ادامه فصل پنجم - حل دقیق و روش های تقریبی در سیستم های وابسته به زمان

- تصاویر تحول زمانی مکانیک کوانتومی

+ تصویر شرودینگر

• همانطور که در فصل دو عنوان شد، اگر سیستمی با $H=H(t)$ داشته باشیم، تحول زمانی اپراتور می‌شود:

$$A^S(t) = A^S(t_0) \qquad ①$$

همینطور می‌توان تحول زمانی حالت را نیز به صورت ذیل مطرح کرد:

$$|\alpha, t_0; t\rangle^S = U(t,t_0)\,|\alpha, t_0; t_0\rangle^S \qquad ② \text{ الف}$$

• یا به عبارتی معادله‌ی تحول حالت می‌شود:

$$i\hbar\, \partial_t |\alpha, t_0; t\rangle^S = H(t)\,|\alpha, t_0; t\rangle^S \qquad ② \text{ ب}$$

• که در آن $U(t,t_0)$ به صورت ذیل باید باشد:

$$U(t,t_0) = T\left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int H(t')\,dt' \right) \right\} \qquad ③$$

$$i\partial_t U = H U$$

* اثبات این روابط در ص 43 الف ص 46 AQM-4002 آمده است.

• این رهیافت برای مساله‌هایی که $H \neq H(t)$ باشند مناسب‌تر است چرا که $U(t,t_0)$ به مقدار ذیل که آسان‌تر است

تقلیل می‌یابد:

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0) H \right)$$

• توجه شود که رهیافت انتگرال مسیر نیز جزء تصویر شرودینگر محسوب می‌شود، چرا که به دنبال تحول حالت است ولی

می‌توان در تصاویر دیگر نیز رهیافت مشابهی را جفت و جور کرد که با انتگرال مسیر بتوان کار کرد.

+ تصویر هایزنبرگ.

• در صورتی که سیستمی با $H=H(t)$ ارائه شده باشد، مسئله را با همان توصیف B در صفحه‌ی 70 می‌توان با انداختن تحول به گردن اپراتورها و رها کردن تحول زمانی حالت‌ها، محاسبات را ساده کرد.

برای این منظور می‌توان با تعاریف $A^H(t)$ و $|\alpha,t_0;t\rangle^H$ به صورت زیر کار کرد:

$$
{}^{S}\langle\beta,t_0;t|A^S(t)|\alpha,t_0;t\rangle^S = \underbrace{{}^{S}\langle\beta,t_0;t|U(t,t_0)}_{={}^{H}\langle\beta,t_0;t|}\underbrace{U^\dagger(t,t_0)\,A^S(t)\,U(t,t_0)}_{A^H(t)}\underbrace{U^\dagger(t,t_0)|\alpha,t_0;t\rangle^S}_{|\alpha,t_0;t\rangle^H}
$$

• به عبارت دیگر از فوق می‌توان تحول زمانی اپراتور را به صورت ذیل نوشت:

$$
A^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,A^S(t)\,U(t,t_0) \qquad \text{①}\ \text{الف}
$$

یا به عبارتی معادله‌ی تحول می‌شود:

$$
\frac{d}{dt}A^H(t) = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H] + \left(\frac{\partial A^S}{\partial t}\right)^H \qquad \text{①}\ \text{ب}
$$

* اثبات رابطه‌ی فوق در ص 54 AQM1-4001 آمده است.

• تحول زمانی حالت را نیز می‌توان نوشت:

$$
|\alpha,t_0;t\rangle^H = |\alpha,t_0,t_0\rangle^S \qquad \text{②}
$$

* برای نشان دادن این کافی است طبق تعریف شروع کنیم:

$$
|\alpha,t_0;t\rangle^H = U^\dagger(t,t_0)|\alpha,t_0,t\rangle^S = U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0)|\alpha,t_0,t_0\rangle^S = |\alpha,t_0,t_0\rangle^S.
$$

+ تصویر برهم‌کنش یا دیراک

• در صورتی که سیستمی را داشته باشیم که به صورت $H = H_0 + H_{int}(t)$ باشد، این سیستم‌ها معمولاً در برهم‌کنش هاست. چرا که به صورت لحظه‌ای می‌خواهد اتفاقی بیوفتد که به بخش H_0 بخش آزاد گفته می‌شود.

در این صورت بهتر است با تصویر برهم‌کنش که در ادامه گفته می‌شود کار کرد.

در این حالت اگر مشابه $U(t,t_0)$ که مولدش $H(t)$ بود، $U_0(t,t_0)$ را تعریف کنیم که مولدش H_0 باشد و با تعریف $A^I(t)$ و $|\alpha, t_0; t\rangle^I$ می‌توان شروع به کار کرد.

$$ {}^S\langle\beta, t_0; t| A^S(t) |\alpha, t_0; t\rangle^S = \underbrace{{}^S\langle\beta, t_0; t| U_0(t,t_0)}_{= {}^I\langle\beta, t_0; t|} \underbrace{U_0^\dagger(t,t_0) A^S(t) U_0(t,t_0)}_{A^I(t)} \underbrace{U_0^\dagger(t,t_0) |\alpha, t_0; t\rangle^S}_{|\alpha, t_0; t\rangle^I} $$

• طبق معادله‌ی فوق می‌توان گفت تحول این‌گونه می‌شود:

$$ A^I(t) = U_0^\dagger(t,t_0) A^S(t) U_0(t,t_0) \qquad \text{①الف} $$

یا به عبارتی معادله‌ی تحول به شکل زیر است:

$$ \frac{d}{dt} A^I(t) = \frac{1}{i\hbar}[A^I, H_0^I] + \left(\frac{\partial A^S}{\partial t}\right)^I \qquad \text{①ب} $$

* برای نشان دادن معادله‌ی تحول فوق می‌توان نوشت:

$$ \frac{d}{dt} A^I(t) = \frac{d}{dt}(U_0^\dagger A_S U_0) $$

$$ = U_0^\dagger \frac{H_0}{-i\hbar} U_0 U_0^\dagger A^S U_0 + U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U_0 + U_0^\dagger A^S U_0 U_0^\dagger \frac{H_0}{i\hbar} U_0 $$

$$ = \frac{1}{i\hbar}[A^I, H_0^I] + \left(\frac{\partial A^S}{\partial t}\right)^I $$

• همینطور می‌توان تحول زمانی حالت را نیز نشان داد که می‌شود:

$$|\alpha, t_0; t\rangle^I = U_{int}(t,t_0)\,|\alpha, t_0; t_0\rangle^S \qquad \text{② الف}$$

یا به عبارتی معادله تحول به دست می‌آید:

$$i\hbar\,\partial_t |\alpha, t_0; t\rangle^I = (H_{int})^I\, |\alpha, t_0; t\rangle^I \qquad \text{② ب}$$

* برای به دست آوردن این روابط ابتدا از ② ب شروع می‌کنیم:

$$i\hbar\,\partial_t |\alpha, t_0; t\rangle^I = i\hbar\,\partial_t U_0^+(t,t_0)\, U(t,t_0)\, |\alpha, t_0; t\rangle_S$$

$$= U_0^+ (-H_0 + H)\, U_0\, U_0^+\, U\, |\alpha, t_0, t\rangle^S$$

$$= (H_{int})^I\, |\alpha, t_0, t\rangle^I$$

حال با نشان دادن ① الف مشابهت ② الف و ② ب فقط را می‌توان دید و نوشت که در آن U_{int} نیز مشابه U و U_0 ساخته شده ولی با مولد $(H_{int})^I$ در ذیل نوشته شده:

• در روابط فوق U، U_0 و U_{int} به صورت زیر تعریف شده‌اند:

$$U = T\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,dt'\right)\right] \;;\; U_0 = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right) \;;\; U_{int} = T\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} (H_{int}(t'))^I\,dt'\right)\right\}$$

③ الف $i\partial_t U = HU$ ③ ب $i\partial_t U_0 = H_0 U_0$ ③ ج $i\partial_t U_{int} = (H_{int})^I U_{int}$

• در این رویکرد تحول بخش آزاد همانطور که در ① الف و ب روشن شده، برگردن عملگرها می‌باشد. اما تحول بخش برهم‌کنش (بخش وابسته به زمان هامیلتونی) به گردن حالت است. همانطور که در معادله ② الف و ب واقع است.

• اگر در تصویر برهم‌کنش کار کردیم و $|\alpha, t_0; t\rangle^I$ را یافتیم می‌توان با رابطه زیر تبدیل به تصویر شرودینگر کرد طبق تعریف:

$$|\alpha, t_0; t\rangle^S = U_0(t,t_0)\,|\alpha, t_0; t\rangle^I \qquad ④$$

که گویای این است که تحول زمانی بخش برهم‌کنش در $|\alpha, t_0; t\rangle^I$ مستتر است و با افزودن با که تحول بخش آزاد است، می‌توان حالت را در تصویر شرودینگر دید.

• برای محاسبات عملیاتی تر اگر داشته باشیم $H(t)=H_0+V(t)$ ، که $H_0|n\rangle=E_n|n\rangle$ باشد می‌توان $|\alpha, t_0; t\rangle^I$ را برحسب $|n\rangle$ که مجموعه‌ای کامل هستند نوشت:

$$|\alpha, t_0; t\rangle^I = \sum_n c_n(t)\,|n\rangle \qquad (5)$$

که تحول زمانی $c_n(t)$ به صورت ذیل میشود که در آن $\omega_{nm}=-\omega_{mn}=\frac{E_n-E_m}{\hbar}$ است:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1(t)\\ \dot{c}_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11}(t) & V_{12}(t)\,e^{i\omega_{12}(t-t_0)} & \cdots \\ V_{21}(t)\,e^{i\omega_{21}(t-t_0)} & V_{22}(t) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1(t)\\ c_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix} \qquad (4)$$

* حال اگر رابطه ② ص 73 را در $\langle n|$ ضرب کنیم:

$$i\hbar\,\partial_t\langle n|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_m \langle n|V^I(t)|m\rangle\langle m|\alpha, t_0; t\rangle^I \qquad (6)$$

$$= \sum_m \langle n|e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}\,V(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0}|m\rangle\langle m|\alpha, t_0; t\rangle^I$$

به زبان ماتریسی با تعریف $-\omega_{mn}=\omega_{nm}=\frac{E_n-E_m}{\hbar}$:

$$i\hbar\,\dot{c}_n(t) = \sum_m e^{i\omega_{nm}(t-t_0)}\,V(t)_{nm}\,c_m(t) \qquad (7)$$

که همان نتیجه مطلوب ما بود به صورت ماتریسی.

