گذار مرتبه اول — 1st order Transition

• فرض کنید سیستم در حالت اولیه $|m,t\rangle = e^{-iH_0t/\hbar}|m\rangle$ است که $|m\rangle$ در معادله ویژه مقداری

$$H_0|m\rangle = E_m|m\rangle$$

صدق می‌کند

• تحول زمانی $|m\rangle$ توسط عملگر H_0 داده می‌شود

$$|m,t\rangle_S = e^{-iH_0t/\hbar}|m\rangle = e^{-iE_mt/\hbar}|m\rangle$$

$$|\psi,t_0\rangle_S = |m,t_0\rangle_S = e^{-iH_0t_0/\hbar}|m\rangle = e^{-iE_mt_0/\hbar}|m\rangle$$

و این حالت اولیه سیستم است؛

و ما ناگهان سیستم را مختل می‌کنیم

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

به این ترتیب سیستم از حالت مختل نشده $|m,t\rangle$ به حالت نامعین $|\psi,t\rangle$ (که لزوماً ویژه حالت عملگر H_0 نیست) گذار می‌کند

و سوال این جاست که با چه احتمالی $|\psi,t\rangle$ یکی از ویژه حالتهای H_0 است؟ (مثلاً با چه احتمالی $|n,t\rangle$ است که فرض کرده‌ایم

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \Rightarrow |n,t\rangle = \exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)|n\rangle$$

)

جواب:

$$\langle n,t|\psi,t\rangle = \langle n|e^{iH_0t/\hbar}|\psi,t\rangle$$

$$= \langle n|\psi,t\rangle_I$$

در رابطه بسط اختلال داریم: (سری Neumann)

$$|\psi,t\rangle_I = |\psi,t_0\rangle_I + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} V_I(t')\,dt'\,|\psi,t_0\rangle_I + \underbrace{\cdots}$$

جمله‌های بالا را در نظر نمی‌گیریم.

$$|\psi,t_0\rangle_S = |m,t_0\rangle_S \quad \text{حالت اولیه}$$

$$|\psi,t_0\rangle_I = e^{iH_0t_0/\hbar}|m,t_0\rangle_S = \underbrace{e^{iH_0t_0/\hbar}\,e^{-iH_0t_0/\hbar}}_{=1}|m\rangle$$

$$\boxed{|\psi,t_0\rangle_I = |m\rangle}$$

$$\Rightarrow |\psi,t\rangle_I = |m\rangle + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt'\,V_I(t')\,|m\rangle$$

$$\langle n|\psi,t\rangle_I = \langle n|m\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, \langle n|V_I(t')|m\rangle$$

$$= \delta_{nm} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, \langle n| e^{iH_0t'/\hbar} \, V(t') \, e^{-iH_0t'/\hbar} |m\rangle$$

$$\boxed{\begin{aligned} \langle n|\psi,t\rangle_I &= \delta_{nm} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, e^{-i(E_m-E_m)t'/\hbar} \, \langle n|V(t')|m\rangle \\ &= \langle n,t|\psi,t\rangle \end{aligned}}$$

دامنه احتمال گذار از $|m\rangle$ به $|n\rangle$ که هر دو ویژه حالتهای عملگر هملتونی H_0 هستند.
نتیجه بالا در مرتبه اول بط اختلال است (در بط Neumann اولین جمله در نظر گرفته شده است).

با داشتن دامنه احتمال گذار از حالت $|m\rangle$ به حالت $|n\rangle$ می‌توان احتمال گذار $P_{nm}(t)$ را بدست آورد:

اگر $n \neq m$

$$\boxed{P_{m\to n}(t) = |\langle n,t|\psi,t\rangle|^2 = \left|\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, e^{+i(E_n-E_m)t'/\hbar} \langle n|V(t')|m\rangle\right|^2}$$

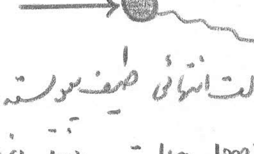
گذار به طیف پیوسته - قانون طلائی فرمی:

(۱) در مثال قبلی گذار از حالت گسسته $|m\rangle$ به حالت گسسته $|n\rangle$ انجام گرفت؛ در هر دو حالت ذره مقید است مثلاً الکترون ابتدا در تراز $|m\rangle$ قرار دارد. بعد تحت تاثیر پتانسیل وابسته به زمان (مثلاً انرژی الکترومغناطیسی) به حالت $|n\rangle$ گذار می‌کند. در اینجا دو حالت ممکن است:

(الف) حالت $|n\rangle$ هنوز یک حالت مقید باشد.

