كلية العلوم

القسم : **الفيزياء**

السنة : **الرابعة**

المادة : ميكانيك الكم٢

المحاضرة : الثالثة/نظري/ كتابة

{{ A to Z مكتبة }}

نفرض أن هذه الجملة تقع في الحالة الكوانتية n غير المضطربة وهي بالتالي توصف بالتابع ψ_n^0 و بالمقابل للطاقة E_n^0 أي أن

$$\psi^0 = \psi_n^0 \quad , \quad E^0 = E_n^0 \quad , \quad E' \equiv E_n'$$

من المعادلة (7)

$$(E_n^0 - \hat{H}^0)\psi_n = -(E_n' - \hat{V}')\psi_n \quad \ldots\ldots (8)$$

نبحث الآن عن الحل ψ_n' للمعادلة 8 على شكل مجموع توابع من الشكل $\psi_{n'}$ مع العلم أن هذه التوابع تعتبر توابع للمؤثر $\hat{H}^0$ وهي متعامدة و منظمة و كاملة

$$\bar{e}_i \bar{e}_j = \delta_{ij} \quad \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \\ 0 & \text{if } i \neq j \end{cases}$$

e_i و e_j هي متجهات الواحدة في الفراغ الاقليدي و بالتالي يمكننا أن نكتب ψ_n' بالشكل

$$\psi_n' = \sum_{n'} C_{n'} \psi_{n'}^0$$

نعوض في العلاقة (8)

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - \hat{H}_0)\psi_{n'} = -(E_n' - \hat{V}')\psi_n^0 \quad \ldots (10)$$

بالعودة على العلاقة (6) يمكننا كتابتها

$$(E_{n'}^0 - \hat{H}^0)\psi_{n'}^0 = 0$$

$$E_{n'}^0 \psi_{n'}^0 = \hat{H}^0 \psi_{n'}^0 \quad \ldots\ldots\ldots (11)$$

نعوض 11 بـ 10

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \psi_{n'}^0 = -(E_n' - \hat{V}') \psi_n^0 \quad \ldots [12]$$

في هذه المعادلة سوف نعين E_n' و ψ_n'

ولكن يختلف الأمر هنا حسب ما تكون سويات الطاقة منطبقة أو غير منطبقة ونميز حالتين

[1] الطيف غير منطبق

[2] الطيف منطبق

نقابل في هذه الحالة لكل قيمة خاصة واحدة لـ E_n^0 تابع وحيد ψ_n^0 وعندئذ نضرب المعادلة 12 من اليسار بـ ψ_n^{0*} ونتكامل في كل نقاط الفراغ «نكامل» فنجد

$$\psi_n^{0*} \sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \psi_{n'}^0 = -\psi_n^{0*} (E_n' - \hat{V}') \psi_n^0$$

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \psi_{n'}^0 \psi_n^{0*} = -\psi_n^{0*} E_n' \psi_n^0 + \psi_n^{0*} \hat{V}' \psi_n^0$$

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \psi_{n'}^0 \psi_n^{0*} = -\psi_n^{0*} E_n' \psi_n^0 + \psi_n^{0*} \hat{V}' \psi_n^0$$

نكامل

$$\sum_{n'} C_n (E_n^0 - E_{n'}^0) \int \psi_n^{0*} \psi_{n'}^0 \, dV =$$

$$-\int \psi_n^{0*} E_n' \psi_n^0 \, dV + \int \psi_n^{0*} \hat{V}' \psi_n^0 \, dV$$

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \delta_{nn'} = -E_n' + \int \psi_n^{0*} \hat{V}' \psi_n^0 \, dV \quad \ldots [13]$$

نلاحظ من العلاقة (13) ان الطرف الايسر دوماً يساوي الصفر $n = n'$ (1)

يكون $E_n^0 = E_{n'}^0$ وبالتالي $E_n^0 - E_{n'}^0 = 0$

عندما $n \neq n'$ يكون $\delta_{nn'} = 0$ (2)

$$E_n' = \int \psi_n^{0*} V' \psi_n^0 \, dV , \quad V'_{nn} \equiv \langle n | \hat{V}' | n \rangle \quad (14)$$