* توجه شود که در تصویر شرودینگر نتیجه حاصل با داشتن $c_n(t)$ میشود طبق ⑥ ص 73 :

$$|\alpha, t_0; t\rangle^S = \sum c_n(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n}|n\rangle. \qquad (8)$$

* مثالی یک سیستم دو حالته :

فرض کنیم H سیستمی به صورت ذیل می باشد :

$$H=\begin{pmatrix} E_1 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & E_2 \end{pmatrix} \qquad ①$$

در این صورت می توان بخش زمانی و ثابت H را جدا جدا به صورت زیر نوشت که $V(t)$ به عنوان driven force تلقی می شود و γ قدرت پتانسیل و ω فرکانسی که به سیستم تحمیل می شود :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V(t) \\ &= \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \qquad ②$$

با توجه به اینکه $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ را داریم می توان تحول زمانی H را در تصویر برهم کنش طبق ص 74 به صورت زیر نوشت :

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n^{1,2} c_n(t)\,|n\rangle \qquad ③$$

که در آن تحول $c_n(t)$ ها به صورت زیر می باشد که در واقع $|c_n|^2$ ، احتمال حضور در حالت n می باشد :

$$i\hbar\begin{pmatrix} \dot c_1(t) \\ \dot c_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{i(\omega-\omega_{21})t} \\ \gamma e^{-i(\omega-\omega_{21})t} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} \qquad ④$$

که در آن $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ ، به عنوان فرکانس طبیعی دو حالت H_0 تعریف می شود. با تعریف $\Delta\omega = (\omega - \omega_{21})$ ، بازنویسی می کنیم

$$i\hbar\,\dot c_1(t) = \gamma e^{i\Delta\omega t}\, c_2(t) \qquad ⑤ \text{ الف}$$

$$i\hbar\,\dot c_2(t) = \gamma e^{-i\Delta\omega t}\, c_1(t) \qquad ⑤ \text{ ب}$$

که واضح است که دو معادله دیفرانسیل جفت شده داریم ، برای حل آنها ابتدا معادله ⑤ الف ص 75 را مجددا مشتق می گیریم :

$$\begin{aligned} i\hbar\,\ddot c_1(t) &= \frac{d}{dt}\left(\gamma e^{i\Delta\omega t}\, c_1(t)\right) \\ &= \gamma i\Delta\omega\, e^{i\Delta\omega t}\, c_2(t) + \gamma e^{i\Delta\omega t}\, \dot c_2(t) \end{aligned} \qquad ⑥$$

حال با جایگذاری ⑤ الف و ب ص ۷۵ در ⑥ ص ۷۵ می‌توان نوشت :

$$i\hbar \ddot{C}_1(t) = i\Delta\omega\, i\hbar\, \dot{C}_1(t) + \gamma e^{i\Delta\omega t}\frac{\gamma}{i\hbar} e^{-i\Delta\omega t} C_1(t) \qquad ⑦$$

واضح است که واضح شده است، به طوری که می‌توان $C_2(t)$ بر حسب ... یعنی معادله ای که آورد ولی نیاز می‌باشد چرا که

بعد از حل $C_1(t)$ با جایگذاری در ⑦ الف ص ۷۵ $C_2(t)$ نیز به دست می‌آید. معادله ⑦ را بازنویسی می‌کنیم :

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} - i\Delta\omega\frac{d}{dt} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}\right)C_1(t) = 0 \qquad ⑧$$

پاسخ عمومی ما $C_1(t)=e^{at}$ می‌باشد. لذا با قرار دادن در معادله فوق بررسی می‌کنیم :

$$a^2 - i\Delta\omega\, a + \frac{\gamma^2}{\hbar^2} = 0 \qquad ⑨$$

به سادگی با شرط حل $a=\frac{i\Delta\omega}{2}\pm i\Omega$ که $\Omega=\frac{1}{2}\sqrt{\Delta\omega^2+\frac{4\gamma^2}{\hbar^2}}$ ، $C_1(t)=e^{at}$ جواب ما است. یا به عبارتی :

$$C_1(t)=e^{i\Delta\omega t/2}\left(Ae^{i\Omega t}+Be^{-i\Omega t}\right) \qquad ⑩\ \text{الف}$$

که با جایگذاری در عبارت ⑦ الف ص ۷۵ به دست می‌آید :

$$C_2(t)=\frac{i\hbar}{\gamma}e^{-i\Delta\omega t}\left[Ai\left(\frac{\Delta\omega}{2}+\Omega\right)e^{i\left(\frac{\Delta\omega}{2}+\Omega\right)t}+Bi\left(\frac{\Delta\omega}{2}-\Omega\right)e^{i\left(\frac{\Delta\omega}{2}-\Omega\right)t}\right] \qquad ⑩\ \text{ب}$$

حال اگر فرض کنیم در $t_0=0$ ، $C_1(0)=1$ و $C_2(0)=1$ باشد می‌توان گفت :

$$A=\left(\frac{\Delta\omega}{2}-\Omega\right)C\ ,\quad B=-\left(\frac{\Delta\omega}{2}+\Omega\right)C\ ,\quad C=-\frac{1}{2\Omega} \qquad ⑪$$

الف　　　　ب　　　　ج

که با جایگذاری C_1 از ⑪ ص 76 در ⑩ ص 76 بدست می‌آید:

$$C_1(t) = e^{i\Delta\omega t/2}\left[\left(\frac{1}{2}-\frac{\Delta\omega}{4\Omega}\right)e^{i\Omega t} + \left(\frac{1}{2}+\frac{\Delta\omega}{4\Omega}\right)e^{-i\Omega t}\right] \quad \text{(12 الف)}$$

$$C_2(t) = \frac{\hbar e^{-i\Delta\omega t/2}}{\gamma}\left\{\frac{1}{2\Omega}\underbrace{\left(\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)^2-\Omega^2\right)}_{=\gamma^2/\hbar^2}e^{i\Omega t} - \frac{1}{2\Omega}\underbrace{\left(\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)^2-\Omega^2\right)}_{=\gamma^2/\hbar^2}e^{-i\Omega t}\right\}$$

$$= \frac{\gamma e^{-i\Delta\omega t/2}}{\hbar\Omega}\, i\sin(\Omega t) \quad \text{(12 ب)}$$

حال از روابط فوق می‌توان احتمال حضور در حالت ۱ و ۲ را به صورت زیل نوشت که به روابط Rabi موسوم است.

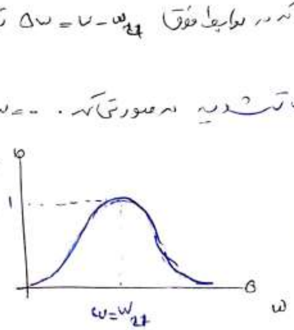
$$|C_1(t)|^2 = 1 - |C_2(t)|^2 \quad \text{(13 الف)}$$

$$|C_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\frac{\Delta\omega^2}{4}+\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}\sin^2\left(\sqrt{\frac{\Delta\omega^2}{4}+\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}\; t\right) \quad \text{(13 ب)}$$

توجه شود که در روابط فوق $\Delta\omega = \omega_{21}-\nu$ تعریف شده بود.

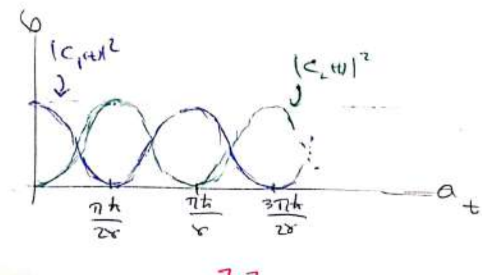
شرایط تشدید در صورتی که $\Delta\omega=0$ باشد رخ می‌دهد. که در این صورت دامنه $|C_2|^2$ به یک می‌رسد.

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\gamma}{\hbar}t\right)$$

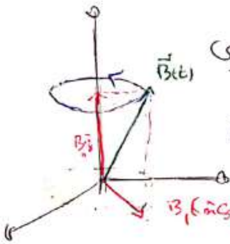


(14)

در این حالت اگر $|C_2(t)|^2$ و $|C_1(t)|^2$ را بر حسب زمان رسم کنیم به صورت زیر می‌شود:



* تشدید مغناطیسی اسپین؛



به عنوان مثالی دیگر مثال ص 75، اگر یک اسپین $\frac{1}{2}$ (ذره الکترون با اسپین $\frac{1}{2}$) در یک میدان مغناطیسی $\vec{B}(t) = B_0\hat{z} + B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)$ قرار گیرد می‌توان نشان داد H چنین سیستمی مشابه ① ص 75 می‌شود؛ توجه شود که $\vec{B}(t)$ به صورت شکل مقابل با زمان دوران می‌کند.

$$H = \frac{g|e|\hbar}{4m_ec}\begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}.$$

چرا که می‌توان نوشت با وجود μ_e؛

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

$$= -\frac{ge}{2m_e}\vec{S}\cdot\vec{B}$$

$$= -\frac{ge}{2m_ec}\left[B_0\sigma_z + B_1(\cos\omega t\,\sigma_x + \sin\omega t\,\sigma_y)\right]$$

$$= -\frac{ge\hbar}{4m_ec}\begin{pmatrix} B_0 & B_1(\cos\omega t - i\sin\omega t) \\ B_1(\cos\omega t + i\sin\omega t) & B_0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{g|e|\hbar}{4m_ec}\begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & B_0 \end{pmatrix}$$

فرکانس حرکت تقدیمی اسپین در $B_0\hat{z}$

حال با تعریف $\Delta\omega = \omega - |\omega_{21}|$ ، $\gamma = \frac{g|e|\hbar}{4m_ec}B_1$ ، پاسخ چنین سیستمی را تجربه بررسی کنید مشابه مثال ص 75 و عین دو واسطه ⑬ ص 77 خواهند بود و در شرایط تشدید که فرکانس حرکت تقدیمی $\vec{B}(t)$ با فرکانس حرکت تقدیمی اسپین یکی می‌شود ⑭ ص 77.

توجه شود که در اینجا $B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)$ مسئول ساختن پتانسیل driven force می‌باشد که باعث تأمین کردن انرژی نوسان بین دو اسپین می‌شود و البته واضح است در میدان $B_0\hat{z}$ اسپین با ۲ انرژی بیشتر دارد.

در عمل تولید میدان مغناطیسی که به صورت ابتدای ص۷۵ باشد که با فرکانس ω حرکت تقدیمی کند دشوار می‌باشد،

با جریان AC

به جای این چنین سیستمی می‌توان یک میدان مغناطیسی نوسان کننده در راستای افقی مثلاً $\hat{x}$ ساخت که با شرط

$B_1 \ll B_0$، همان میدان مغناطیسی با فرکانس ω پادساعتگرد را می‌دهد؛ چرا که؟

$$\vec{B}(t) = B_0\hat{z} + 2B_p\,\hat{x}\cos\omega t$$

$$= B_0\hat{z} + B_1\underbrace{(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)}_{\text{چپ}} + B_1\underbrace{(\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t)}_{\text{راست}}$$

که به طور مشابه ص۷۵ ④ می‌توان نوشت:

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1(t)\\ \dot{c}_2(t)\end{pmatrix} = \gamma\begin{pmatrix}0 & e^{-i(\omega-|\omega_{21}|)t} + e^{-i(\omega+|\omega_{21}|)t}\\ e^{i(\omega-|\omega_{21}|)t} + e^{i(\omega+|\omega_{21}|)t} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1(t)\\ c_2(t)\end{pmatrix}$$

اما چون قبلاً $B_1 \ll B_0$ داریم با توجه به تعریف γ و $|\omega_{21}| \propto B_0$، می‌توان گفت $\hbar|\omega_{21}| \gg \gamma$ بنابراین همان تحلیل می‌باشد به

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1(t)\\ \dot{c}_2(t)\end{pmatrix} = \gamma\begin{pmatrix}0 & e^{-i(\omega-|\omega_{21}|)t}\\ e^{i(\omega-|\omega_{21}|)t} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1(t)\\ c_2(t)\end{pmatrix}$$

که همان میدان مغناطیسی با حرکت تقدیمی پادساعتگرد با فرکانس ω می‌باشد

* تشدید مغناطیسی هسته‌ای (NMR):

هیدروژن

اگر به مثال ص۷۸، تشدید مغناطیسی اسپین به جای الکترون، هسته‌ای با اسپین ½ به عنوان مثال پروتون با جرم m_p و μ_p مشخص قرار دهیم (به طور کلی می‌توان برای هسته‌های مختلف انجام داد) میدان B_0 ابتدا جهت‌گیری هسته را تفکیک می‌دهد و با رساندن به فرکانس ω_{21} با میدان دایره‌ای، اسپین flip می‌کند.