(ب) این امکان هم وجود دارد که پس از اعمال تحریک وابسته به زمان ذره مقید کلاً از حالت مقید خارج می‌شود در این صورت می‌توان طیف گسسته ای از تکانه و انرژی داشت.

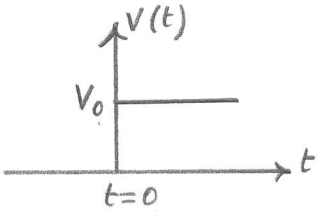
مثالهائی در مورد دوم:



ب - ۱) پراکندگی (تقریب Born در بحث پراکندگی ← بعداً)

ب - ۲) فروپاشی α: تکانه ذره α (حالت انتهائی طیف پیوسته دارد)

ب - ۳) گذارهای اپتیکی: گذار از حالت $|m\rangle$ به حالت $|n\rangle$ انجام شده است. (الکترون در تراز $|n\rangle$ ناپایدار است. وقتی به حالت $|m\rangle$ برمی‌گردد فوتون گسیل می‌شود. طیف انرژی فوتون کاملاً پیوسته است).



مثال(۱) : <u>تئوری گذار :</u> فرض کنید اختلالی به صورت زیر به سیستم داده شده است :

$$V(t) = V_0\,\theta(t)$$

$$P_{m\to n}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt'\,\exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t'\right)\langle n|\underbrace{V(t')}_{=V_0\theta(t)}|m\rangle\right|^2$$

$$\omega_{nm} \equiv \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

$$P_{m\to n}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt'\, e^{i\omega_{nm}t'}\right|^2 \left|\langle n|V_0|m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{1}{i\omega_{nm}}\left(e^{i\omega_{nm}t} - 1\right)\right|^2 \left|\langle n|V_0|m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\omega_{nm}t/2}}{\frac{i\omega_{nm}}{2}}\;\frac{e^{i\omega_{nm}t/2} - e^{-i\omega_{nm}t/2}}{2}\right|^2 \left|\langle n|V_0|m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\omega_{nm}t/\hbar}}{\frac{\omega_{nm}}{2}}\;\frac{2i\sin\frac{\omega_{nm}t}{2}}{2i}\right|^2 \left|\langle n|V_0|m\rangle\right|^2$$

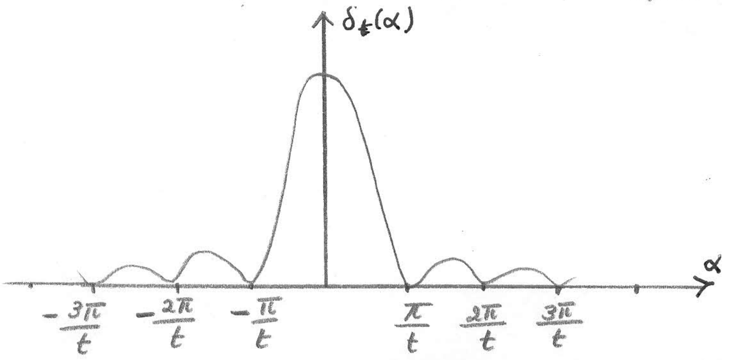
$$\boxed{P_{m\to n}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\sin\frac{\omega_{nm}t}{2}}{\frac{\omega_{nm}}{2}}\right)^2 \left|\langle n|V_0|m\rangle\right|^2}$$

