نظرية الاضطراب المنحلة (للنظم المنحلة)   Degenerate perturbation theory

كنتيجة لتماثل خاص ، عندما يكون النظام تحت تاثير قوى مركزيه فان الدوال المغناطيسية الثانويه للزخم الزاوي لها جميعا نفس الطاقة بسبب التماثل الدوراني اي وجود اكثر من دالة واحدة لها نفس الطاقة لذلك تسمى منحلة.

نظرية الاضطراب لمستويين متقاربين   Perturbation theory when two levels are close

يتضح من العلاقتين (13) و (23) ان مقدار التصحيح بالدالة والطاقة يكون كبيرا جدا عند تقارب المستويات بسبب المقام في المعادلتين لذلك سنفترض ان نظاما مكون من مستووي طاقة E_1^0 E_2^0 تقابلهما دالتين موجيتين هما ϕ_1 و ϕ_2 وعليه يمكننا ان نكتب الدالة الكلية من مجموعها

$$\Psi = a\phi_1 + b\phi_2$$

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda\hat{w} \quad , \ \lambda = 1$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \ \Rightarrow (\hat{H} - E)\Psi = 0$$

$$(\hat{H} - E)(a\phi_1 + b\phi_2) \qquad \text{-------------------- (3-32)}$$

نضرب المعادلة من جهة اليسار بالدالة ϕ_1^* ونجري عملية التكامل

$$a\langle\phi_1|\hat{H}|\phi_1\rangle - a\langle\phi_1|E|\phi_1\rangle + b\langle\phi_1|\hat{H}|\phi_2\rangle - b\langle\phi_1|E|\phi_2\rangle = 0$$

$$aH_{11} - aE + bH_{12} = 0 \qquad \text{--------------------- (3-33)}$$

نضرب المعادلة (3-32) من جهة اليسار بالدالة ϕ_2^* نجري عملية التكامل

$$aH_{21} + bH_{22} - bE = 0 \qquad \text{-------------------- (3-34)}$$

نحل المعادلتين (33 -3) (3-34) انيا نحصل على

$$E = E_{1,2} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \qquad \text{----- (3-35)}$$

اذا تحققت حالة امكانية تطبيق نظرية الاضطراب فان

$$|H_{11} - H_{22}| \rangle\rangle |H_{12}| \qquad \text{---------------------- (3-36)}$$

باستخدام المعادلة (3-36) في العلاقة (3-35) نحصل على

$$E_1 = H_{11} + \frac{|H_{12}|^2}{H_{11} - H_{22}}$$

نستخدم $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{w}$ يكون لدينا

$$E_1 = E_1^0 + \hat{w}_{11} + \frac{|\hat{w}_{11}|^2}{E_1^0 + \hat{w}_{11} - (E_2^0 + \hat{w}_{22})} \quad \text{------------------------(3-37)}$$

كذلك للطاقة E_2

$$E_2 = E_2^0 + \hat{w}_{22} + \frac{|\hat{w}_{12}|^2}{E_2^0 + \hat{w}_{22} - (E_1^0 + \hat{w}_{11})} \quad \text{---------------------- (3-38)}$$

العلاقة (3-37) والعلاقة (3-38) تشبه العلاقة (3-31) للتصحيح الثاني ، من المعادلة (3-33) نجد ان

$$\left(\frac{a}{b}\right) = \frac{H_{12}}{E - H_{11}} \quad \text{---------------------- (3-39)}$$

نستخدم المعادلة (3-35) للطاقة E_1 ونستخدم $\tan(\vartheta) = \dfrac{2H_{12}}{H_{11} - H_{22}}$ لذلك يمكن ان نكتب

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{H_{12}}{\frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) + \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})\sqrt{1 + \frac{|2H_{12}|^2}{(H_{11} - H_{22})^2}} - H_{11}}$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{H_{12}}{-\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) + \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})\sqrt{1 + \frac{|2H_{12}|^2}{(H_{11} - H_{22})^2}}}$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{H_{12}}{-\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) + \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})\sqrt{1 + \tan^2(\vartheta)}}$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{2H_{12}}{-(H_{11} - H_{22}) + (H_{11} - H_{22})\frac{1}{\cos(\vartheta)}}$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{1}{-\frac{(H_{11} - H_{22})}{2H_1} + \frac{(H_{11} - H_{22})}{2H_{12}}\frac{1}{\cos(\vartheta)}}$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{1}{-\frac{1}{\tan(\vartheta)} + \frac{1}{\tan(\vartheta)}\frac{1}{\cos(\vartheta)}}$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{1}{-\frac{\cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)} + \frac{\cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)}\frac{1}{\cos(\vartheta)}} = \frac{\sin(\vartheta)}{1-\cos(\vartheta)}$$