وهي القيمة الوسطى للكمون الاضطرابي V' في الحالة الكوانتية n

اما لحساب ψ_n' فلابد من حساب العوامل $C_{n'}$ أولاً لذلك نضع المعادلة 12 في حالة كوانتية جديدة

$$\sum_{n''} C_{nn''} (E_n^0 - E_{n''}^0) \psi_{n''}^0 = -(E_n' - V') \psi_n^0$$

$\psi_{n'}^{0*}$ ... (15)

استبدلنا كل n' بـ n'' نضرب طرفي العلاقة 15 من اليسار أعلى كل نقاط الفراغ مع العلم ان الجمع على n'' يحوي كل الحدود عدا $n' = n''$ فنجد

$$\sum_{n''} C_{nn''} \int \psi_{n'}^{0*} (E_n^0 - E_{n''}^0) \psi_{n''}^0 \, dV =$$

$$-\int \psi_{n'}^{0*} (E_n' - V') \psi_n^0 \, dV$$

$$\Rightarrow \sum_{n''} C_{nn''} (E_n^0 - E_{n''}^0) \int \psi_{n'}^{0*} \psi_{n''}^{0*} \, dV =$$

$$-\int \psi_{n'}^{0*} E_n' E_n \, dV + \int \psi_{n'}^{0*} V' \psi_n^0 \, dV$$

$$\Rightarrow C_{n'}\,(E_n^{0} - E_{n'}^{0}) = 0 + V'_{n'n} \Rightarrow$$

$$C_{n'} = \frac{V'_{n'n}}{E_n^{0} - E_{n'}^{0}} \quad \ldots\ldots\ldots \boxed{16}$$

$$\psi_n^{0*}\, E_n'\, \psi_n^{0} = 0$$

نعوض العلاقة $\boxed{15}$

$$\psi_n' = \sum_{n'} C_{n'}\psi_{n'}^{0} = C_n \psi_n^{0} + \sum_{n'}' C_{n'}\psi_{n'}^{0}$$

فالملاحظ حيث تغيير اشارة الفتحة على المجموع السابق ان هذا المجموع يأخذ كل الحدود ماعدا $n'=n''$

يمكن الآن حساب التابع ψ_n' بالعلاقة $\boxed{4}$

$$\psi = \psi^{0} + \psi' + \psi'' \ldots$$

$$\psi_n = \psi_n^{0} + \psi_n' = \psi_n^{0} + C_n\psi_n^{0} + \sum_{n'}' n'\,\psi_{n'}^{0}$$

$$= (1 + C_n)\,\psi_n^{0} + \sum_{n'}' C_{n'}\psi_{n'}^{0} =$$

$$C_n^{0}\psi_n^{0} + \sum_{n'}' C_{n'}\psi_{n'}^{0} \quad \ldots\ldots\ldots (17)$$

ولكي نتخلص من هذه المسألة يجب حساب C_n^{0} ومن ثم حساب C_n وبهذا نستفيد من شرط التنظيم الذي يصف الجملة المضطربة $\int \psi_n^{*}\psi_n\, dV$ ψ_n وتساوي الواحد.

بتبديل ψ_n بقيمته بالعلاقة (17) نحصل على العلاقة التالية بعد اهمال الحدود من المرتبة (2)

$$|C_n^0|^2 \int \psi_n^{0*} \psi_n^0 \, dV + \sum_{n'} [C_n^0 C_{n'}^1 \int \psi_n^{0*} \psi_{n'}^0 \, dV$$

$$+ C_{n'}^{*} C_n^0 \int \psi_{n'}^{0*} \psi_{n}^{0} \, dV = 1 \quad \dots\dots \boxed{18}$$

$$\psi_n = \psi_n^0 + \psi_n^1 = \psi_n^0 + \sum \frac{V_{n'n}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \psi_{n'}^0$$

$\dots\dots \boxed{19}$

وهو الحل العام

(الطيف المنطبق)

يكون طيف مؤثر ما منطبق عندما يقابل قيمة خاصة واحدة من عدة توابع خاصة وفي هذه الحالة يقابل القيمة الخاصة E_n^0 عدداً من التوابع

$$\psi_{n_1}^0 , \psi_{n_2}^0 \dots \dots \psi_{n_j}^0$$

عندئذ

$$\psi_n^0 = \sum C_i^0 \psi_{n_i}^0 \quad \dots\dots (20)$$

وهو الحل ايضاً لمعادلة شرودينغر الغير مضطربة (2) اذا حدث اضطراب معبر عنه بالكمون V' فإن كل