این فرکانس: m_p، μ_p است و فرق دارد با ω_{21} الکترون

با قرار دادن $|\vec{I}|^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)$ در (14) ص 77 و فرض $\vec{\mu}_p = \frac{g_p |e|}{2m_p c}\vec{S}$ که $g_p = 2\times 2.79$ است و m_p با یک

میدان کاری حدود $B_1 = 2.3\ \text{Tesla}$ ، فرکانس مربوطه $97.9\ \text{MHz}$ به دست می‌آید. و طبق $E=\hbar f$ ، $E = 4.05\times 10^{-7}\ \text{eV}$

به دست می‌آید. که بسیار انرژی پایینی است. (توجه شود که بسته انرژی‌ها در QM با هم جمع نمی‌شوند و نسبت‌ها مردود فرض)

چون این انرژی بسیار کم می‌باشد، آنچه درون بدن، مواد شیمیایی و ... اعمال شود هیچ آسیبی به ساختارها وارد نمی‌کند.

کاربرد این موضوع در بسیاری از جاها مانند اصب است، عکسبرداری تشدید مغناطیسی (MRI) که بسیار

پرکاربرد است. با این روش می‌توان با کنترل کردن فرکانس $97.9\ \text{MHz}$ ، پروتون‌های جهت‌گیری کرده توده‌ای بدنی را به

رزونانس درآورد و flip انجام می‌دهند، سپس با قطع این پالس، مجددا به انرژی کمینه flip کرده

و تک سطح انرژی‌ای آزاد می‌کنند که با توجه به چگالی توده پروتون‌ها می‌توان مناطق مختلف را شناسایی کرد.

کاربرد مشابه طیف‌سنجی است که می‌توان با همان ایده‌ی فوق تعداد هسته‌ها و پروتون‌ها و ... مادهٔ شیمیایی

را در یافت که در معارف شیمی کاربرد زیادی دارد.

* تقویت میکروویو به وسیله‌ی گسیل القا تحریک شده (میزر)

ص 75

به عنوان مثال دیگری از یک سیستم دوحالته می‌توان به NH_3 هم اشاره کرد که دو حالت با انرژی‌های

متفاوت متقارن و پادمتقارن داشت و یک فرکانس طبیعی مشخص در محدوده‌ی میکروویو نیاز داشت.

حال چنین مجموعه را در یک میدان الکتریکی نوسانی فعل (به جای میدان مغناطیسی در مثال ص 78 ، NMR)

قرار دهیم، چون NH_3 دوقطبی الکتریکی دارد، یک هامیلتونی به شکل (1) ص 75 خواهد گرفت که $\vec{E}$ به عنوان

نیروی driven ، انرژی را تامین می‌کند و طی هم flip به انرژی پایین‌تر یک موج میکرو به ما می‌دهد.

جزئیات بیشتر در ص 344 کتاب

– سیستم‌ها (هامیلتونی‌های) وابسته به زمان بحرانی

+ سیستم‌های خیلی سریع ، تقریب ناگهانی

• مفروض است سیستمی که تا t_0 با $H(t)$ تحول می‌یابد و به طور ناگهانی (پله‌ای) در t_0 به $\tilde{H}(t)$ تغییر می‌یابد.

نخست می‌توان ویژه حالت و ویژه مقادیر $H(t)$ را در $t<t_0$ و $\tilde{H}(t)$ را در $t>t_0$ تعیین کرد:

$$H(t)|n\rangle = E_n|n\rangle \ , \quad t<t_0 \quad ; \quad \tilde{H}(t)|\tilde{n}\rangle = \tilde{E}_{\tilde{n}}|\tilde{n}\rangle \ , \quad t>t_0 \qquad (0)$$

حال در صورتی که شرایط اولیه در $t_0'(<t_0)$ به صورت $|\alpha, t_0'\rangle$ معلوم باشد می‌توان بر حسب ویژه حالات $H(t)$ بسط داد و ضرایب بسط را c_n خواند:

$$|\alpha,t_0'\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \qquad (1)$$

بنابراین در بازه‌ی $t_0'<t<t_0$ می‌توان تحول حالت را با معادله‌ی تحول وابسته به زمان شرودینگر تعیین کرد:

$$|\alpha,t_0';t\rangle = \sum_n c_n e^{iE_n(t-t_0')/\hbar}|n\rangle \ , \quad t_0'<t<t_0 \qquad (2)$$

در t_0، هامیلتونی تغییر می‌کند و با داشتن $|\alpha,t_0';t_0\rangle$ به عنوان شرایط اولیه، $|\tilde{\alpha},t_0\rangle$ می‌توان آن را بر حسب ویژه حالات $\tilde{H}(t)$ بسط داد و ضرایب بسط را $\tilde{c}_n$ خواند (توجه شود که c_nها با توجه به شرایط اولیه مسأله در (1) معلوم شده‌اند)

$$|\tilde{\alpha},t_0\rangle = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_{\tilde{n}}|\tilde{n}\rangle \qquad (3)$$

$$|\alpha,t_0';t_0\rangle = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_{\tilde{n}}|\tilde{n}\rangle$$

$$\sum_n c_n e^{-iE_n(t_0-t_0')}|n\rangle = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_{\tilde{n}}|\tilde{n}\rangle$$

بنابراین در بازه‌ی $t \geq t_0$ تحول حالت را با معادله‌ی تحول وابسته به زمان شرودینگر تعیین کرد:

$$|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_n \, e^{-i\tilde{E}_{\tilde{n}}(t-t_0)/\hbar} \, |\tilde{n}\rangle \quad , \; t \geq t_0 \qquad (6)$$

• توجه شود که درون حالت، انرژی پایسته می‌ماند.

* انبساط چاه پتانسیل یک‌بعدی ناگهانی:

مفروض است چاه پتانسیل $V(x)=\begin{cases} 0 ; & -\frac{a}{2}<x<\frac{a}{2} \\ \infty ; & other \end{cases}$ تا t_0 و در t_0 به $\tilde{V}(x)=\begin{cases} 0 ; & -a<x<a \\ \infty ; & other \end{cases}$ تغییر می‌یابد.

⓪ ویژه توابع و مقادیر ویژه‌ی V و $\tilde{V}(x)$ در بازه‌ی زمانی‌شان به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\langle x|n\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) ; & n=1,3,\dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) ; & n=2,4,\dots \end{cases} \quad , \; E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \quad ; \; t<t_0$$

$$\langle x|\tilde{n}\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{2a}} \cos\left(\frac{\tilde{n}\pi x}{2a}\right) ; & n=1,3,\dots \\ \sqrt{\frac{2}{2a}} \sin\left(\frac{\tilde{n}\pi x}{a}\right) ; & n=2,4,\dots \end{cases} \quad , \; E_{\tilde{n}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\tilde{n}\pi}{2a}\right)^2 \quad ; \; t>t_0$$

① حال اگر در حالت اولیه $t_0'=0$، $\langle x|\alpha,0\rangle = \langle x|1\rangle$ باشد:

$$\langle x|\alpha, t_0'=0\rangle = \sum_n c_n \langle x|n\rangle$$

$$\langle x|1\rangle = \sum_n c_n \langle x|n\rangle$$

واضح است که به c_n ، $c_1=1$ و باقی ضرایب صفر خواهند بود.

② بنابراین تحول حالت در بازه‌ی $t_0'<t<t_0$ به صورت زیر می‌شود:

$$\langle x|\alpha, 0; t\rangle = \sum_n c_n \, e^{-iE_n(t)/\hbar} \langle x|n\rangle \quad ; \; t_0'<t<t$$

$$= e^{-iE_1 t/\hbar} \langle x|1\rangle \quad ; \; t_0'<t<t$$

$$= e^{-i\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}\right)t/\hbar} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \quad ; \; t_0'<t<t$$

③ حال اگر در $t_0=0$ هامیلتونی تغییر کند با دانستن $|\alpha, t_0'=0; t_0=0\rangle$ به عنوان شرایط اولیه $|\tilde{\alpha}, t_0=0\rangle$ را می‌توان

آن را بر حسب ویژه‌حالت‌های $\tilde{H}(x)$ بسط داد و ضرایب $\tilde{c}_{\tilde{n}}$ را بدانیم از ③ داریم:

$$\sum_n c_n e^{iE_n(t_0-t_0')} \langle x|n\rangle = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_{\tilde{n}} \langle x|\tilde{n}\rangle$$

$$\langle x|1\rangle = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_{\tilde{n}} \langle x|\tilde{n}\rangle \qquad (۴)$$

$$\begin{Bmatrix} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right); & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & ; \text{other} \end{Bmatrix} = \sum_{\tilde{n}} \tilde{c}_{\tilde{n}} \langle x|\tilde{n}\rangle$$

با توجه به اینکه سمت چپ تابعی زوج است انتظار داریم بسط آن نیز بر حسب توابع زوج باشد لذا $\tilde{n}$ های زوج

معنادار خواهند بود تا صرفاً توابع زوج در کار بیایند.

$$\begin{Bmatrix} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) ; & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & ; \text{other} \end{Bmatrix} = \sum_{\substack{\tilde{n} \\ \text{زوج}}} \tilde{c}_{\tilde{n}} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\tilde{n}\pi}{2a} x\right) \qquad (۱۱)$$

حال می‌توان $\tilde{c}_{\tilde{n}}$ را به صورت زیر حساب کرد:

با ضرب طرفین (۴) در $\langle \tilde{n}|x\rangle$:

$$\tilde{c}_{\tilde{n}} = \int_{-a}^{a} \langle x|\tilde{n}\rangle^* \langle x|1\rangle \, dx$$

با توجه به (۱۱) می‌توان نوشت با $\tilde{n}$ زوج:

$$\tilde{c}_{\tilde{n}} = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left\{\frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\tilde{n}\pi}{2a} x\right)\right\}^* \left\{\sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right)\right\} dx$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left\{ \cos\left(\frac{(\tilde{n}+2)\pi}{2a} x\right) + \cos\left(\frac{(\tilde{n}-2)\pi}{2a} x\right) \right\} \qquad ; \tilde{n} \text{ زوج}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2a} \left\{ \frac{2a}{(\tilde{n}+2)\pi} \sin\left[\frac{(\tilde{n}+2)\pi}{2a} x\right] + \frac{2a}{(\tilde{n}-2)\pi} \sin\left[\frac{(\tilde{n}-2)\pi}{2a} x\right] \right\}_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \qquad ; \tilde{n} \text{ زوج}$$

$$\tilde{C}_{\tilde n} = \frac{4\sqrt{2}}{2\pi}\left\{\frac{1}{\tilde n+2}\sin\left(\frac{\tilde n+2}{4}\pi\right) + \frac{1}{\tilde n-2}\sin\left(\frac{\tilde n-2}{4}\pi\right)\right\} \quad ; \tilde n \ \text{زوج}$$

$$= \frac{4\sqrt{2}}{2\pi}\left[\frac{1}{\tilde n+2} - \frac{1}{\tilde n-2}\right]\cos\left(\frac{\tilde n\pi}{4}\right) \quad ; \tilde n \ \text{زوج}$$

$$= \frac{2\sqrt{2}}{\pi}\ \frac{\tilde n-2-(\tilde n+2)}{\tilde n^2-4}\cos\left(\frac{\tilde n\pi}{4}\right) \quad ; \tilde n \ \text{زوج}$$

$$= -\frac{8\sqrt{2}}{\pi}\ \frac{1}{\tilde n^2-4}\cos\left(\frac{\tilde n\pi}{4}\right) \quad ; \tilde n \ \text{زوج}$$

