نظرية الاضطراب غير المعتمدة على الزمن Time independent Perturbation Theory

المستويات غير المنحلة

المقصود بالمستويات المنحلة ان هناك اكثر من دالة موجية واحدة لكل مستوي طاقة واحد على سبيل المثال مستوي الطاقة $n = 2$ في الذرة توجد فية اوربتالين هي اوربتال S فيه دالتين لكل حالة برم واربتال P يحتوي على ست حالات لكل واحدة دالة موجية وبذلك يكون عدد الدوال الموجية ثمانية في مستوي الطاقة $n = 2$ وهذا المقصود بالانحلال وسنبدأ بمستويات الطاقة ذات الدالة الواحدة اي غير المنحلة

لنفترض اننا نحاول ايجاد حل لمعادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن لبعض الجهود (ولنقل بئر جهد مربع غير متناهي ذو بعد واحد)

$$\hat{H}^0 \Phi_n^0 = E_n^0 \Phi_n^0 \qquad .... (3\text{-}1)$$

أذ ان Φ_n^0 تمثل مجموعه كاملة من الدوال الذاتية المعايرة والمتعامدة (Orthonormal)

$$< \Phi_n^0 | \Phi_m^0 | >= \delta_{nm}$$

اذا حدث اضطراب للجهد لسبب ما وتغيرت قيمته قليلا يصبح الهاملتونين كالتالي

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' = \hat{H}^0 + \lambda \hat{w} \qquad .... (3\text{-}2)$$

أذ ان $\hat{H}' = \lambda \hat{w}$ و $0 < \lambda < 1$

المسألة المطلوب حلها

$$\hat{H} \phi_n^0 = E_n \, \phi_n^0 \qquad ....(3\text{-}3)$$

سنوسع (Expand) الدالة الموجيه Ψ_n والطاقة E_n كمتسلسلة اسيه بدلالة λ

$$\Psi_n = \phi_n^0 + \lambda \Psi_n^1 + \lambda^2 \Psi_n^2 + \cdots$$

$$\mathrm{E}_n = E_n^0 + \lambda \mathrm{E}_n^1 + \lambda^2 \mathrm{E}_n^2 + \cdots$$

ولتصحيح الطاقة من الرتبة الاولى واعتبار ان $\lambda^0 = 1$

$$\mathrm{E}_n \cong E_n^0 + \lambda \mathrm{E}_n^1 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3\text{-}4)$$

نضع المعادلتين (3-2) و (3 -4) في المعادلة (3-3)

$$(\hat{H}^0 + \lambda\hat{w})\,\phi_n^0 = (E_n^0 + \lambda \mathrm{E}_n^1)\,\phi_n^0 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3\text{-}5)$$

نضرب طرفي المعادلة من جهة اليسار بالمرافق المعقد للدالة ϕ_n^0 ونجري عملية التكامل على كل الفضاء

$$< \phi_n^0 |\,(\hat{H}^0 + \lambda\hat{w})\,| \phi_n^0 > = < \phi_n^0 |\,(E_n^0 + \lambda \mathrm{E}_n^1)| \phi_n^0 >$$

$$< \phi_n^0 |\ \hat{H}^0\ | \phi_n^0 > + \lambda < \phi_n^0 | \hat{w}\ | \phi_n^0 > = < \phi_n^0\ | E_n^0 |\ \phi_n^0 > + \lambda < \phi_n^0 |\ \mathrm{E}_n^1 | \phi_n^0 >$$

الحد الاول على طرفي المساواة متساويان وبالتالي يبقى لدينا

$$< \phi_n^0 | \hat{w}\ | \phi_n^0 > = < \phi_n^0 |\ \mathrm{E}_n^1 | \phi_n^0 >$$

$$< \phi_n^0 | \hat{w}\ | \phi_n^0 > = \mathrm{E}_n^1\ < \phi_n^0\ | \phi_n^0\ >$$

$$\mathrm{E}_n^1 = \frac{<\phi_n^0 | \hat{w}\ | \phi_n^0>}{<\phi_n^0\ | \phi_n^0 >} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (3\text{-}6)$$

المعادلة (3-6) تمثل التصحيح الاول لمستوي الطاقة E_n^0 واذا كانت الدالة ϕ_n^0 دالة معايرة فان

$$\mathrm{E}_n^1 = < \phi_n^0 | \hat{w}\ | \phi_n^0 > \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (3\text{-}7)$$

المعادلة (7 -3) تمثل مصفوفة قطريه (diagonal) وتكتب كالتالي

$$\mathrm{E}_n^1 = \hat{w}_{n\,,n} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (3\text{-}8)$$

<u>مثال (3-1):</u>

وضع جسيم $\Psi_n^0(x)$ في بئر جهد غير متناهي عرضه a في مركزه نتوء على شكل دالة دلتا $\alpha\delta(x-\frac{a}{2})$ وان α مقدار ثابت . جد التصحيح الاول في الطاقة المسموح بها ووضح لماذا لا تضطرب الطاقات عندما تكون n عدد زوجي ؟

الحل:

