مکانیک کوانتومی ۲

نظریه اختلال وابسته به زمان

Time-Dependent Perturbation Theory

سعید عابدین‌پور

References:

- Sections 5.5 & 5.7, J. J. Sakurai and J. Napolitano, “Modern Quantum Mechanics”
- Section 10.2, G. Auletta, M. Fortunato, and G. Parisi, “Quantum Mechanics”

مرور آنچه قبلا دیده ایم:

- هامیلتونی وابسته به زمان

$$H = H_0 + V(t)$$

- ویژه مقادیر و حالتهای قسمت مستقل از زمان را میشناسیم:

$$H_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$$

$$\text{if} \quad V(t) = 0\,; \quad \rightarrow \quad |n, t\rangle = e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |n\rangle$$

- تحول زمانی حالت دلخواه $|\psi\rangle$ تحت هامیلتونی H:

$$|\psi, t = 0\rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle$$

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t)\, e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |n\rangle$$

- با قرار دادن بسط بالا در معادله شرودینگر $i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$:

$$\dot{c}_n(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_m e^{-i\omega_{mn}t} c_m(t) V_{mn}(t)$$

$$\omega_{mn} = (\varepsilon_m - \varepsilon_n)/\hbar$$

$$V_{mn}(t) = \langle m | V(t) | n\rangle$$

- حل دقیق این معادله دیفرانسیل جز در معدود موارد خیلی خاص، ممکن نیست (مثال سیستم دو ترازه که در کلاس حل شد را ببینید)

اختلال وابسته به زمان

- بسط ضریب بسط $c_n(t)$ برحسب توانهای پتانسیل اختلال V

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots$$

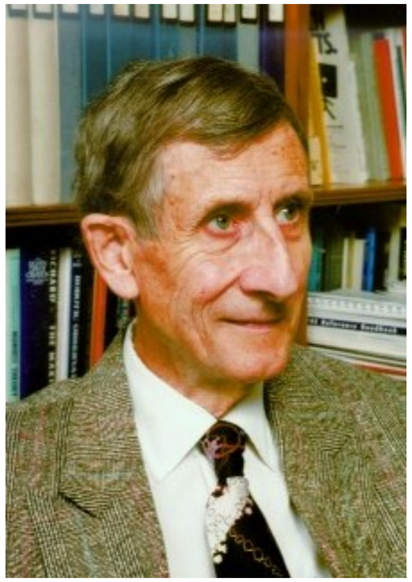
- اگر فرض کنیم جمله وابسته به زمان در t=0 روشن شود و برای t<0 سیستم در یکی از ویژه حالتها (مثلا حالت i-ام) هامیلتونی مختل نشده H_0 باشد، میتوان بدست آورد:

$$c_n^{(0)} = \delta_{n,i}$$

$$c_n^{(1)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t' e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t')$$

$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_0^t \mathrm{d}t' e^{i\omega_{nm}t'} V_{nm}(t') \int_0^{t'} \mathrm{d}t'' e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t'')$$

.
.
.



Freeman Dyson
(1923-2020)

- **احتمال گذار: احتمال اینکه سیستم در زمان t در حالت n (متفاوت از حالت اولیه i) باشد:**

$$P_{i\to n}(t) = \left| c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots \right|^2$$

لزوما بهنجار نیست

مثال: اختلال ثابت

- فرض کنید که پتانسیل ثابت V در لحظه t=0 روشن شود:

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{for } t < 0 \\ V & \text{for } t \geq 0 \end{cases}$$

V مستقل از زمان است ولی میتواند تابعی از عملگرهایی همچون مکان، تکانه، اسپین و .. باشد.

