زمان را بدست آوریم که در اثر آن پارامترt حذف می شود و نهایتاً خواهیم داشت:

$$\Gamma_{i,f}^{emission} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|V_0|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i + \hbar\omega), \tag{47}$$

و

$$\Gamma_{i,f}^{absorbtion} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|V_0^\dagger|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \tag{48}$$

این روابطه به قانون طلایی فرمی $Fermi\ \ Golden\ \ Rule$ مشهور هستند. وجود تابع دلتا دراین روابط طرف نشان دهنده قانون بقای انرژی است. ضمناً نمی بایست از وجود چنین تابع منفردی در طرف راست نرخ احتمال نگران بود زیرا سرانجام آنچیزی که اهمیت فیزیکی دارد و محاسبه خواهد شد نرخ گذار به گروهی از حالت های به هم پیوسته نزدیک است ودرمحاسبه نهایی تابع دلتا با انتگرال گیری روی حالت های نهایی ازبین خواهد رفت. به طور دقیق تر آنچه که می خواهیم نرخ گذار به یک حالت بسیار منفرد مثل $\langle f|$ که انرژی مشخص E_f دارد نیست بلکه احتمال گذار به مجموعه‌ای از حالت های نزدیک به هم است که انرژی متوسط آنهانزدیک E_f است، زیرا آشکارساز ما هیچ وقت دارای قدرت تفکیک بی نهایت نیست که این حالت های نهایی نزدیک به هم را از یکدیگر تمیز دهد. دراین شرایط می بایست نرخ گذار را به همه حالت های نهایی باهم جمع کرد و این آن چیزی است که معنای فیزیکی و آزمایشگاهی دارد. درنتیجه آن چه که می خواهیم محاسبه کنیم نرخ های زیراست:

$$\Gamma_{i,\overline{f}}^{emission} = \frac{2\pi}{\hbar}\int df|\langle f|V_0|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i + \hbar\omega), \tag{49}$$

و

$$\Gamma_{i,\overline{f}}^{absorbtion} = \frac{2\pi}{\hbar}\int df|\langle f|V_0^\dagger|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \tag{50}$$

که در آن df به طور نمادین به معنای انتگرال گیری روی همه پارامترهایی است که حالت های نهایی را مشخص می کنند.

مثال: به عنوان مثال فرض کنید که حالت نهایی یک ذره‌ی آزاد است که با تکانه‌ی سه بعدی $\mathbf{p}$ مشخص می شود و ما آشکار ساز خود را که پهنای زاویه ای $d\Omega$ دارد در یک زاویه مشخص θ,ϕ قرار داده‌ایم. این آشکار ساز تمام ذراتی را که که دراین زاویه و با این پهنای زاویه‌ای پرتاب می شوند ثبت می کند مستقل از این که اندازه‌ی تکانه آنها یا انرژی آنها چقدراست. دراین صورت آنچه که ما به آن علاقه داریم این است که در واحد زمان احتمال این که ذره ای به آشکار ساز برسد چقدراست. برای بدست آوردن این نرخ احتمال می بایست روی اندازه تکانه‌ی حالت نهایی و نه روی جهت آن انتگرال بگیریم. بنابراین در این مسئله داریم $|\mathbf{p}\rangle = \langle f|$. انرژی این حالت برابراست با $E_f = \frac{p^2}{2m}$ و

$$df = d^3p = p^2dpd\Omega$$

که درآن فقط روی p و نه روی θ,ϕ انتگرال گرفته می شود. از رابطه زیر نیز استفاده می کنیم

$$\delta(E_f - E_0) = \delta(\frac{p^2}{2m} - E_0) = m\left[\delta(p - \sqrt{2mE_0}) + \delta(p + \sqrt{2mE_0})\right]. \tag{51}$$

که نشان می دهد تابع دلتای دوم برابرباصفراست و درنتیجه بدست می آوریم

$$\Gamma^{emission}_{i;\theta,\phi,d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle \mathbf{p}|V|i\rangle|^2_{p=p_0}\ mp_0 d\Omega, \tag{52}$$

که درآن

$$p_0 := \sqrt{2m(E_i - \hbar\omega)} \tag{53}$$

و

$$\Gamma^{absorbsion}_{i;\theta,\phi,d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle \mathbf{p}|V^\dagger|i\rangle|^2_{p=p_0}\ mp_0 d\Omega, \tag{54}$$

که درآن

$$p_0 := \sqrt{2m(E_i + \hbar\omega)}. \tag{55}$$

اینک آماده ایم که ازقانون طلایی فرمی برای پدیده های گوناگونی که منشأ آنها برهم کنش نور و ماده است استفاده کنیم.