④ بنابراین تحول حالت در بازه‌ی $t_0'' < t < t_0$ به صورت زیر است:

$$\langle x|\tilde\alpha, 0; t\rangle = \sum_{\tilde n} \tilde C_{\tilde n}\, e^{-i\tilde E_{\tilde n}(t)/\hbar}\ \langle x|\tilde n\rangle$$

$$= \sum_{\tilde n,\ \text{زوج}} \left\{-\frac{8\sqrt{2}}{\pi}\frac{1}{\tilde n^2-4}\cos\left(\frac{\tilde n\pi}{4}\right)\right\} e^{-i\tilde E_{\tilde n}t/\hbar}\ \langle x|\tilde n\rangle$$

$$= \sum_{\tilde n,\ \text{زوج}} \left[-\frac{8\sqrt{2}}{\pi}\frac{1}{\tilde n^2-4}\cos\left(\frac{\tilde n\pi}{4}\right)\right\} e^{-\frac{it}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi\tilde n}{2a}\right)^2}\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{\tilde n\pi}{2a}x\right)$$

+ سیستم های خیلی آهسته: تقریب بی دررو

• تقریب بی دررو: مفروض است سیستمی که در t_i، با H_i تحول یابد و به آرامی تغییر کرده تا در t_f، H_f بشود.

(توجه شود هیچ الزامی به کوچک بودن مقدار $H_f - H_i$ وجود ندارد، صرفاً باید کند باشد تغییرات)

در این صورت اگر حالتی در n امین ویژه حالت H_i باشد، در مقاطع زمانی بعدی نیز در n امین ویژه حالت H زمان خود باقی مانده و نهایتاً به n امین ویژه حالت H_f خواهد رسید، جدا از یک عامل فاز (این فاز دینامیکی و یکی هندسی)

$$|\alpha^{(n)};t\rangle = e^{i\gamma_n(t)}\, e^{i\theta_n(t)}\, |n;t\rangle \qquad (5)$$

که در آن فاز دینامیکی و هندسی به صورت ذیل اند:

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,dt' \quad \text{و} \quad \gamma_n(t) = i\int_0^t \langle n;t'|\frac{\partial}{\partial t'}|n;t'\rangle\, dt' \qquad (6)$$

* برای اثبات این قضیه در هر مقطع زمانی، معادله ویژه توابع و مقادیر $H(t)$ را نوشت:

$$H(t)|n;t\rangle = E_n(t)\,|n;t\rangle \qquad (7)$$

و البته در هر مقطع زمانی ویژه حالت $H(t)$ با معادله شرودینگر وابسته به زمان تحول می‌یابد:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha;t\rangle = H(t)|\alpha;t\rangle \qquad (8)$$

حالت تحول یافته را نیز می‌توان در ویژه حالت های $H(t)$ که در آن مقطع زمانی کامل اند بسط داد و برای سادگی محاسبات

در ادامه، عامل فاز دینامیکی را جداگانه از ضرایب بسط می‌نویسیم:

$$|\alpha;t\rangle = \sum_n c_n(t)\, e^{i\theta_n(t)}|n;t\rangle \;;\quad \theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,dt' \qquad (9)$$

حال با جایگذاری (9) در (8) می‌توان نوشت :

$$i\hbar \sum_n \{\dot{c}_n |n;t\rangle + c_n |\dot{n};t\rangle + i c_n |n;t\rangle \dot{\theta}_n\} e^{i\theta_n} = \sum_n c_n (H|n;t\rangle) e^{i\theta_n} \qquad (10)$$

با توجه به اینکه $\dot{\theta}_n = -\frac{1}{\hbar}E_n$ است و سمت راست نیز $H|n;t\rangle$ ، $E_n|n;t\rangle$ می‌شود با حذف آخرین جمله سمت چپ ساده می‌شود.

حال اگر از چپ در $\langle m;t|$ که ویژه حالت $H(t)$ باشد ضرب کنیم با توجه به شرط تعامد خواهیم داشت:

$$\dot{c}_m(t) = -\sum_n c_n(t) \langle m|\dot{n}\rangle e^{i(\theta_n-\theta_m)}$$

$$= -c_m(t)\langle m|\dot{m}\rangle - \sum_{n\neq m} c_n(t) \langle m|\dot{n}\rangle e^{i(\theta_n-\theta_m)} \qquad (11)$$

از سوی دیگر اگر از (7) مشتق بگیریم:

$$\dot{H}|n\rangle + H|\dot{n}\rangle = \dot{E}_n|n\rangle + E_n|\dot{n}\rangle \qquad (12)$$

با ضرب از چپ در $\langle m;t|$:

$$\langle m|\dot{H}|n\rangle + \underbrace{\langle m|H}_{=E_m\langle m|}|\dot{n}\rangle = \dot{E}_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} + E_n\langle m|\dot{n}\rangle \qquad (13)$$

عبارت فوق در صورتی که $m=n$ باشد:

$$\langle n|\dot{H}|m\rangle = \dot{E}_n(t) \qquad (14)\ \text{الف}$$

در صورتی که $m\neq n$ باشد اما تبهگن باشد ($E_n=E_m$):

$$\langle n|\dot{H}|m\rangle = 0 \qquad (14)\ \text{ب}$$

در صورتی که $m\neq n$ باشد اما تبهگن نباشد ($E_n\neq E_m$):

$$\langle n|\dot{H}|m\rangle = (E_n-E_m)\langle m|\dot{n}\rangle \qquad (14)\ \text{ج}$$

لذا از (11) که انرژی ها تبهگن نباشد می‌توان از (14) جایگذاری مقدار $\langle m|\dot n\rangle$ را:

$$\dot c_m(t) = -c_m(t)\langle m|\dot m\rangle - \sum_{n\neq m} c_n(t)\,\frac{\langle m|\dot H|n\rangle}{E_n-E_m}\, e^{i(\theta_n-\theta_m)} \qquad (15)$$

حال در صورتی که تغییرات سیستم (هامیلتونی) بسیار کند باشد می‌توان تقریب بی‌دررو زد و از جمله دوم صرف نظر کرد:

$$\dot c_m(t) \simeq -c_m(t)\langle m|\dot m\rangle \qquad (16)$$

که در واقع پاسخ معادله فوق به صورت زیر می‌باشد:

$$c_m(t) = e^{i\gamma_m(t)}\, c_m(0) \quad ; \quad \gamma(t) = i\int_0^t \langle m;t'|\frac{\partial}{\partial t'}|m;t'\rangle\, dt' \qquad (17)$$

حال با ترکیب (17) و (9) می‌توان نوشت: در صورتی که در حالت اولیه در n امین ویژه حالت باشد $c_n(0)=1$:

$$|\alpha,t\rangle = e^{i\gamma_n(t)}\, e^{i\theta_n(t)}\, |n;t\rangle$$

• توجه شود که γ_n مقدار حقیقی دارد.

* چرا که مشتق زمانی $\langle m;t|m;t\rangle$ صفر باشد به علت تعامد، بنابراین می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle m;t|m;t\rangle = 0$$

$$\langle \dot m;t|m;t\rangle + \langle m;t|\dot m;t\rangle = 0$$

$$2\,\mathrm{Re}\left(\langle m;t|\dot m;t\rangle\right) = 0$$

یعنی قسمت حقیقی $\langle m;t|\dot m;t\rangle$ صفر بوده و تنها دارای بخش موهومی است که چون در (17) یک i ضرب می‌شود حقیقی می‌شود.

• در صورتی که هیچ وابستگی زمانی نداشته باشیم $a(t)=a$ و $c_n(t)=c_n(0)$ می‌شود و لذا همانند قبل به دست می‌آید.

تحول زمانی که داشتیم.

• علی الاصول تقریب بی‌درو قابل تعمیم می‌باشد به حالت های ~~غیر پایه ای یعنی آنهایی که در لحظه ابتدایی در ترکیب~~

ترکیب خطی فاز ~~قرار گیرد~~ یعنی ترکیب خطی بعد از تحول در هر مقطع زمانی من جمله لحظه نهایی ثابت بماند.

• در عامل فاز ظاهر شده در حالت ها به طور دقیق (و البته تفکیک از هم شده) همانند مورد 5 ص 82 HQMI

قابل دیدن هستند با استفاده از تداخل سنج ها.

• لازم به ذکر می باشد که در اینجا انرژی پایه صفر می باشد.

* مثال: گذار چاه پتانسیل بی‌نهایتی (ناگهانی) مفروض است که در لحظه اولیه در حالت پایه قرار دارد:

$$\langle x|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

حال اگر به آرامی دیوار راست را به $2a$ ببریم طبق تقریب بی‌درو در هر لحظه را هم حالت پایه‌ها و بیشتر به پایان

خواهیم رسید:

$$\langle x|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{a}}\,\sin\left(\frac{\pi}{2a}x\right)$$

و البته در هر مقطع زمانی در حالت پایه خواهد ماند.

• فاز هندسی یا فاز بری — برای هامیلتونی یک سیستم با $H(t)$ که در آن پارامترهای وابسته به زمان $R_1(t)R_2(t)\dots R_n(t)$

مشابه شده، به صورت بی دررو با زمان تغییر کرده در فضای پارامترها مسیر را بعد از زمان T برگردد، تغییر

فاز هندسی نهایی به صورت زیر خواهد بود:

$$\gamma_n(C) = i\oint \langle n;t|[\vec{\nabla}_{\vec{R}}|n;t\rangle] \cdot d\vec{R} \qquad (18)$$

که در آن $\vec{R} = (R_1, R_2, \dots, R_n)$ بوده و $\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ نیز گرادیان نسبت به این پارامترهاست.

* برای نشان دادن این که در ⑤ فاز هندسی، وابستگی زمانی H را در پارامترهای $\vec{R}$ در نظر بگیریم می‌توان نوشت بعد از

زمان T که یک دور زده‌اند و معادله $H(t)$ به شکل قبل درآمده:

$$\gamma_n(T) = i\int_0^T \langle n;t|[\vec{\nabla}_{\vec{R}}|n;t\rangle] \cdot \frac{d\vec{R}}{dt}\, dt$$

$$= i\int_{R(0)}^{R(T)} \langle n;t|[\vec{\nabla}_{\vec{R}}|n;t\rangle] \cdot d\vec{R}$$

با توجه به اینکه در T، یک دور زده، $R(0)=R(T)$، لذا به نتیجه‌ی مطلوب می‌رسیم.