$$|\psi, t=0\rangle = |i\rangle$$

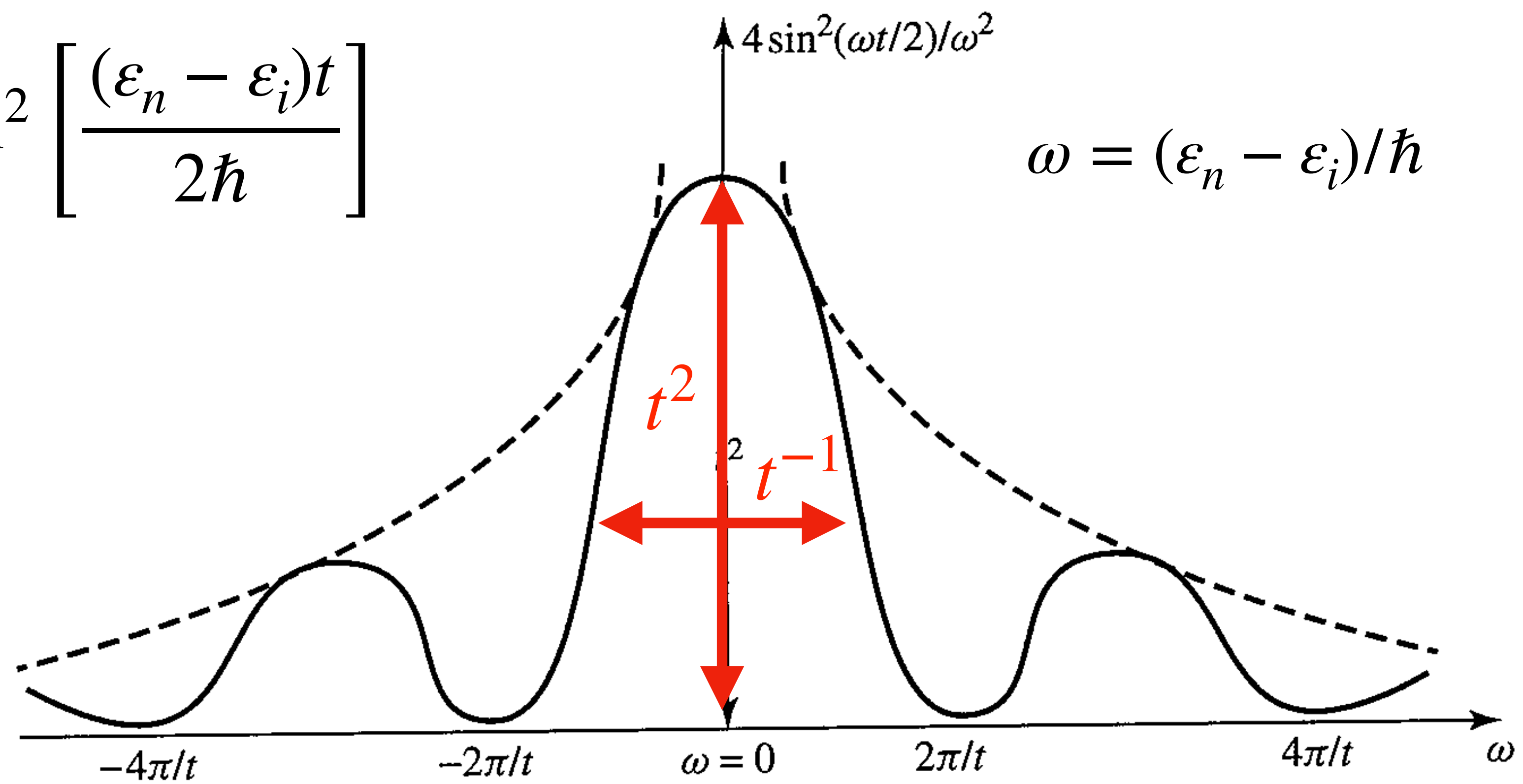
$$c_n^{(0)} = \delta_{n,i}$$

- مرتبه اول اختلال:

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t \mathrm{d}t' e^{i\omega_{ni}t'} = \frac{V_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} \left(1 - e^{i\omega_{ni}t}\right)$$

$$P_{i\to n}(t) \approx \left| c_n^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{4\,|V_{ni}|^2}{|\varepsilon_n - \varepsilon_i|^2} \sin^2\left[\frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_i)t}{2\hbar}\right]$$

$$\omega = (\varepsilon_n - \varepsilon_i)/\hbar$$



- احتمال گذار به حالتهایی با انرژیی متفاوت از انرژی حالت اولیه در زمانهای ابتدایی وجود دارد، ولی با گذشت زمان تنها حالتهای $\omega \approx 0$ می‌توانند اشغال شوند.