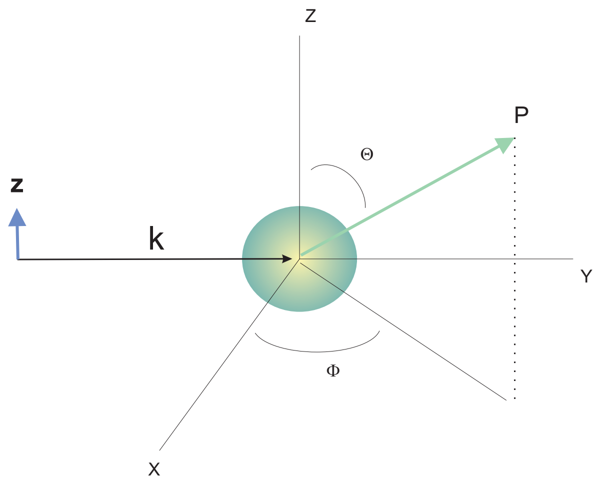
۵ یونیزاسیون اتم بوسیله تابش

دراین بخش می خواهیم یونش اتم بوسیله تابش را درچارچوب مکانیک کوانتومی مطالعه کنیم. می خواهیم محاسبه کنیم که احتمال یونش یک اتم وقتی که نوری بافرکانس ω وشدت I به آن می تابانیم چقدراست. این احتمال نهایتاً تعیین خواهد کرد که نوری بااین مشخصات وقتی که به یک گاز بتابد درصدی از اتم های آن را می تواند یونیزه کند. دراین جا بلافاصله این سوال مطرح می شود که نور چه مدتی به گازتابانده می شود. پاسخ شهودی این سوال کاملاً روشن است، زیراهرچه قدر که نور را مدت بیشتری بتابانیم می توانیم اتم های بیشتری را یونیزه کنیم. درواقع تعداد اتم های یونیزه شده مستقیماً متناسب با مدت زمانی است که نور به گازتابانده می شود. به همین دلیل انتظار داریم که احتمال یونیزه شدن اتم متناسب با زمان تابش نور باشد و کمیت بامعنایی را که ما باید حساب کنیم می بایست احتمال یونش در واحد زمان باشد.

نخست برای سادگی یونش یک اتم هیدروژن گونه را مطالعه می کنیم. درلحظه $t=0$ اتم در حالتِ $|i\rangle$ است که یکی از حالت های مقید با انرژی منفی است. هامیلتونی اتم درحضور میدان الکترومغناطیسی به شکل زیراست:

$$H = \frac{P^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\mathbf{P} \tag{56}$$

که درآن



شکل ۱: نوری با قطبش خطی که به یک اتم می تابد و الکترون آن را با تکانه نهایی p آزاد می کند.

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = A_0\mathbf{e}e^{i(\mathbf{k}\cdot r-\omega t)} + \ cc. \tag{57}$$

دراین رابطه منظور از cc مزدوج مختلط است. A_0 دامنه موج، $\mathbf{k}$ بردار انتشار، ω فرکانس نور و $\mathbf{e}=\mathbf{z}$ برداریکه ای است که جهت قطبش نور را نشان می دهد. برای نوری که به قطبش خطی دارد همواره می توان مانند آنچه که در شکل ۱ نشان داده شده است بردار انتشار را درراستای y و قطبش نور را در راستای z درنظرگرفت. می خواهیم بدانیم که درلحظه t احتمال آنکه الکترون از اتم کنده شده باشد چقدراست ؟ اگرچه الکترون وقتی که از اتم کنده می شود هنوز تحت تاثیر جاذبه کولومبی هسته باقیمانده است خیلی زود از هسته دورمی شود و بنابراین می توان باتقریب خوبی گفت که دریک حالت با تکانه مشخص دارد و آزاد شده است. بنابراین حالت نهایی الکترون را حالتِ $|\mathbf{p}\rangle$ می گیریم که نشان دهنده حالتی است با تکانهٔ $\mathbf{p}$.

در بخش پیشین و در مثالی که بیان کردیم تمام مقدمات لازم برای حل این مسئله را فراهم کرده‌ایم. بنابراین تنها کافی است که جایگزاری مناسبی در روابط مربوط به مثال بخش پیشین و سپس محاسبات ساده ای را انجام دهیم. جایگزینی هایی که می بایست در رابطه‌ی 58 انجام دهیم به شکل زیراست:

- $V_0 = A_0\frac{e}{2mc}\mathbf{z}\cdot\mathbf{P}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

- $|i\rangle = |\psi_{1,0,0}\rangle$ که در آن $|\psi_{1,0,0}\rangle$ حالت پایه اتم هیدروژن است.