• در فضای پارامتری سه بعدی $\vec{R}(t)$، فاز هندسی یا فاز بری (18) به صورت زیر ساده می‌توان نوشت:

$$\gamma_n(C) = i\iint \{\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times [\langle n;t|(\vec{\nabla}_{\vec{R}}|n;t\rangle)]\} \cdot d\vec{a} \qquad (19)\ \text{الف}$$

$$= i\iint \sum_{m\neq n} \frac{\langle n;t|\vec{\nabla}_{\vec{R}} H|m;t\rangle \times \langle m;t|\vec{\nabla}_{\vec{R}}|n;t\rangle}{(E_n-E_m)^2} \cdot d\vec{a} \qquad (19)\ \text{ب}$$

* برای نشان دادن (19) الف کافیست چون ما سمت چپ را از قضیه استوکس در (18) استفاده کنیم.

اما اکنون عبارت زیر انتگرال (19) الف را بازنویسی کنیم:

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \{ \langle n;t | (\vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle \} = (\vec{\nabla}_{\vec{R}} \langle n;t |) \times (\vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle) + \underbrace{\langle n;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle}_{0}$$

با فرض بهنجاربودن n

$$= \sum_{m \neq n} (\vec{\nabla}_{\vec{R}} \langle n;t |) | m;t \rangle \times \langle m;t | (\vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle) \qquad (I)$$

در عبارت بالا یک جمله صفر اضافه کرده‌ایم ولی با توجه به اینکه اگر n=m باشد، سمت چپ ضرب خارجی صفر می‌شود این مورد را از جمع خارج کرده‌ایم.

از سوی دیگر اگر از دو طرف معادله ویژه‌مقداری H(t) در یک مقطع زمانی گرادیان بگیریم داریم:

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}} \{ H[\vec{R}(t)] | n[\vec{R}(t)] \rangle \} = \vec{\nabla}_{\vec{R}} \{ E_n[\vec{R}(t)] | n[\vec{R}(t)] \rangle \}$$

با ضرب کردن از چپ در $\langle m;t|$:

$$\langle m;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} H | n;t \rangle + \langle m;t | H \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle = \langle m;t | \vec{\nabla} E_n | n;t \rangle + E_n \langle m;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle$$

$$\langle m;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} H | n;t \rangle = (E_n - E_m) \langle m;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle + \vec{\nabla}_{R} E \, \delta_{nm}$$

به عبارتی می‌توان نوشت برای $n \neq m$:

$$\langle m;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n;t \rangle = \frac{\langle m;t | \vec{\nabla}_{\vec{R}} H | n;t \rangle}{E_n - E_m} \qquad (A)$$

لذا با جایگذاری (A) در (I) می‌توان به نتیجه مطلوب رسید.

• هولونومیک: به سامانه‌هایی که اگر به دور یک مسیر بسته (در فضای پارامتر C) تراabr کنند به حالت اولیه بازگردد گوییم و البته اگر برنگردد غیرهولونومیک گفته می‌شود.

* در مثال ص ۵۵ اگر چاه پتانسیل ابتدا به آرامی گسترش یابد سپس کاهش یابد و به نقطه اولیه برسد، می‌توان فاز بری را با در نظر گرفتن این که $R(t)$، پهنای چاه می‌باشد، می‌توان حساب کرد که چون $R_i = R_f$ است:

$$\gamma_n(C) = 0$$

لذا می‌توان گفت بنابراین سیستم هولونومیک می‌باشد.

* سامانه‌ی اسپین $\frac{1}{2}$ در یک میدان مغناطیسی $\vec{B}(t) = B_0\,\hat{n}(t)$ مفروض است که $\hat{n} = \hat{n}(t)$ به آرامی تغییر می‌کند.

هامیلتونی چنین سامانه‌ای به صورت ص ۲ AQM می‌باشد:

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}(t)$$

که در آن $\vec{\mu} = \frac{-ge}{2m_e c}\vec{S}$ می‌باشد یا می‌توان با تعریف مگنتون بور $\mu_0 = \frac{-ge}{4m_e c}$ به صورت زیر نوشت:

$$H = -\mu_0\left(\frac{2\vec{S}}{\hbar}\right)\cdot\vec{B}(t)$$

حال به صورتی که $\hat{n} = \hat{n}(t)$ به صورتی حرکت کند که بعد از زمان T مجدداً به حالت اول برگردد، با در نظر گرفتن $\vec{R}(t) = \vec{B}(t)$، می‌توان فاز بری را محاسبه نمود.

به هر حال این مورد میتوان از (11) استفاده کرد چرا که فضای پارامتری ما سه بعدی است که در آن رابطه

پایه های ما با پایه های $H(t)$ لحظه ای برابر شدند:

$$H[\vec B(t)]\,|n[\vec B(t)]\rangle = E_n[\vec B(t)]\,|n[\vec B(t)]\rangle$$

که با اپراتور H میتوان نوشت، البته مشابه تمرین 1.11 میتوان حالت های $|\vec S.\hat n;\pm\rangle$ را در دست نوشت و مقادیر آن را داریم:

$$-\mu_0\frac{2}{\hbar}B_0\hat n(t).\vec S\,|\vec S.\hat n;\pm\rangle = -\mu_0\frac{2}{\hbar}B_0\left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)|\vec S.\hat n;\pm\rangle$$
$$= E_\pm\,|\vec S.\hat n;\pm\rangle\ ;\quad E_\pm = -\mu_0\frac{2}{\hbar}B\left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)$$

لذا با توجه به اینکه $\vec\nabla_B H = -\mu_0\frac{2}{\hbar}\vec S$، میتوان (19) ب را نوشت:

$$\gamma_\pm(c) = i\int \frac{1}{(E_+-E_-)^2}\langle \vec S.\hat n;\pm|-\frac{2\mu_0\vec S}{\hbar}|\vec S.\hat n;\mp\rangle\times\langle\vec S.\hat n;\mp|-\frac{2\mu_0\vec S}{\hbar}|\vec S.\hat n;\pm\rangle$$

$$= i\int\frac{1}{4\mu_0^2B_0^2(t)}\langle\vec S.\hat n\pm|-\frac{2\mu_0}{\hbar}\vec S|\vec S.\hat n;\mp\rangle\times\langle\vec S.\hat n\pm|-\frac{2\mu_0\vec S}{\hbar}|\vec S.\hat n;\mp\rangle^*$$

با توجه به اینکه $\vec S = \frac12(S_+ + S_-)\hat x + \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)\hat y + S_z\hat z$ میتوان آن را در $|\vec S.\hat z;\pm\rangle$ با محاسبه کرد با استفاده از $\langle\pm|S|\mp\rangle = \frac{\hbar}{2}(\hat x\mp i\hat y)$

میتوان به دست آورد. عبارت زیر انتگرال برابر میشود $\mp\frac{\hat z}{2B_0^2(t)}$ به همین سوال تعمیم به $\hat n$ در دست داده و به دست میآوریم:

$$\gamma_\pm(t) = \mp\frac12\int\frac{\hat n.d\vec a}{B_0^2(t)}$$
$$= \mp\frac12\,\Omega$$

- نظریه اختلال وابسته به زمان

• در ص 74 برای سیستمی به صورت $H(t)=H_0+V(t)$ که $H_0|n\rangle=E_n|n\rangle$ باشد، تحول حالت را با شرایط اولیه $|\alpha,t_0\rangle$

به صورت زیر به دست آوردیم:

$$|\alpha,t_0;t\rangle^I=\sum_n c_n(t)\,|n\rangle \qquad (1)$$

که در آن تحول $c_n(t)$ با $\omega_{nm}=-\omega_{mn}=\frac{E_n-E_m}{\hbar}$ به صورت زیر می‌باشد:

$$i\hbar\,\dot{c}_n(t)=\sum_m e^{i\omega_{nm}(t-t_0)}\,V(t)_{nm}\,c_m(t) \qquad (2)$$

اگر بخواهیم طبق معادلات فوق $c_n(t)$ مربوط به $|\alpha,t_0;t\rangle$ در $|n\rangle$ (ویژه حالت H_0) را بیابیم، معمولا بسیار

دشوار است به علت داشتن معادلات تحول جفت شده، بخصوص برای سیستم‌های با ترازهای زیاد.

اما با داشتن شرط $V(t)\ll 0$، می‌توان با بسط اختلالی $c_n(t)$ به صورت زیر به دست آورد:

$$c_n(t)=c_n^{(0)}+c_n^{(1)}+c_n^{(2)}+\cdots \qquad (3)$$

$$c_n^{(0)}(t)=\langle n|\alpha,t_0;t_0\rangle \qquad \text{(4 الف)}$$

$$c_n^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\langle n|V_I(t')|\alpha,t_0;t_0\rangle \qquad \text{(4 ب)}$$

در صورتی که $|\alpha,t_0;t_0\rangle=|i\rangle$ ویژه حالت H_0 باشد:

$$c_n^{(0)}(t)=\delta_{ni} \qquad \text{(5 الف)}$$

$$c_n^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,e^{i\omega_{ni}(t'-t_0)}\,V_{ni}(t') \qquad \text{(5 ب)}$$

$$c_n^{(2)}(t)=\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_m\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\,e^{i\omega_{nm}(t'-t_0)}\,V_{nm}(t')\,e^{i\omega_{mi}(t''-t_0)}\,V_{mi}(t'') \qquad \text{(5 ج)}$$

* برای نشان دادن این مطلب می‌توان از ③ در ② استفاده کرد و عبارات را به دست آورد

* رهیافت دیگر استفاده از رابطه ② الف ص 73 است که برای حالت اولیه $|\alpha,t_0;t_0\rangle=|i\rangle$ که ویژه حالت

H_0 در نظر گرفته شد می‌توان نوشت:

$$|i,t_0;t\rangle_I = U_{int}(t,t_0)|i\rangle$$

همچنین از معادله ① داریم:

$$|i,t_0;t\rangle_I = \sum c_n(t)\,|n\rangle$$

با ضرب طرفین معادله فوق به $\langle n|$ می‌توان گفت چون سمت چپ معادلات برابر می‌شوند، سمت چپ نیز برابر می‌شود:

$$c_n(t) = \langle n|U_{int}(t,t_0)|i\rangle \qquad (✻)$$

حال با توجه به تعریف U_{int} از ③ 2 ص 73 یا مشابه ص 46 AQM I می‌توان بسط داد:

$$U_{int}(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\, T\left[H_{int}(t_1)H_{int}(t_2)\cdots H_{int}(t_n)\right]$$

که چون $H_{int}=V$ می‌باشد در (✻) عبارت فوق و ② را جایگذاری می‌کنیم:

$$c_n^{(0)}(t)+c_n^{(1)}(t)+c_n^{(2)}(t)+\cdots = \langle n|\,\mathbb{1}-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1}dt_1\,V_I(t_1)+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\,V_I(t_1)V(t_2)+\cdots|i\rangle$$

که می‌توان مراتب مختلف را از عبارت فوق خواند.

• احتمال گذار، از حالت $|i\rangle$ به $|n\rangle$ که هر دو ویژه حالت H_0 در سیستم مذکور هستند نیز با توجه به ① به صورت

زیر می‌باشد که از ضرب در $\langle n|$ و به توان رساندن حاصل شده:

$$|\langle n|i,t_0;t_0\rangle|^2 = |c_n(t)|^2 = |c_n^{(0)}(t)+c_n^{(1)}(t)+\cdots|^2 \qquad (6)$$

* پتانسیل اختلالی وابسته به زمان ثابت پله‌ای — به‌ازای فرمول ۲۰۸۵–۵ ساکورای

مفروض است سامانه‌ای با هامیلتونی $H(t)=H_0+V(t)$ که در آن $V(t)=\begin{cases}0 & ; t<0 \\ V & t\geq 0\end{cases}$ به طوری که $V \ll 0$ باشد.