$$\Delta t \times \Delta E \sim \hbar$$

● رفتار در زمانهای طولانی

$$P_{i\to n}(t) \approx \left|c_n^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{4\,|V_{ni}|^2}{|\varepsilon_n - \varepsilon_i|^2}\sin^2\left[\frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_i)t}{2\hbar}\right]$$

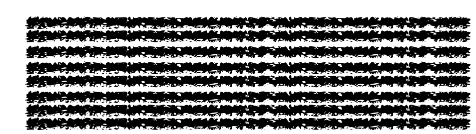
$$\lim_{\alpha\to\infty}\frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \pi\delta(x)$$

- تابع دلتا، بقاء انرژی را تضمین می‌کند ولی حضور تابع دلتا برای طیف انرژی گسسته غیر منطقی است. این حالت حدی در حالتی که طیف حالت اولیه یا نهایی (و یا هردو آنها) پیوسته باشد بعنوان چگالی احتمال قابل پذیرش است.

$$P_{i\to n}(t\to\infty) = \frac{2\pi}{\hbar}\,|V_{ni}|^2\, t\,\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_i)$$

● طیف حالتهای نهایی پیوسته

E+dE و E تعداد حالتها در بازه انرژی بین: $\mathrm{d}N = \rho(E)\,\mathrm{d}E$



ε_n

$\rho(E)$: چگالی حالتها

$$P_{i\to[n]}(t\to\infty) = \sum_{n,\varepsilon_n=\varepsilon_i} |c_n^{(1)}| = \frac{2\pi t}{\hbar}\int \mathrm{d}E\,\rho(E)\,|V_{ni}|^2\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_i) = \frac{2\pi t}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\rho(\varepsilon_n)\big|_{\varepsilon_n=\varepsilon_i}$$

● قانون طلایی فرمی

نرخ گذار

$$\Gamma_{i\to[n]} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\rho(\varepsilon_i)$$

$$\Gamma_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_i)$$

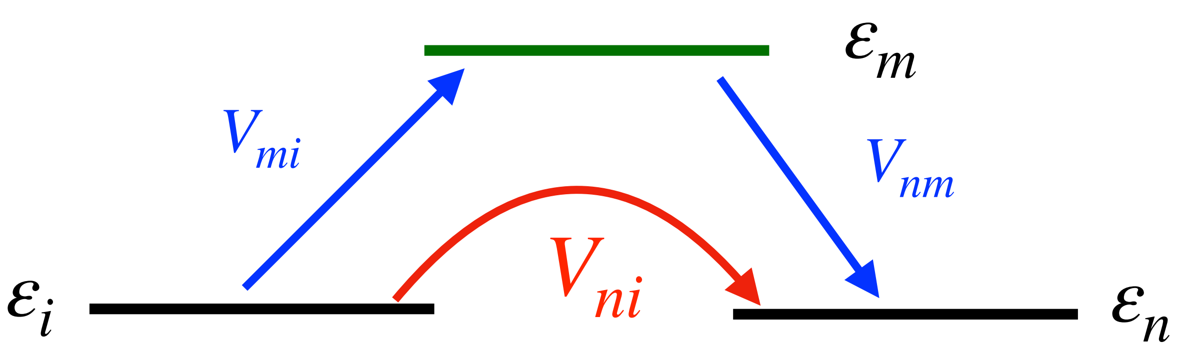
● اختلال مرتبه دوم با پتانسیل ثابت:

$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m V_{nm}V_{mi} \int_0^t \mathrm{d}t' e^{i\omega_{nm}t'} \int_0^{t'} \mathrm{d}t'' e^{i\omega_{mi}t''}$$

$$= \sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{\varepsilon_m - \varepsilon_i} \left[\frac{e^{i\omega_{ni}t} - 1}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} - \frac{e^{i\omega_{nm}t} - 1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \right]$$

$$P_{i\to n}(t) \approx \left| c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) \right|^2$$

$$\Gamma_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{ni} + \sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{\varepsilon_i - \varepsilon_m} \right|^2 \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_i)$$