آل شيء سيتغير ولا يعود ψ_n° حلاً لمعادلة جديدة
للبحث عن حل المعادلة جديدة نبدأ بضرب طرفي المعادلة
في التيار بالتابع ψ_n^{*} ونكامل

$$(E_n^{\circ} - \hat{H}^{\circ})\psi_n' = -(E_n' - \hat{V}')\psi_n^{\circ}$$

$$\int \psi_{n_i}^{\circ *}(E_n^{\circ} - \hat{H}^{\circ})\psi_n' \, dV =$$

$$-\int \psi_{n_i}^{\circ *}(E_n' - \hat{V}')\psi_n^{\circ} dV \quad [21]$$

اذا اضفنا بعين الاعتبار هرميتية المؤثر نعكس وضع المعادلة

$$\int \psi_n' \underbrace{(E_n^{\circ} - \hat{H}^{\circ})\psi_n^{\circ *}}_{=0} dV =$$

$$-\int \psi_{n_i}^{\circ *}(E_{n_i}^{\circ *})(E_n' - \hat{V}')\psi_n^{\circ} dV$$

نعلم ان ψ_n° حل لمعادلة شرودنغر بدون اكر
الاضطراب وبالتالي نأن الطرف يساوي الصفر

$$\int \psi_{n_i}^{\circ *}(E_n' - \hat{V}')\sum_i \underbrace{C_i^{\circ}\psi_{n_i}^{\circ}}_{(20)} dV = 0 \quad [23]$$

بما ان التوابع $\psi_{n_i}^{\circ}$ متعامدة ومنظمة نعكس الحصل
على المعادلة

$$C_i(E_n' - V_{ii}') = \sum_{ii'} C_i' V_{ii}'$$

$$V_{11}' = \int \psi^{0*} V' \psi_{n_i} \, dV$$

$$V_{11}' = \int \psi_{n_i}^{0*} V' \psi_{n_i}^{0} \, dV \qquad (25)$$

تؤلف العلاقات 24 مجموعة علاقات جبرية

$$C_1^0 (E_n' - V_{11}') - C_2^0 V_{12} \dots C_j^0 V_{1j}' = 0$$

$$-C_1^0 V_{21}' + C_2^0 (E_n' - V_{22}'') \dots C_j^0 V_{2j}' = 0 \qquad 26$$

$$-C_1^0 V_{j1}' \dots\dots C_j^0 (E_n' - V_{1j}'') = 0$$

لهذه المعادلات حلاً غير الصفر بالنسبة لـ C_i^0

أي بعدم الاشكال

$$\begin{vmatrix} E_n' - V_{11}' & -V_{12}' & -V_{1j}' \\ -V_{21}' & E_n' - V_{22}' & V_{2j}' \\ -V_{j1}' & \dots & E_n' - V_{1j}'' \end{vmatrix} = 0$$

وهي عبارة عن معادلة جبرية من المرتبة ن بالنسبة
لـ E_n' (حيث بالحالة العامة ن جذراً)
نحصل على قيمة للطاقة فإن الانطباق يمكن ان يزول
أما كلياً أو جزئياً عند تطبيق الكمون $\hat{V}$

((الملاحظة))

يزول الانطباق كلياً ان اختلفت هذه الجذور
" " جزئياً " تساوى بعضها
نعوض كل جذر في المعادلة 26 فنحصل كل مرة
على ن معادلة جبرية خطية غير مستقلة لحساب
العوامل c نضيف لها شرط Ψ_n^0 فنحصل على ن
معادلة خطية بدون طرف ثاني كافي لحساب C_j

في الحالة الخاصة عندما يتبادل مؤثر هاملتون
غير المضطرب $\hat{H}^0$ مع مؤثر اضطراب $\hat{V}$ ينعدم
المقدار $[\hat{V}, \hat{H}]$ بعد اجراء خطوات رياضية
نحصل على طاقة الاضطراب

$E_n' = \langle \Psi_n | \hat{V} | \Psi_n^0 \rangle$

تساوي العناصر الصفوفية السابقة

//انتهت المحاضرة//

The End