در صورتی که حالت اولیهٔ سامانه، حالت ویژهٔ H_0، $|\alpha,t_0;t_0\rangle=|i\rangle$ باشد؛ تحول چنین سامانه‌ای با ① داده می‌شود

که در آن چون V کوچک است، c_nها به روش اختلالی ③ می‌توان نوشت تا مرتبهٔ اول ($t_0=0$):

$$c_n^{(0)}(t)=\delta_{ni}$$

$$c_n^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'}\,V_{ni}(t')\,dt'$$

$$=-\frac{i}{\hbar}V_{ni}\,\frac{e^{i\omega_{ni}t}-1}{i\omega_{ni}} \qquad =\frac{1}{\hbar}V_{ni}\,\frac{1-e^{i\omega_{ni}t}}{\omega_{ni}} \qquad (8)$$

$$=-i\,\frac{e^{i\omega_{ni}t/2}}{\hbar}V_{ni}\,\frac{\sin(\omega_{ni}t/2)}{\omega_{ni}/2}$$

$$=-ie^{i\omega_{ni}t/2}\,V_{ni}\,\frac{\sin[(E_n-E_i)t/2\hbar]}{(E_n-E_i)/2}$$

بنابراین طبق ⑤ احتمال گذار از تراز انرژی E_i به تراز انرژی E_n در زمان t به صورت ذیل است تا مرتبهٔ اول:

$$P_{i\to n}(t)=\left|c_n^{(0)}(t)+c_n^{(1)}(t)+\dots\right|^2$$

$$=\frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\,\frac{\sin^2[(E_n-E_i)t/2\hbar]}{[(E_n-E_i)/2\hbar]^2}\,\frac{t}{t} \qquad (\cancel{t})$$

توجه شود که عبارت فوق به حالت تبهگنی نیز صادق است و حالت به صورت $\frac{1}{\hbar^2}|V_{ni}|^2t^2$ ظاهر می‌شود.

در صورتی که فرصت زیادی به سامانه بدهیم احتمال گذار از i به n به صورت زیر می‌شود با توجه به (۶):

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

$$=\frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\,\pi\,2\hbar\,\delta(E_n-E_i)\,t$$

$$=\frac{2\pi}{\hbar}\,|V_{ni}|^2\,\delta(E_n-E_i)\,t \qquad =\frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\delta(\hbar\omega_{ni})t \qquad \boxed{10}$$

توجه شود عبارت فوق به حالت تبهگنی حساس نیست.

احتمال گذار (به همه‌ی حالت‌های ممکن) بعد از زمان t از حالت i نیز به صورت زیر می‌باشد با توجه به (*)

$$P_{i\to[n]}(t)=\sum_{n,E_n\approx E_i}|c_n^{(1)}(t)|^2+\sum_{n,E_n\neq E_i}|c_n^{(1)}(t)|^2 \qquad (\Delta)$$

$$=\sum_{n,E_n\approx E_i}\frac{1}{\hbar^2}|V_{ni}|^2t^2+\sum_{n,E_n\neq E_i}\frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2[(E_n-E_i)t/2\hbar]}{[(E_n-E_i)/2\hbar]^2}$$

احتمال گذار بعد از زمان $t\to\infty$ نیز از حالت i به صورت زیر قابل محاسبه است با توجه به (□) و (Δ) با $\frac{1}{\hbar}$ حالت‌های $n\to i$ که دارای انرژی‌های متفاوت هستند سهم نمی‌دهند و [illegible] (□) به حوالی $E_n\approx E_i$ ها سهم می‌دهند که اگر یک فضای حالت به حالت‌هایی که در بازه‌ی انرژی $(E_i-\frac{\Delta E_i}{2},E_i+\frac{\Delta E_i}{2})$ قرار دارند به شکل $\rho(E)dE$ تعریف کنیم:

$$P_{i\to[n]}(t\to\infty)=\lim_{t\to\infty}\left\{\int_{E_i-\Delta E_i/2}^{E_i+\Delta E_i/2}dE_n\,\rho(E_n)|c_n^{(1)}(t)|^2+\sum_{n,E_n\neq E_i}|c_n^{(1)}|^2\right\}$$

$$=\int dE_n\,\rho(E_n)\left\{\frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\delta(E_n-E_i)t\right\}+\sum_{n,E_n\neq E_i}\frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\delta(E_n-E_i)$$

$$=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\,\rho(E_n)\,t\Big|_{E_n=E_i}+0 \qquad (□)$$

نرخ گذار را که به «قاعده‌ی طلایی فرمی» معروف است را بعد از زمان $t\to\infty$ از حالت i نیز به صورت زیر می‌شود:

$$W_{i\to[n]}(t\to\infty)=\frac{d}{dt}P_{i\to[n]}(t\to\infty)$$

$$=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\,\rho(E_n)_{E_n=E_i} \qquad (\otimes)$$

* پتانسیل اختلالی وابسته به زمان به ازای هماهنگ.

مفروض است سامانه‌ای با هامیلتونی $H(t)=H_0+V(t)$ که در آن $V(t)=\begin{cases}\mathcal{V}e^{i\omega t}+\mathcal{V}^{+}e^{-i\omega t} & ; t>0\\ 0 & ; t\leq 0\end{cases}$ می‌باشد.

در صورتی که حالت اولیه سامانه در حالت ویژه H_0 قرار داشته باشد: $|\alpha,t_0=0;t_0\rangle=|i\rangle$. تحول زمانی سامانه با ① داده می‌شود که در آن چون V کوچک باشد، c_n ها به روش اختلالی ⑤ می‌توان نوشت تا مرتبه اول:

$$c_n^{(0)}=\delta_{ni}$$

$$c_n^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(\mathcal{V}_{ni}e^{i\omega t'}+\mathcal{V}^{+}_{ni}e^{-i\omega t'}\right)e^{i\omega_{ni}t'}\,dt'$$

$$=\frac{1}{\hbar}\left\{\mathcal{V}_{ni}\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{ni})t}}{\omega+\omega_{ni}}+\mathcal{V}^{+}_{ni}\frac{1-e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{-\omega+\omega_{ni}}\right\}$$

با توجه به ص ۹۵ این همان شکل قبلی است فقط $\omega_{ni}\to\omega_{ni}\pm\omega$ شده و $V_{ni}\to\mathcal{V}_{ni}^{(+)}$ می‌باشد.

لذا با لحاظ $\omega_{ni}\to\omega_{ni}\pm\omega$ از روی ص ۹۵ می‌توان برای دو جمله $c_n^{(1)}$ مسأله را به طور جداگانه نوشت:

$$P_{i\to n}(t\to\infty)=\frac{2\pi}{\hbar}\begin{Bmatrix}|\mathcal{V}_{ni}|^2\\|\mathcal{V}^{+}_{ni}|^2\end{Bmatrix}\delta(E_n-E_i\pm\hbar\omega)\,t$$

یا به عبارتی:

$$W_{i\to n}(t\to\infty)=\frac{2\pi}{\hbar}\begin{Bmatrix}|\mathcal{V}_{ni}|^2\\|\mathcal{V}^{+}_{ni}|^2\end{Bmatrix}\delta(E_n-E_i\pm\hbar\omega)$$

همین‌طور احتمال و نرخ گذار، با لحاظ میل موارد در ص ۹۶ به دست می‌آید:

$$P_{i\to\{n\}}(t\to\infty)=\frac{2\pi}{\hbar}\begin{Bmatrix}\overline{|\mathcal{V}_{ni}|^2}\\\overline{|\mathcal{V}^{+}_{ni}|^2}\end{Bmatrix}\rho(E_n)\,t\Big|_{E_n=E_i\mp\hbar\omega}$$

$$W_{i\to\{n\}}(t\to\infty)=\frac{2\pi}{\hbar}\begin{Bmatrix}\overline{|\mathcal{V}_{ni}|^2}\\\overline{|\mathcal{V}^{+}_{ni}|^2}\end{Bmatrix}\rho(E_n)\Big|_{E_n=E_i\mp\hbar\omega}$$

* توجه شود که می‌توان نوشت :

$$|\mathcal{V}^{+}_{in}|^2 = |\mathcal{V}_{ni}|^2 \quad , \qquad (۵)$$

چراکه می‌توان نوشت :

$$\mathcal{V}^{+}_{in} = \langle i|\mathcal{V}^{+}|n\rangle = \langle n|\mathcal{V}|i\rangle^{*} = \mathcal{V}_{ni}^{*}$$

با برابر قرار دادن (x) و ساده کردن آن به ازای $n \to a[i]$ و با استفاده از (۵) می‌توان عبارت زیر را نوشت که موسوم به موازنه جزئی دقیق می‌باشد :

$$\frac{w_{i \to a[n]}}{P(E_n)} = \frac{w_{n \to a[i]}}{P(E_i)}$$

* جذب و تابش تحریک شده موج الکترومغناطیسی در اتم‌های هیدروژن‌گونه

یک اتم هیدروژن‌گونه که یک پتانسیل برداری سینوسی به صورت ذیل مفروض است:

$$\vec{A}(\vec{x},t) = 2A_0\, \hat{\varepsilon} \cos\left(\frac{\omega}{c}\, \hat{n}\cdot\vec{x} - \omega t\right) \qquad (☺)$$

که در آن $\hat{\varepsilon}$ جهت قطبش، $\hat{n}$ جهت انتشار می‌باشد. $\vec{k} \equiv \frac{\omega}{c}\hat{n}$ نیز تعریف می‌شود.

به آسترین جفت‌اتمی، هامیلتونی ذیل را می‌توان معرفی کرد:

$$H = \frac{1}{2m_e}\left[\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\right]^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

با توجه به ⓐ ص ۶۴:

$$= \frac{1}{2m_e}\left[\vec{P}^2 - \frac{e}{c}2\vec{A}\cdot\vec{P} - \frac{e}{c}(-i\hbar\vec{\nabla}\cdot\vec{A}) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2\right] - \frac{Ze^2}{r}$$

با توجه به پیمانه‌ی کولن ($\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0$) و کوچک بودن $\vec{A}^2$، می‌توان هامیلتونی چنین سامانه‌ای را به صورت زیر نوشت:

$$H = \left(\frac{\vec{P}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{e}{m_e c}\vec{A}\cdot\vec{P}$$

$$= H_0 + V(\vec{x},t)$$

بنابراین چنین سامانه‌ای با H_0 که همان هامیلتونی اتم هیدروژن‌گونه $H_0\psi_{nlm} = \frac{-Z^2e^2}{2n^2a_0}\psi_{nlm}$ که $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ شعاع بور است.

و یک پتانسیل اختلالی وابسته به زمان به صورت $V(\vec{x},t) = \frac{e}{m_e c}\vec{A}\cdot\vec{P}$ بیان می‌شود.