گذارهای مجازی

● اختلال هارمونیک:

$$V(t) = Ve^{i\omega t} + V^{\dagger}e^{-i\omega t}$$

مثال: برهمکنش لیزر با ماده، میدان مغناطیسی متغییر با اسپین

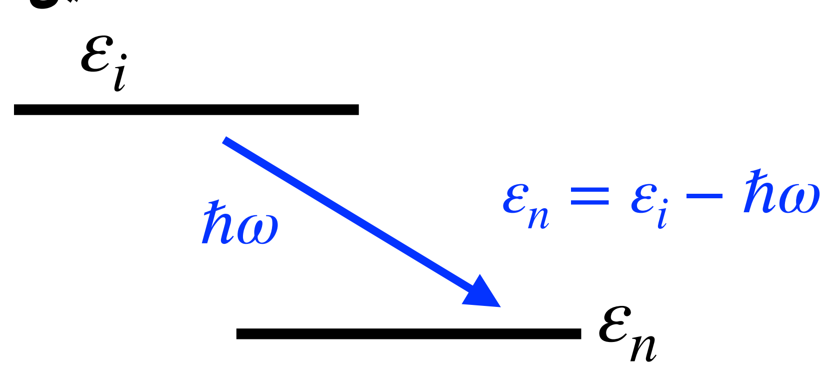
$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' e^{i\omega_{ni}t'}\left(V_{ni}\,e^{i\omega t'} + V_{ni}^{\dagger}\,e^{-i\omega t'}\right)$$

$$= \frac{1 - e^{i(\omega_{ni}+\omega)t}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i + \hbar\omega}V_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i - \hbar\omega}V_{ni}^{\dagger}$$

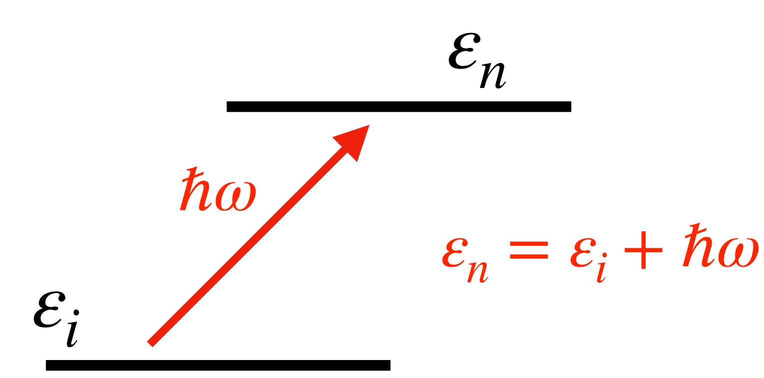
● در حد زمانهای طولانی، فقط گذارهایی با $\varepsilon_n = \varepsilon_i + \hbar\omega$ و $\varepsilon_n = \varepsilon_i - \hbar\omega$ سهم خواهند داشت.

$$\Gamma_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\left\{\,|V_{ni}|^2\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_i + \hbar\omega) + |V_{ni}^{\dagger}|^2\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_i - \hbar\omega)\right\}$$

گسیل تحریکی



جذب



● پتانسیل V(t) بعنوان منبع (در فرآیند جذب) و چاه (در فرآیند گسیل) انرژی عمل می‌کند.

- برای طیفهای پیوسته، مشابه اختلال ثابت خواهیم داشت:

$$\Gamma^{\text{emmision}}_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\rho(\varepsilon_n = \varepsilon_i - \hbar\omega)$$

$$\Gamma^{\text{absorption}}_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V^{\dagger}_{ni}|^2}\rho(\varepsilon_n = \varepsilon_i + \hbar\omega)$$

پتانسیل هرمیتی $|V_{ni}| = |V^{\dagger}_{ni}|$

تعادل جزء به جزء (detailed balance)

$$\frac{\Gamma^{\text{emmision}}_{[i]\to[n]}}{\rho(\varepsilon_n)} = \frac{\Gamma^{\text{absorption}}_{[n]\to[i]}}{\rho(\varepsilon_i)}$$