الدالة الموجية للجسيم في بئر الجهد هي $\Psi_n^0(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}x)$ والتصحيح الاول يحسب من العلاقة (3-7)

$$E_n^1 = <\Psi_n^0(x)\left|\alpha\delta(x-\frac{a}{2})\right|\Psi_n^0(x)>$$

$$=\frac{2\alpha}{a}\int_0^a sin^2(\frac{n\pi}{a}x)\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)dx$$

$$=\frac{2\alpha}{a}\,sin^2\left(\frac{n\pi}{a}.\frac{a}{2}\right)$$

$$E_n^1=\frac{2\alpha}{a}\,sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)=\begin{cases}0 & if\ n\ is\ even\\ \frac{2\alpha}{a} & if\ n\ is\ odd\end{cases}$$

عندما تكون n زوجية تكون الدالة الموجية مساوية للصفر في موقع النتوء $x=\frac{a}{2}$ لذلك لا يمكن التحسس ب H' وعندها لا تضطرب.

<u>مثال (3- 2):</u>

الدالة الموجية غير المضطربة لجسيم في بئر غير متناهي هي $\Psi_n^0(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}x)$. افترض ان اضطرابا مقداره λx قد وضع امام حركة الجسيم . جد التصحيح الاول في طاقة الجسيم؟

الحل:

هنا لدينا $\widehat{w} = x$ ونستخدم المعادلة (8) لايجاد التصحيح الاول

$$\widehat{w}_{n,n} =< \Psi_n^0(x)|x\,|\Psi_n^0(x) >$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a x\,sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

ولاجراء التكامل نستخدم $sin^2(\vartheta) = \frac{1-\cos(2\vartheta)}{2}$

$$\widehat{w}_{n,n} = \frac{a}{2}$$

وبذلك تكون الطاقة مصححة للرتبة الاولى $E_n = E_n^0 + \lambda w_{n,n}$

$$E_n = \frac{(\pi\hbar n)^2}{2ma^2} + \lambda\frac{a}{2}$$

مثال (3-3):

افترض لديك متذبذب توافقي ذو بعد واحد دالته الموجية $e^{-\alpha x^2/2}$ $\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$ أذ ان $\alpha = \frac{mw}{\hbar}$ وطاقته الكامنه $U(x) = \frac{1}{2}(1+\mathcal{E})kx^2$ ، أذ ان $k, \mathcal{E}$ ثوابت . احسب القيمة المتوقعه للطاقة بمعاملة الحد $\frac{1}{2}k\mathcal{E}x^2$ كاضطراب صغير ($\mathcal{E}$ كمية صغيرة ليس لها ابعاد)

الحل:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}(1+\mathcal{E})kx^2$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}k\mathcal{E}x^2$$

$$H = H^0 + \frac{1}{2}k\mathcal{E}x^2$$

$$H = H^0 + H'$$

الطاقة مصححة هي $E = E^0 + < \Psi^0(x)|H'|\Psi^0(x) >$ بطاقة $E^0 = \frac{1}{2}\hbar w$

والان نجد $w_{0,0}$

$$w_{0,0} =< \Psi^0(x)|H'|\Psi^0(x) >$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right) \left(\frac{1}{2}k\epsilon x^2\right) \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right) dx$$

$$= \frac{1}{2}k\epsilon \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2)\, dx$$

$$= \frac{1}{2}k\epsilon \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} 2\int_{0}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2)\, dx$$

نستخدم صيغة التكامل الخاصة بدالة كاما $\Gamma(n) = 2\int_0^\infty x^{2n-1} \exp(-x^2)\, dx$

في تكاملنا هنا $n = 3/2$ وعليه

$$w_{0,0} = \frac{1}{2}k\epsilon \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{4}k\epsilon\frac{1}{\alpha}$$

$$w_{0,0} = \frac{1}{4}\epsilon\hbar w \quad , k = mw^2$$

$$E = E^0 + \frac{1}{4}\epsilon\hbar w$$

مثال: (3- 4)

جد صيغة مضبوطة للقيمة المتوقعه للطاقة للمتذبذب التوافقي ذو البعد الواحد الذي دالته الموجية تساوي $\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2}$ الذي طاقته الكامنة $U(x) = \frac{1}{2}(1+\mathcal{E})kx^2$ أذ ان $k, \mathcal{E}$ ثوابت .

الحل:

الجهد القياسي للمتذبذب التوافقي $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$ وطاقته الذاتية $E_n = (\mathrm{n} + \frac{1}{2})\hbar \mathrm{w}$ وان

$n = 0,1,2, \dots \dots$ وكذلك $w = \sqrt{\frac{k}{m}}$

لنفرض ان $(1+\mathcal{E})k = k'$ فيكون الجهد $U'(x) = \frac{1}{2}k'x^2$ عليه

$E'_n = (n + \frac{1}{2})\hbar w'$ اذ ان $w' = \sqrt{\frac{k'}{m}}$ وبالتالي $w' = \sqrt{(1+\mathcal{E})k/m}$ ، $w' = \sqrt{(1+\mathcal{E})}\, w$