با توجه به $\cos(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t) = \frac{1}{2}\left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega t} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x} + i\omega t}\right]$ می‌توان به پتانسیل برداری مثال (☺) پتانسیل اختلالی را نوشت:

$$V(\vec{x},t) = -\frac{e}{m_e c}A_0\left[e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)}\right]\hat{\varepsilon}\cdot\vec{P}$$

با توصیف $\tilde{V} = -\frac{eA_0}{m_e c} e^{i\vec{k}.\vec{x}} \hat{\varepsilon}.\vec{p}$ ، پتانسیل اختلالی ساده دقیقاً برابر همان مورد مثال قبل ص ۹۷ خواهد شد:

$$V(x,t) = \tilde{V} e^{i\omega t} + \tilde{V}^{+} e^{-i\omega t}$$

که احتمال گذار جذب و گسیل انرژی توسط الکترون به صورت (A) و (B) ص ۹۷ خواهد بود. که به عبارتی نشان‌دهنده جابجا شدن (گذار) الکترون بین ترازها می‌باشد. و چون این (گذار) جذب و گسیل انرژی در معرض تابش الکترومغناطیسی (میدان برداری) انجام می‌شود به جذب و گسیل تحریک شده (موسوم) می‌باشند.

* به عنوان مثال برای جذب انرژی ، با جایگذاری $\tilde{V}$ در (B) ص ۹۷ نرخ گذار به تراز بالاتر به دست می‌آید:

$$w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(-\frac{eA_0}{m_e c}\right)^2 \left|\langle n| e^{i\vec{k}.\vec{x}} \hat{\varepsilon}.\vec{p} |i\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

و البته نرخ جذب انرژی می‌شود:

$$\hbar\omega\, w_{i\to n} = \hbar\omega \frac{2\pi}{\hbar}\left(-\frac{eA_0}{m_e c}\right)^2 \left|\langle n| e^{i\vec{k}.\vec{x}} \hat{\varepsilon}.\vec{p} |i\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

از سوی دیگر از الکترودینامیک شار انرژی الکترومغناطیسی را داریم که برابر مقطع تابشی (ناشی از میدان برداری تبدیل شده) می‌شود.

$$cu = c\,\frac{1}{2}\left(\frac{E_{max}^2}{8\pi} + \frac{B_{max}^2}{8\pi}\right)$$

که با توجه به پتانسیل برداری میدان‌های الکترومغناطیسی قابل محاسبه است:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\partial_t \vec{A} = -\frac{1}{c}(2A_0\omega)\sin\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}.\vec{x} - \omega t\right)\hat{\varepsilon}$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A} = 2A_0 \hat{\varepsilon}\times\frac{\omega}{c}\hat{n}\sin\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}.\vec{x} - \omega t\right)$$

بنابراین شار انرژی تابشی به صورت ذیل میشود:

$$cu = \frac{1}{2\pi}\frac{\omega^2}{c}|A_0|^2 \qquad (D)$$

حال میتوان سطح مقطع جذب را که نسبت انرژی جذب شده به انرژی تابیده شده است حساب کرد:

$$\sigma_{abs} = \frac{\hbar\omega W_{i\to n}}{cu}$$

$$= \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)|\langle n|e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle|^2\,\delta(E_n-E_i-\hbar\omega) \qquad (II)$$

* در عبارت فوق، $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ را میتوان تقریب زد به صورت زیر:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \simeq 1 + i\vec{k}\cdot\vec{r} + \dots$$

چراکه حتی به ازای بزرگترین $\vec{k}$ و $\vec{r}$ که $k_{1s\to 2p}$ و $\vec{R} = \frac{a_0}{\text{atom }Z}$ باشد میتوان دید که:

$$k_{1s\to 2p}\,R_{atom} = \frac{2\pi}{\lambda_{1s\to 2s}}\,\frac{a_0}{Z}$$

که با توجه به $\hbar\omega_{1s\to 2s} = E_2 - E_1$ میتوان $\hbar 2\pi \frac{c}{\lambda_{1s\to 2p}} = \frac{3}{8}\frac{Ze^2}{a_0/Z}$ را داشت، و البته $\lambda_{1s\to 2s}$ را استخراج کرد:

$$k_{1s\to 2p}\,R_{atom} = \frac{3}{8}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)Z$$

$$\simeq \frac{3}{8}\frac{Z}{137} \ll 1$$

بنابراین تا اولین مرتبه‌ی تقریب می‌توان سطح مقطع جذب را بازنویسی کرد:

$$\sigma_{abs} \simeq \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)|\langle n|\hat{\epsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle|^2\,\delta(E_n-E_i-\hbar\omega)$$

حال با توجه به $[\vec{x}, H_0] = [\vec{x}, \frac{\vec{p}^2}{2m_e}-\frac{Ze^2}{r}] = i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}}\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_e}-\frac{Ze^2}{r}\right) = \frac{i\hbar}{m_e}\vec{p}$ می‌توان در $\langle n|\hat{\epsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle$ فوق به جای $\vec{p}$ نوشت:

$$\hat{\epsilon}\cdot\langle n|\vec{p}|i\rangle = \hat{\epsilon}\cdot\langle n|\frac{m_e}{i\hbar}[\vec{x},H_0]|i\rangle = \hat{\epsilon}\cdot\frac{m_e}{i\hbar}\langle n|\vec{x}H_0-H_0\vec{x}|i\rangle = \frac{m_e}{i\hbar}(E_n-E_i)\,\hat{\epsilon}\cdot\langle n|\vec{x}|i\rangle = i m_e\omega_{ni}\,\hat{\epsilon}\cdot\langle n|\vec{x}|i\rangle$$

حال با جایگذاری مقدار عبارت ابتدای صفحه می‌توان به دست آورد که البته توجه شود طبق قاعده‌ی گزینش

باید $|j'-j|=0,1$ (صفر غیرمجاز) و $m'-m=0,\pm1$ باشد:

$$\sigma_{abs} \simeq \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)|i m_e\omega_{ni}\langle n|\hat{\epsilon}\cdot\vec{x}|i\rangle|^2\,\delta(E_n-E_i-\hbar\omega)$$

$$\simeq 4\pi^2\alpha\,\omega_{ni}\,|\langle n|\hat{\epsilon}\cdot\vec{x}|i\rangle|^2\,\delta(\omega_{ni}-\omega)$$

* اثر فوتوالکتریک ؛ جذب تحریک شده در گذار الکترون به حد در اتم هیدروژن گونه

در مثال ص ۹۹ بیان شد چنین جذب تحریک شده توسط میدان الکترومغناطیسی، الکترون از تراز 1s از اتم هیدروژن گونه به سوی دور دست، حد پیوسته می‌شود که به صورت آزاد توصیف می‌شود ، به این پدیده اثر فوتوالکتریک گویند.

در مورد حاضر می‌توان دقیقاً از روابط مثال ص ۹۹ بهره برد، به طوری که (۱) ص ۱۰۱ سطح مقطع جذب را می‌دهد:

$$\sigma_{abs} = \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\,\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left|\langle n|\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\,\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}\,|i\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

یا به عبارتی سطح مقطع دیفرانسیلی که فوتوالکترون‌ها پرتاب شده در جهت $d\Omega$ را به ما می‌دهد با توصیف چگالی حالات نهایی در جهت $d\Omega$ بین E_n و E_n+dE_n ، را که با $\rho(E_n)$ نمایش می‌دهیم، نوشت:

$$d\sigma_{abs} = \int \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\,\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left|\langle n|\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\,\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}\,|i\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)\,\rho(E_n)\,dE_n$$

که در آن i ، حالت اولیه، حالت مقید پوسته است که با تابع موج اتم هیدروژن توصیف می‌شود (با این تفاوت که جای a_0 ، a_0/Z می‌گذاریم تا موارد هیدروژن گونه نیز توصیف شود.

و n ، حالت نهایی، حالت آزاد می‌باشد که با فرض اینکه جعبه‌ای مکعبی به اضلاع L بهنجار شده، به صورت ذیل نوشته می‌شود:

$$\frac{p^2}{2m}|\vec{k}_f\rangle = E_{k_f}|\vec{k}_f\rangle$$

$$\langle \vec{x}|\vec{k}_f\rangle = \frac{e^{i\vec{k}_f\cdot\vec{x}}}{L^{3/2}} \quad ; \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \cong \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{2\pi}{L}\,\vec{n}\right)^2$$

حال می‌خواهیم چگالی حالات نهایی در جهت $d\Omega$ و بین انرژی E_n و E_n+dE_n را بیابیم. برای این منظور،

با داشتن شرایط مرزی دوره‌ای برای حالت نهایی می‌توان نوشت:

$$\langle \vec{x}+N_xL_x\hat{x}+N_yL_y\hat{y}+N_zL_z\hat{z}|\vec{k}_f\rangle = \langle \vec{x}|\vec{k}_f\rangle$$

$$\frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}+\sum_i N_iL_i\hat{i})}}{(L_xL_yL_z)^{\frac{1}{2}}} = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{(L_xL_yL_z)^{\frac{1}{2}}}$$

لذا خواهیم داشت:

$$k_xL_x=2\pi n_x \;;\quad k_yL_y=2\pi n_y \;;\quad k_zL_z=2\pi n_z$$

بنابراین تعداد حالات در حجم به صورت ذیل می‌شود:

$$\text{تعداد حالات در حجم} = \frac{\Delta V_k}{(\frac{2\pi}{L})^3}$$

$$= \frac{L^3}{(2\pi)^3}\,\Delta k_x\,\Delta k_y\,\Delta k_z$$

در مختصات کروی:

$$=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2\,dk$$

حال تعداد حالات در جهت $d\Omega$ می‌شود:

$$d\Omega \text{ تعداد حالات در جهت } =\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2\,dk\,d\Omega_k$$

$$=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\cdot k^2\,\frac{dk}{dE_k}\,dE_k\,d\Omega_k$$

با توجه به اینکه $E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m_e}$؛

$$=\left\{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{m}{\hbar^2}\,k\,dE_k\right\}d\Omega_k$$

که در واقع مقدار داخل آکولاد $\rho(E)$ می‌باشد:

با جایگذاری، در ص 103 می‌توان نوشت:

$$\frac{d\sigma_{abs}}{d\Omega_{k_f}} = \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k_f \left|\langle \vec{k}_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, \hat{\epsilon}\cdot\vec{p} | i\rangle\right|^2$$

توجه شود که در حساب کردن عنصر ماتریس، نمی‌توان از تقریبی که در مثال ص 99 استفاده کردیم بهره برد، چرا که در موارد مانند اکنون به بیرون اتم می‌رود و این مستلزم این است که طول موج بزرگتر از اندازه‌ی اتم باشد. لذا به صورت دقیق‌تر می‌توان نوشت:

$$\langle \vec{k}_f | e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})}\, \hat{\epsilon}\cdot\vec{p} | i\rangle = \hat{\epsilon}\cdot\int d^3x\, \frac{e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{x}}}{L^{3/2}}\, e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})} (-i\hbar\nabla)\left[e^{-Zr/a_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\right].$$

با انتگرال‌گیری جزء به جزء و با توجه به $\hat{\epsilon}\cdot\vec{k}_i=0$ (چرا که پولاریزاسیون عمود بر مسیر حرکت است) و با توجه به سوال 6.6 [5.48] می‌توان نوشت:

$$\frac{d\sigma_{abs}}{d\Omega_{k_f}} = 32 e^2 k_f \frac{(\hat{\epsilon}\cdot\vec{k}_f)^2}{m_e c\,\omega} \frac{Z^5}{a_0^5} \frac{1}{[(Z^2/a_0^2)+q^2]^4}\ ;\quad \vec{q} \equiv \vec{k}_f - \left(\frac{\omega}{c}\right)\hat{n}$$

* تابش خود به خودی

به تابشی که حین گذار از i، تراز بالاتر به n، تراز پایین‌تر رخ می‌دهد (بعد صفر) در میدان الکترومغناطیسی (برخلاف مثال ص ۹۹) تابش خود به خودی گوییم؛

در واقع در صورت داشتن میدان الکترومغناطیسی مانند مثال ص ۹۹ نرخ گذار از i تراز بالا به n پایین‌تر با توجه به (**) ص ۹۷ به صورت زیر می‌شود:

$$W_{i\to n}(t\to\infty) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m_e^2c^2}|A_0|^2\left|\langle n|e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\,\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}\,|i\rangle\right|^2\delta(E_n-E_i+\hbar\omega) \qquad (*)$$

حال میدان الکترومغناطیسی که در نظر می‌گیریم خود تابشی باشد، می‌توان گسیل یا تابش را در غیاب میدان الکترومغناطیسی خارجی توجیه کرد که به تابش خود به خودی موسوم است.