- $E_i = E_0 = -13.6\ ev$ انرژی حالت پایه اتم هیدروژن

- $p_0 = \sqrt{2m(E_0+\hbar\omega)}$

با قراردادن این مقادیر در رابطه‌ی 58 بدست می آوریم:

$$\Gamma^{ionization}_{\theta,\phi,d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}(\frac{eA_0}{2mc})^2|\langle\mathbf{p}|\mathbf{z}\cdot\mathbf{P}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\psi_{1,0,0}i\rangle|^2_{p=p_0}\ mp_0 d\Omega, \quad (58)$$

تنهاکاری که باقیمانده است آن است که عنصرماتریسی $\mathcal{M} := \langle\mathbf{p}|\mathbf{z}\cdot\mathbf{P}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\psi_{1,0,0}\rangle$ را حساب کنیم.

$$\mathcal{M} = \langle p|e^{ik\cdot r}z\cdot P|\psi_{1,0,0}\rangle. \quad (59)$$

اگر نور مرئی و یا حتی نور مافوق بنفش به اتم بتابانیم می دانیم که طول موج نور بسیاربزرگ تر از ابعاد اتمی است، بنابراین می توانیم در عبارت فوق از تقریب

$$e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sim e^{\frac{a_0}{\lambda}} \sim 1 \quad (60)$$

استفاده کنیم. درنتیجه محاسبه عنصر ماتریسی $\mathcal{M}$ بسیار ساده می شود:

$$\mathcal{M} = \langle\mathbf{p}|\mathbf{z}\cdot\mathbf{P}|\psi_{1,0,0}\rangle = p_z\langle\mathbf{p}|\psi_{1,0,0}\rangle. \quad (61)$$

اگر حالت اولیه حالت پایه اتم هیدروژن باشد خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}|\psi_{1,0,0}\rangle &= \int\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\frac{1}{(\pi a_0)^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}d^3\mathbf{r}\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{(\pi a_0)^{\frac{3}{2}}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}e^{-\frac{r}{a_0}}r^2 dr d\cos\theta d\phi\end{aligned} \quad (62)$$

انتگرال فوق براحتی محاسبه می شود:

$$\int e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta-\frac{r}{a_0}}r^2 dr d\cos\theta d\phi = 2\pi\int r^2 dr e^{-\frac{r}{a_0}}\frac{e^{-\frac{ip}{\hbar}r}-e^{\frac{ip}{\hbar}r}}{\frac{ipr}{\hbar}} \quad (63)$$

باتوجه به اینکه

$$\int_0^\infty re^{-\lambda r}dr = \frac{1}{\lambda^2}$$

بدست می آوریم

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}|i\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{(\pi a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{2\pi\hbar}{ip}\left[\frac{1}{(\frac{ip}{\hbar}+\frac{1}{a_0})^2}-\frac{1}{(\frac{ip}{\hbar}-\frac{1}{a_0})^2}\right]\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{(\pi a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{-8\pi}{a_0}\frac{1}{(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p^2}{\hbar^2})^2}.\end{aligned} \quad (64)$$

درنتیجه بدست می آوریم:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{(\pi a_0)^{\frac{3}{2}}}(p_0)\cos\theta\frac{-8\pi}{a_0}\frac{1}{(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p^2}{\hbar^2})^2}. \tag{65}$$

باتوجه به رابطه‌ی ?? نرخ احتمال درواحد زمان خواهد شد:

$$\Gamma^{ionization}_{\theta,\phi,d\Omega} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{(\pi a_0)^3}\frac{2\pi}{\hbar}mp_0\left[\frac{eA_0}{mc}\frac{8\pi}{a_0}\frac{p_0\cos\theta}{(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p_0^2}{\hbar^2})^2}\right]^2 d\Omega, \tag{66}$$

عبارت بالا نرخ احتمال را برای یونیزه کردن اتم هیدروژن و گسیل الکترون به آشکارسازی که در زاویه‌ی (θ,ϕ) قرار دارد و اندازه دهانه آن زاویه $d\Omega$ دارد را نشان می دهد. برای آنکه نرخ احتمال یونیزاسیون اتم را پیداکنیم می بایست روی تمام زاویه ها انتگرال بگیریم. نرخ احتمال کل برابراست با:

$$R^{ionization} = \int\Gamma^{ionization}_{\theta,\phi,d\Omega}d\Omega = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{(\pi a_0)^3}\frac{2\pi}{\hbar}mp_0\left[\frac{eA_0}{mc}\frac{8\pi}{a_0}\frac{p_0}{(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p_0^2}{\hbar^2})^2}\right]^2\frac{4\pi}{3}. \tag{67}$$

دراین درس به مهمترین کاربرد نظریه اختلال وابسته به زمان یعنی به مسئله تابش اتم ها نپرداخته ایم. دلیل این امر آن است هنوز تصویر درستی از فوتون یعنی کوانتای تابش نداریم. در درس بعدی سعی می کنیم مفهوم فوتون و میدان کوانتومی الکترومغناطیسی را معرفی می کنیم و سپس در یک درس دیگر به مسئله تابش بازخواهیم گشت.

تمرین: در رابطه بالا ضریب عددی تناسب A_0^2 را برای اتم هیدروژن حساب کنید.