نستفاد من المتطابقة $\sin(2\vartheta) = 2\sin(\vartheta)\cos(\vartheta)$ $\quad \cos(2\vartheta) = 2\cos^2(\vartheta) - 1$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \frac{\sin(\vartheta)}{1-\cos(\vartheta)} = \frac{2\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\cos(\frac{1}{2}\vartheta)}{1-\left\{2\cos^2(\frac{1}{2}\vartheta)-1\right\}} = \cot(\tfrac{1}{2}\vartheta)$$

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \cot(\tfrac{1}{2}\vartheta) \qquad \text{----------------} \ (3\text{-}40)$$

اذا استخدما في العلاقة (3-39) قيمة الطاقة $E = E_2$ من العلاقة (3-35) نحصل على

$$\left(\frac{a}{b}\right)_2 = -\tan(\tfrac{1}{2}\vartheta) \qquad \text{-----------------} \ (3\text{-}41)$$

الدوال المعايرة المقابلة للطاقات $E_1\ , \mathrm{E}_2$ من النوع

$$\Psi_1 = \phi_1\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta) + \phi_2\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta)$$

$$\Psi_2 = -\phi_1\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta) + \phi_2\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta)$$

هذه النتيجة تبقى صحيحه حتى اذا انطبقى المستويين لذلك من الممكن تعميم هذه النتيجة لمستوي له g من درجات الانحلال.

$$\Psi \approx b_1\phi_1 + b_2\phi_2 + ... + b_g\phi_g$$

$$= \sum_{k=1}^{g} b_k\phi_k \qquad \text{------------------------} \ (3\text{-}42)$$

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{w} \quad \text{with} \ \lambda = 1 \qquad \text{----------------------} \ (3\text{-}43)$$

نستخدم العلاقتين (3-41) والعلاقة (3-43) في العلاقة (3-32)

$$\hat{H}\left(\sum_{k=1}^{g} b_k\phi_k\right) = \left(E^0 + E^1\right)\left(\sum_{k=1}^{g} b_k\phi_k\right) \qquad \text{---------------------} \ (3\text{-}44)$$

يمكن كتابة هذه المعادلة على شكل مصفوفة

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & \mathrm{H}_{12} & \text{------}\mathrm{H}_{1g} \\ H_{21} & \mathrm{H}_{22} & \text{------}\mathrm{H}_{2g} \\ \vdots & \vdots & \ddots\text{.------}\vdots \\ \vdots & \vdots \cdots & \ddots \quad ....\vdots \\ H_{g1}\ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots H_{gg} \end{pmatrix} \qquad \text{------------------ (3-45)}$$

$$\text{Det. } \left(H - IE^{1}\right) = 0 \qquad \text{-------------------- (3-46)}$$

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E^{1} & \mathrm{H}_{12} & .\cdots\cdots\cdots & \mathrm{H}_{1g} \\ H_{21} & \mathrm{H}_{22} - E^{1} & \cdots\cdots\cdots & \mathrm{H}_{2g} \\ \vdots \cdots & \ddots & \cdots\cdots\cdots & \vdots \\ \vdots \cdots\cdots & & \ddots \quad \cdots\cdots\cdots & \vdots \\ H_{g1} \cdots\cdots\cdots & & & \mathrm{H}_{gg} - E^{1} \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{------------------- (3-47)}$$

بحل المعادلة (3-47) لقيمة $g = 2$ نحصل على المعادلة (3-35)،

يمكن كتابة العلاقة (3-47) بالشكل:

$$\sum_{k=1}^{g} \left(H_{mk} - E^{1}\delta_{mk}\right) b_{mk} = 0$$

وبدلالة المؤثر $\hat{w}$

$$\hat{w} = \begin{pmatrix} w_{11} & \mathrm{w}_{12} & \text{------}\mathrm{w}_{1g} \\ w_{21} & \mathrm{w}_{22} & \text{------}\mathrm{w}_{2g} \\ \vdots & \vdots & \ddots\text{.------}\vdots \\ \vdots & \vdots \cdots & \ddots \quad ....\vdots \\ w_{g1}\ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots w_{gg} \end{pmatrix}$$

$$\text{Det. } \left(\hat{w} - IE^{1}\right) = 0$$

أذ ان I يمثل المصفوفة الواحدية.

مثال (8-3):

أفترض ان مجالا مغناطيسيا شدته $\vec{B}$ يؤثر على ذرة الهيدروجين في اتجاه z فيحدث فيها اضطرابا وأعتبر ان الذرة كانت في الحالة P . جد التصحيح الاول بالطاقة ؟