از شرایط مرزی دوره‌ای برای فوتون گسیل شده می‌توان گفت:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\,\vec{n}$$

می‌توان انرژی فوتون گسیل شده را نوشت؛

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ &= \hbar c k \\ &= \hbar c \frac{2\pi}{L} n \end{aligned} \qquad (**)$$

از سوی دیگر با توجه به چگالی انرژی فوتون تابشی (5) ص ۱۰۱ می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \int d^3x\, u \\ &= L^3\left(\frac{1}{2\pi}\frac{\omega^2}{c^2}|A_0|^2\right) \end{aligned}$$

از دو عبارت اخیر می‌توان نوشت:

$$A_0 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}}$$

حال با ضرب رابطه (..) معادله ۱۰۵ در چگالی حالت فوتون که به صورت زیر است با توجه به (..) معادله ۱۰۶:

$$\rho(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi k^2\, dk = 4\pi n^2 dn = 4\pi \left(\frac{L\omega}{2\pi c}\right)^2 \frac{L}{2\pi\hbar c}\, d\varepsilon = \frac{\omega^2 L^3}{2\pi^2 \hbar c^3}\, d\varepsilon$$

رابطه (..) معادله ۱۰۵ را نوشت:

$$W_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}\right) \left|\langle n| e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, \hat{e}\cdot\vec{p}\, |i\rangle\right|^2 \left(\frac{\omega^2 L^3}{2\pi \hbar c^3}\right)$$

با توجه به تقریب عنصر ماتریسی به صورت $\langle n|\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle$ یا به عبارتی $i m_e \omega_{ni} \langle n|\varepsilon\cdot\vec{x}|i\rangle$:

$$W_{i\to n} = \frac{2}{\hbar c} \frac{\omega^3}{c^2} \left|\langle n|\hat{\varepsilon}\cdot e\vec{x}|i\rangle\right|^2$$

* پتانسیل اختلالی وابسته به زمان ثابت یکباره جدا از فرض خاص

همانند مثال صفحه 95 سامانه ای را با هامیلتونی $H(t)=H_0+V(t)$ مفروض است که $V(t)=\begin{cases}0 & ; t<0\\ V & ; t\geq 0\end{cases}$ باشد به طوری که V کوچک باشد

می‌توان چنین اختلالی را به صورت $V(t)=\lim\limits_{\eta\to 0}\begin{cases}0 & ; t<0\\ e^{\eta t}V & ; t\geq 0\end{cases}$ نمایش داد و با توجه به کوچک بودن V در بیان c_n ها را

به صورت اختلالی نوشت:

$$c_n^{(0)}=0$$

$$c_n^{(1)}=\lim_{\eta\to 0}\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\int_{t_0}^{t}e^{\eta t'}e^{i\omega_{ni}t'}\,dt'$$

* درصورتی که زمان زیادی به سامانه بدهیم احتمال گذار از i به n به صورت زیر می‌شود:

$$P_{i\to n}(t\to\infty)=\lim_{\eta\to 0}\Big\{\lim_{t\to\infty}|c_n^{(0)}+c_n^{(1)}+\dots|^2\Big\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\Big\{\lim_{t_0\to-\infty}|c_n^{(0)}+c_n^{(1)}+\dots|^2\Big\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\Big\{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2|V_{ni}|^2\lim_{t_0\to-\infty}\left|\int_{t_0}^{t}e^{\eta t'}e^{i\omega_{ni}t'}\,dt'\right|^2\Big\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\Big\{\frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\frac{e^{2\eta t}}{\eta^2+\omega_{ni}^2}\Big\}$$

$$\simeq\frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\,\delta(E_n-E_i)\qquad (17)$$

و همانطور که انتظار داشتیم نتیجه حاصل همان (17) صفحه 95 می باشد (تنها تفاوت در حدگیری است که در آنجا حد t را بردیم ولی

در اینجا حد η را انجام دادیم.)

* حال می‌خواهیم در رفتار سامانه بعد از گذشت زمان زیاد، احتمال‌ها را بیابیم.

به این کار، مجدداً با در نظر گرفتن $n=i$ ، c_n های احتمالاتی را به ترتیب احتمالاتی مذکور می‌نویسیم:

$$c_i^{(0)}=1$$

$$c_i^{(1)}=\lim_{\eta\to 0}\left\{-\frac{i}{\hbar}V_{ii}\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}e^{\eta t'}dt'\right\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\left\{-\frac{i}{\hbar\eta}V_{ii}e^{\eta t}\right\}$$

$$c_i^{(2)}=\lim_{\eta\to 0}\left\{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_m\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''e^{i\omega_{im}t'+\eta t'}V_{im}(t')e^{i\omega_{mi}t''+\eta t''}V_{mi}(t'')\right\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\left\{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_m|V_{mi}|^2\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}dt'e^{i\omega_{im}t'+\eta t'}\frac{e^{i\omega_{mi}t'+\eta t'}}{i\omega_{mi}+\eta}\right\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\left\{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_m|V_{mi}|^2\frac{e^{2\eta t}}{2\eta(i\omega_{mi}+\eta)}\right\}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\left\{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2|V_{ii}|^2\frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2}+\frac{-i}{\hbar}\sum_{m\neq i}|V_{mi}|^2\frac{e^{2\eta t}}{2\eta(E_i-E_m+i\hbar\eta)}\right\}$$

حال به صورت محاسبات بعد از به دست آوردن تک تک c_i نسبت به زمان، $\frac{\dot{c}_i}{c_i}$ را تشکیل داده و مجدداً از آن استفاده می‌کنیم

$$\frac{\dot{c}_i}{c_i}=\lim_{\eta\to 0}\left\{\frac{-\frac{i}{\hbar}V_{ii}e^{\eta t}+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\frac{V_{ii}^2}{\eta}e^{2\eta t}+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\sum_{m\neq i}\frac{|V_{mi}|^2e^{2\eta t}}{E_i-E_m+i\hbar\eta}+\cdots}{1-\frac{i}{\hbar}\frac{V_{ii}}{\eta}e^{\eta t}+\cdots}\right\}$$

توجه شود که چنانچه محاسبات تا مرتبه دوم را در نقطه میانه مجاز به آوردن مراتب با ۲ تراز مرتبه بالاتر در مخرج

نداشتیم چراکه منجر به وجود آمدن مراتب بالاتر می‌شود.

$$\frac{\dot{c}_i}{c_i} = \lim_{\eta \to 0} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left(V_{ii} e^{\eta t} + \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{E_i - E_m + i\hbar\eta} + \cdots \right) \right\}$$

$$= \lim_{\eta \to 0} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \Delta_i \right\}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left(V_{ii} + \Pr \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m} - i\pi \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m) + \cdots \right)$$

که در عبارت فوق، جملات دوم و سوم به ترتیب معادل فرض $\lim \frac{1}{x - x_0 \pm i\epsilon}$ است که حاصل آن به صورت $\Pr \frac{1}{x - x_0} \mp \pi i$ Res

به عبارتی می‌توان عبارت فوق را بازنویسی کرد:

$$\frac{\dot{c}_i}{c_i} = -\frac{i}{\hbar} \left(\Delta E^{(1)} + \Delta E^{(2)} - i\pi \frac{\hbar}{2\pi} w_{i \to m} + \cdots \right)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \Delta_i$$

حال با استفاده کمیت‌ها می‌توان c_i را به‌دست آورد با شرط $c_i(0)=1$:

$$c_i(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta_i t\right)$$

$$= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (\mathrm{Re}\, \Delta_i + i\, \mathrm{Im}\, \Delta_i) t\right\}$$

و احتمال بقا نیز به صورت زیر محاسبه می‌شود (در زمان‌های بالا)

$$P_{i \to i}(t \to \infty) = |c_i(t)|^2$$

$$= \exp\left(\frac{2}{\hbar} \mathrm{Im}\, \Delta_i t\right)$$

یا به صورت مقابل می‌توان نوشت:

$$\doteq \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \Gamma_i t\right)$$

که در آن Γ_i، آهنگ ناپدید شدن می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود همچنین به پهنای رزونانس نیز موسوم است:

$$\Gamma_i = \hbar \sum_{m \neq i} w_{i \to m}$$

همچنین نرخ ناپدید شدن و طول عمر رابطه‌ی زیر دارند: $\Gamma_i = \hbar / \tau_i$

می‌توان $c_i(t)$ ، $P_{i\to i}(t\to\infty)$ را در فضای فوریه بررسی کرد و به جای تابعی از زمان، تابعی از انرژی به دست آورد:

$$f_i(E)=\int_0^{\infty} c_i^{s}(t)\, e^{iEt/\hbar}\, dt$$

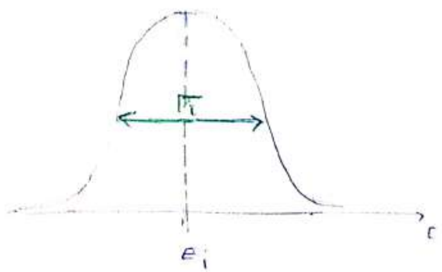
$$=\int_0^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i^{(0)}+Re\,\Delta_i-\frac{i}{2}\Gamma_i)t+\frac{i}{\hbar}Et}\, dt$$

$$=\frac{1}{\frac{i}{\hbar}\left[E-(E_i^{(0)}+Re\,\Delta_i)-\frac{i}{2}\Gamma_i\right]}$$

$$=\frac{1}{\frac{i}{\hbar}\left\{E-E_i-\frac{i}{2}\Gamma_i\right\}}$$

$$|f_i(E)|^2=\frac{\hbar^2}{(E-E_i)^2+\Gamma_i^2/4}$$

حال این تابع توزیع $|f_i(E)|^2$ که به عبارتی تبدیل فوریه $P_{i\to i}(t\to\infty)$ است، احتمال یافته شدن انرژی حالتی را برحسب انرژی تعیین می‌کند. و اینجا واضح است که چرا Γ_i، به پهنای واپاشی موسوم است. چرا که پهنای کل در نصف ارتفاع می‌باشد.



Γ_i پیداست که $|f_i(E)|^2$، تابع توزیع کوشی ـ لورنتس می‌باشد و به رابطه‌ی برایت ویگنر (غیرنسبیتی) موسوم می‌باشد.