این رابطه را می‌توان بیشتر ساده کرد و به اصل طلائی فرمی رسید:

$$\delta_t(\alpha) = \frac{\sin^2\alpha t}{\pi t\,\alpha^2}$$

a) $\delta_t(\alpha)\Big|_{\alpha=0} = \dfrac{\alpha^2 t^2}{\pi t\,\alpha^2} = \dfrac{t}{\pi} \xrightarrow{t\to\infty} \infty$ داریم

b) $\sin^2\alpha t = 0 \longrightarrow \alpha t = n\pi \longrightarrow \alpha = \dfrac{n\pi}{t} \xrightarrow[t\to\infty]{} 0$ بنا



$$\lim_{t\to\infty}\delta_t(\alpha) = \delta(\alpha)$$

$$\lim_{t\to\infty}\int \delta_t(\alpha)\,d\alpha = 1$$

$$\lim_{t\to\infty}\int \delta_t(\alpha)\,F(\alpha)\,d\alpha = F(0)$$

$$\boxed{P_{m\to n}(t) = \frac{\pi t}{\hbar^2}\left(\frac{\sin^2\frac{\omega_{nm}t}{2}}{\pi t\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right)^2}\right)\left|\langle n|V_0|m\rangle\right|^2}$$

$$\text{آهنگ گذار} = \frac{\text{احتمال گذار}}{\text{زمان}} = \lim_{t\to\infty} \frac{P_{m\to n}(t)}{t} = \Gamma_{m\to n}$$

$$\Gamma_{m\to n} = \lim_{t\to\infty} \frac{\pi}{\hbar^2} \left(\frac{\sin^2 \frac{\omega_{nm} t}{2}}{\pi t \left(\frac{\omega_{nm} t}{2}\right)^2} \right) |\langle n|V_0|m\rangle|^2$$

$$= \frac{\pi}{\hbar^2} \delta\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right) |\langle n|V_0|m\rangle|^2$$

$$\frac{E_n - E_m}{\hbar} = \omega_{nm}$$

$$= \frac{2\pi\hbar}{\hbar^2} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V_0|m\rangle|^2$$

$$\delta\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right) = 2\hbar\, \delta(E_n - E_m)$$

$$\boxed{\text{آهنگ گذار} = \Gamma_{m\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V_0|m\rangle|^2}$$

سؤال: گذار از یک حالت گسسته هامیلتونی غیراختلالی H_0 به یک طیف پیوسته

فرض می‌کنیم احتمال گذار به همهٔ حالتهایی که در این طیف پیوسته با انرژی بین E_n و $E_n + dE_n$ قرار دارند برابر است؛

$$\frac{\text{تعداد حالات}}{\text{واحد انرژی}} = \rho(E_n) \quad \text{چگالی حالات (تابع چگالی حالات)}$$

$\rho(E_n)\, dE_n \longrightarrow$ تعداد حالات بین E_n , $E_n + dE_n$

در این صورت آهنگ گذار کل عبارت است از

$$\sum_n \Gamma_{m\to n} = \int dE_n\, \rho(E_n)\, \Gamma_{m\to n}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \int dE_n\, \rho(E_n)\, \delta(E_n - E_m) |\langle n|V_0|m\rangle|^2$$

(فرض کرده‌ایم به ازای همهٔ n ها این مؤلفه ثابت است.)

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_m) |\langle n|V_0|m\rangle|^2$$

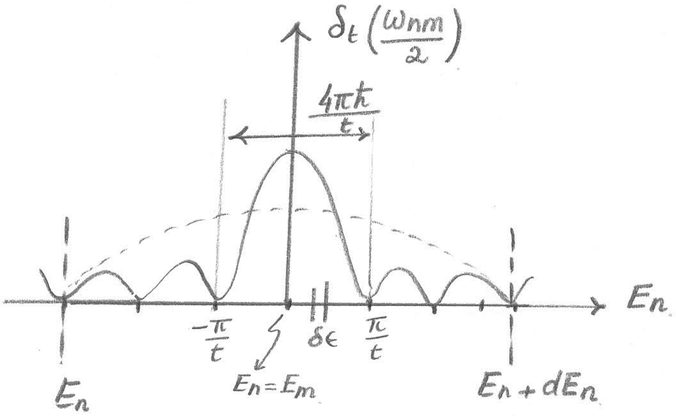
E_m انرژی حالت اولیه است.