بما ان $\mathcal{E}$ كية صغيرة فاننا يمكن ان نستخدم المفكوك التالي (سلسلة مفكوك ماكلورين)

$$(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!}x^3 + \cdots , x \ll 1$$

$$(1+\epsilon)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}\epsilon - \frac{1}{8}\epsilon^2 + \cdots$$

لذلك $E'_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar w'$

$$E'_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar(1+\mathcal{E})^{1/2}w \;=\; E_n + \frac{1}{2}\mathcal{E}E_n - \frac{1}{8}\mathcal{E}^2E_n + \cdots$$

التصحيح الاول للدالة الذاتية **First order correction to the eigenstate**

$$H^0\Phi_l^0 = E_l^0\Phi_l^0 \qquad \dots\dots\dots\dots\dots\dots \text{(3-9)}$$

$$H\Psi_l = E_l\Psi_l \qquad ....(3\text{-}10)$$

$$H = H^0 + \lambda w \qquad ....(3\text{-}11)$$

$$\Psi_l = \Phi_l^0 + \lambda\Psi_l^1 \qquad ....(3\text{-}12)$$

$$E_l = E_l^0 + \lambda E_l^1 + \lambda^2 E_l^2 \qquad ....(3\text{-}13)$$

نضع العلاقات (3-11) ، (3-12) و (3-13) في (3-10)

$$(H^0 + \lambda w)(\Phi_l^0 + \lambda\Psi_l^1) = (\ E_l^0 + \lambda E_l^1 + \lambda^2 E_l^2)(\Phi_l^0 + \lambda\Psi_l^1) \qquad ....(3\text{-}14)$$

نفتح الاقواس في كل جهة من المساواة ومعاملات λ على الطرفين متساوية نحصل على

معاملات λ^0 :
$$H^0\Phi_l^0 = E_l^0\Phi_l^0 \qquad ....(3\text{-}15)$$

معاملات λ^1 :
$$H^0\Psi_l^1 + \hat{w}\Phi_l^0 = \ E_l^1\Phi_l^0 + E_l^0\Psi_l^1 \qquad ....(3\text{-}16)$$

معاملات λ^2 :
$$w\Psi_l^1 = E_l^1\ \Psi_l^1 + E_l^2\Phi_l^0 \qquad ....(3\text{-}17)$$

وبما اننا نحتاج المرتبة الثانية فقط لذلك الحدود التي فيها λ^3 واكثر نهملها ، الدالة الموجية غير المضطربة تشكل مجموعة كاملة لذلك يمكن كتابة Ψ_l^1 (مثل اي دالة اخرى) كعلاقة خطية من هذه المجموعة

$$\Psi_l^1 = \sum_{n\neq l} a_n\ \Phi_n^0 \qquad ....(3\text{-}18)$$

باستخدام المعادلة (3-16) وبمساعدة العلاقة (3-18) نحصل على

$$H^0\sum_{n\neq l} a_n\,\Phi_n^0 + w\,\Phi_l^0 = \ E_l^1\Phi_l^0 + E_l^0\sum_{n\neq l} a_n\,\Phi_n^0$$

نضرب الطرفين من جهة اليسار بالدالة $(\Phi_m^0)^*$ ونجري عملية التكامل

$$< \Phi_m^0 |H| \sum_{n\neq l} a_n \ \Phi_n^0 > + < \Phi_m^0 |w| \ \Phi_l^0 > = < \Phi_m^0 \left| E_l^1 \right| \ \Phi_l^0 > +$$

$$E_l^0 \ \sum_{n\neq l} a_n < \Phi_m^0 \mid \Phi_n^0 >$$

$$\sum_{n\neq l} a_n \ E_m^0 \ < \Phi_m^0 \mid \Phi_n^0 > + < \Phi_m^0 |w| \ \Phi_l^0 > = \ E_l^1 < \Phi_m^0 \mid \Phi_n^0 > + E_l^0 \ \sum_{n\neq l} a_n < \Phi_m^0 \mid \Phi_n^0 >$$

$$\sum_{n\neq l} a_n \ E_m^0 \ \delta_{m,n} + < \Phi_m^0 |w| \ \Phi_l^0 > = E_l^1 \ \delta_{m,l} + E_l^0 \sum_{n\neq l} a_n \delta_{m,n}$$

$$a_m E_m^0 + w_{m,l} = E_l^0 \ a_m \qquad (m \neq l)$$

$$a_m = \frac{w_{m,l}}{E_l^0 - E_m^0} \qquad \text{.........................} \ (3\text{-}19)$$

ولنتذكر انه $m = n$ نعوض في العلاقة (3-18) نحصل على

$$\Psi_l^1 = \sum_{n\neq l} \ \frac{w_{n,l}}{E_l^0 - E_n^0} \ \Phi_n^0 \qquad \text{...........................} \ (3\text{-}20)$$

نستخدم المعادلة (3-20) في المعادلة (3-12) نحصل على

$$\Psi_l = \Phi_l^0 + \lambda \sum_{n\neq l} \ \frac{w_{n,l}}{E_l^0 - E_n^0} \ \Phi_n^0 \qquad \text{......................} \ (3\text{-}21)$$

من اجل تطبيق المعادلة (3-21) يجب ان تتوقف السلسة عند حد معين (تلتم) converge