الهاملتون للذرة المستقره هو
$$H^0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

$$\hat{H} = H^0 + \hat{H}'$$

حالة P تحتوي على زخم مداري $l = 1$ وعدد كمي مغناطيسي $m_l = -1, 0, 1$

الدالة الموجية لذرة الهيدروجين هي
$$\Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$$

$$\Psi_{n,l,m_l} = \Psi_{n,1,0} \quad , \ \Psi n,1,-1 \quad , \ \Psi_{n,1,1}$$

$$\Psi_{np} = b_1 |2,1,1\rangle + b_2 |n,1,0\rangle + b_3 |2,1,-1\rangle$$

$$\hat{w} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \end{pmatrix}$$

$$\text{Det. } [\hat{w} - IE^1] = 0$$

$\Psi_{n,l,m}$ هي كذلك دالة ذاتية للمؤثر L_z اي ان

$$L_z \Psi_{n,l,m_l} = m_l \hbar \Psi_{n,l,m_l}$$

$$\therefore \quad \left\langle \Psi_{n,l,m_l} \left| \hat{L}_z \right| \Psi_{n,l,m_l} \right\rangle = m_l \hbar \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l}$$

وبالتالي فمصفوفة المؤثر L_z هي مصفوفة قطرية

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$E_l^1 = m_l \hbar g \mu_B B$$

$$E_l^1 = \begin{cases} \hbar g \mu_B B \\ 0 \\ -\hbar g \mu_B B \end{cases}$$

أذ ان μ_B هو مغنيط بور و g هو عامل g للالكترون .

مثال (9):

تأثير زيمان الاعتيادي في ذرة الهيدروجين :The normal Zeeman effect on the hydrogen atom

افترض ان ذرة الهيدروجين تحت تأثير مجال مغناطيسي موجه باتجاه x والذرة كانت في الحالة المتهيجة p .

جد التصحيح الاول بالطاقة ؟

$$H^0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

$$\hat{H} = H^0 + \hat{H}'$$

$$\Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$$

$$\Psi_{n,l,m_l} = \Psi_{n,1,0} \quad , \quad \Psi n,1,-1 \quad , \ \Psi_{n,1,1}$$

$$\Psi_{np} = b_1 |2,1,1\rangle + b_2 |n,1,0\rangle + b_3 |2,1,-1\rangle$$

$$\vec{L} \cdot \vec{B} = L_X B$$

$$\hat{w} = g\mu_B B L_X$$

$$\text{Det. } [\hat{w} - IE^1] = 0$$

$$\hat{w} = g\mu_B B \begin{vmatrix} (L_X)_{11} & (\mathrm{L_X})_{12} & (\mathrm{L_X})_{13} \\ (L_X)_{21} & (\mathrm{L_X})_{22} & (\mathrm{L_X})_{23} \\ (L_X)_{31} & (\mathrm{L_X})_{32} & (\mathrm{L_X})_{33} \end{vmatrix}$$

$$\hat{L}_X = -\frac{\hbar}{i}\left(\sin(\varphi)\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot(\vartheta)\cos(\phi)\frac{\partial}{\phi} \right)$$

$$(L_X)_{21} = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} (Y_1^0)^* \hat{L}_X Y_1^1 \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

$$(L_X)_{12} = (L_X)_{21} = (L_X)_{23} = (L_X)_{32}$$

تكون مساوية للصفرxوكل مركبات الزخم الاخرى باتجاه

$$w = g\mu_B \hbar B \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Det. } [\hat{w} - IE^1] = 0$$

$$0 = g\mu_B \hbar B \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix}$$

$$(-E^1)^3 - 2(-E^1)d^2 = 0$$

أذ ان $d = \dfrac{g\mu_B B\hbar}{\sqrt{2}}$

$$(E^1)_1 = \sqrt{2}d = g\mu_B B\hbar$$
$$(E^1)_2 = 0$$
$$(E^1)_3 = -\sqrt{2}d = -g\mu_B B\hbar$$

مثال (10):

تفاعل البرم والمدار في ذرة الهيدروجين ينتج من العزم المبذول على عزم ثنائي القطب المغناطيسي للالكتون الناتج من المجال المغناطيسي للبروتون في محور الالكترون والطاقة الاضافية الناتجة من التفاعل هي

$$\hat{H}'_{so} = \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\vec{S}\bullet\vec{L}$$

وهذا المؤثر يتبادل مع مربع الزخم L^2 وكذلك مع S^2 ومع الزخم الزاوي الكلي J المعرف كالتالي

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$J^2 = (\vec{L}+\vec{S}) \bullet (\vec{L}+\vec{S}) = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \bullet \vec{S}$$

$$\vec{L} \bullet \vec{S} = \vec{S} \bullet \vec{L} = \frac{1}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)$$

وعليه فالقيمة الذاتية الى $\vec{S} \bullet \vec{L}$ هي

$$\left\langle \vec{S} \bullet \vec{L} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - S(s+1)\right)$$

والان علينا ايجاد القيمه المتوقعه $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ والتي تحسب لتعطي

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a^3}$$

$$E_{SO}^1 = \left\langle H'_{SO} \right\rangle = \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \left\langle \vec{S} \bullet \vec{L} \right\rangle$$

$$E_{SO}^1 = \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2}\frac{(\hbar^2/2)[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3}$$

وبدلالة E_n تكون

$$E_{So}^1 = \left(\frac{E_n^2}{mc^2}\right)\frac{n[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)}$$