اصل طلایی فرمی:

$$\boxed{\sum_n \Gamma_{m\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_m) |\langle n|V_0|m\rangle|^2}$$

$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

سؤال: اصل طلایی فرمی تا چه میزان اعتبار دارد؟



در نمایش ابتدائی تابع δ

$$\delta_t\left(\frac{E_n-E_m}{2\hbar}\right)=\delta_t\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right)$$

شرط (۱) به ازای هر t متناهی (قبل از رفتن حد $t\to\infty$) پهنای تابع $\frac{4\pi\hbar}{t}$ است. برای اینکه بتوان تابع توزیع را بصورت تابع δ نوشت باید پهنای ابتدائی dE_n خیلی بزرگتر از $\frac{2\pi\hbar}{t}$ باشد.

شرط (۲) باید تعداد زیادی حالت در همان $\frac{4\pi\hbar}{t}$ وجود داشته باشد. به این معنی که اگر اینطور نباشد اصلا نمی‌توان چگالی حالات P_n را تعریف کرد.

$$dE_n \gg \frac{2\pi\hbar}{t} \gg \delta\epsilon \longrightarrow \frac{2\pi\hbar}{dE_n} \ll t \ll \frac{2\pi\hbar}{\delta\epsilon}$$

و این شروط باید در هر لحظه برقرار باشند (گذار فقط در این محدوده زمانی اتفاق می‌افتد).

نکته: محاسبه پهنا:

$$\Delta\alpha = \frac{2\pi}{t} = \Delta\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right)$$

به ازای هر t پهنای تابع توزیع $= \Delta(E_n-E_m) = \frac{4\pi\hbar}{2}$

مثال (۲): اختلالات تناوبی:

$$V(t)=\theta(t)\left(Fe^{-i\omega t}+F^{+}e^{+i\omega t}\right)$$

$$\langle n,t|\psi,t\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\; e^{i\omega_{nm}t'}\langle n|V(t')|m\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\left\{e^{i\omega_{nm}t'}\langle n|F|m\rangle e^{-i\omega t'}+e^{i\omega_{nm}t'}\langle n|F^{+}|m\rangle e^{+i\omega t'}\right\}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\left\{\langle n|F|m\rangle e^{i(\omega_{nm}-\omega)t'}+\langle n|F^{+}|m\rangle e^{i(\omega_{nm}+\omega)t'}\right\}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left\{\frac{e^{\frac{i(\omega_{nm}-\omega)t}{2}}\cdot 2i\sin\frac{(\omega_{nm}-\omega)t}{2}}{\frac{2i(\omega_{nm}-\omega)}{2}}\langle n|F|m\rangle + \frac{e^{\frac{i(\omega_{nm}+\omega)t}{2}}\, 2i\sin\frac{(\omega_{nm}+\omega)t}{2}}{\frac{2i(\omega_{nm}+\omega)}{2}}\langle n|F^{+}|m\rangle\right\}$$

$$\left|\langle n,t|\psi,t\rangle\right|^2=\frac{\pi t}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{nm}-\omega)t}{2}\right)}{\pi t\left(\frac{(\omega_{nm}-\omega)t}{2}\right)^2}|\langle n|F|m\rangle|^2+\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{nm}+\omega)t}{2}\right)}{\pi t\left(\frac{(\omega_{nm}+\omega)t}{2}\right)^2}|n|F^+|m\rangle|^2\right\}+$$

جمله‌هائی حذف می‌شوند

$$=\lim_{t\to\infty}\frac{\pi t}{\hbar^2}\left\{\delta\left(\frac{\omega_{nm}-\omega}{2}\right)|\langle n|F|m\rangle|^2+\delta\left(\frac{\omega_{nm}+\omega}{2}\right)|\langle n|F^+|m\rangle|^2\right\}$$

$$P_{n\to m}(t)=\frac{2\pi t}{\hbar}\left\{\delta(E_n-E_m-\hbar\omega)|\langle n|F|m\rangle|^2+\delta(E_n-E_m+\hbar\omega)|\langle n|F^+|m\rangle|^2\right\}$$

آهنگ گذار : $\boxed{\frac{P_{n\to m}(t)}{t}=\frac{2\pi}{\hbar}\left\{\delta(E_n-E_m-\hbar\omega)|\langle n|F|m\rangle|^2+\delta(E_n-E_m+\hbar\omega)|\langle n|F^+|m\rangle|^2\right\}}$