4-8 كيف تتغير الحالات مع الزمن How states change with time

لقد تحدثنا عن كيف نمثل حالة بحيث نضع شيئا ما في جهاز. الان نستطيع ان نقول ان الجهاز المناسب هو الانتظار لبضعة دقائق، بمعنى ان تحضر حالة ϕ ومن ثم قبل ان تقوم بتحليلها سوف تنتظر حتى تستقر. ربما تضعها في مجال كهربي او مغناطيسي خاص – هذا يعتمد على الظروف الفيزيائية في العالم. عند اي معدل وفي اي ظروف تكون فإنك سوف تدع الجسم يستقر من زمن t_1 وحتى زمن t_2. افترض انه ترك يخرج من الجهاز الاول في الحالة ϕ عند الزمن t_1. ومن ثم ادخل إلى جهاز ولكن هذا الجهاز يعمل على تأخير الجسم حتى الزمن t_2. قد يحدث خلال التأخير الكثير من الاشياء – مثل التعرض لتأثير قوى خارجية أو اي اشياء اخرى – لذلك فان شيء قد حدث. في نهاية هذا التأخير تصبح سعة ايجاد الشيء في الحالة χ مختلفة عن حالة عدم التأخير. حيث ان الانتظار هي عبارة عن حالة خاصة للجهاز، فانه يمكننا ان نصف ما حدث من خلال اعطاء سعة من الشكل المشابهة للمعادلة 17.8. وبسبب ان عملية الانتظار هامة بشكل خاص فإننا سوف نطلق عليها الرمز U بدلا من A وسوف نحدد زمن البدء بالرمز t_1 وزمن الانتهاء بالرمز t_2، سوف نكتب الدالة $U(t_2,t_1)$. السعة التي نريدها على النحو التالي

$$\langle \chi \mid U(t_2, t_1) \mid \phi \rangle. \qquad (8.27)$$

مثل اي سعة اخرى يمكننا ان نمثلها بنظام اساسي او غيره من خلال كتابها بالصورة التالية:

$$\sum_{ij} \langle \chi \mid i \rangle \langle i \mid U(t_2, t_1) \mid j \rangle \langle j \mid \phi \rangle. \qquad (8.28)$$

بالتالي نصف U بشكل كامل من خلال اعطاء كامل مجموعة السعات المصفوفة التالية

$$\langle i \mid U(t_2, t_1) \mid j \rangle. \qquad (8.29)$$

يمكننا ان نلاحظ ان المصفوفة $\langle i \mid U(t_2, t_1) \mid j \rangle$ تعطي تفاصيل أكثر من المطلوب. يعتبر الفيزيائيون النظريون العاملون في مجال فيزياء الطاقة العالية المشاكل التالية على انها طبيعة فيزيائية (لأنها الطريقة المتبعة للتجارب العملية). يبدأ الفيزيائي النظري بزوج من الجسيمات مثل بروتون وبروتون يتجمعان من المالانهاية. (في المختبر، يكون في العادة أحد البروتونين في حالة سكون والاخر قادم من معجل جسيمات يعتبر كأنه في المالانهاية على المقياس الذري). يصطدمان معا وينتج عن ذلك اثنين من k-mesons وستة π-mesons واثنين من النيوترونات في اتجاهات معينة وبكمية حركة محددة. ما قيمة السعة ليحدث هذا؟ تبدو الرياضيات على النحو التالي: تصف الحالة ϕ الغزل وكمية الحركة للجسيمات القادمة. وتبدو χ هي السؤال عن ماذا ينتج. على سبيل المثال، مع ما هو مقدار السعة التي نجعل ستة ميزونات تذهب في مثل هذه الاتجاهات وايضا النيوترونين ينطلقان في تلك الاتجاهات مع غزلهما وهكذا. بمعنى انه يمكن تحديد χ من خلال اعطاء كل كمية الحركة والغزل وايضا كل النواتج النهائية. ومن ثم تكون وظيفة الفيزيائي النظري هي حساب السعة (27.8). على اية حال هو مهتم فقط في الحالة الخاصة وهي ان t_1 تكون $-\infty$ وتكون t_2 هي $+\infty$. (لا يوجد دليل عملي

على تفاصيل هذه العملية، انما فقط ما ينتج وما يدخل). الحالة الحدية لـ $U(t_2,t_1)$ هي عندما t_1 تؤول إلى $-\infty$ وt_2 تؤول إلى $+\infty$ والتي تعرف باسم S، وما نريده هو

$$\langle \chi \mid S \mid \phi \rangle.$$

او باستخدام (28.8)، يمكن حساب المصفوفة

$$\langle i \mid S \mid j \rangle,$$

والتي تعرف على انها المصفوفة S. لذلك إذا رأيت فيزيائي نظري يقول "كل ما يتوجب القيام به هو حساب المصفوفة S"، فاعلم ما هو مصدر قلقه.

كيف تقوم بتحليل – كيف تحدد القوانين لـ - المصفوفة S هو سؤال شيق. في الميكانيكا الكمية النسبية للطاقات العالية فان العملية تجرى بطريقة واحدة ولكن في ميكانيكا الكم الغير نسبية يمكن ان تجرى بطريقة اخرى، وهذا مناسب جدا. (هذه الطريقة الاخرى يمكن ان تجرى في الحالة النسبية لكنها تكون غير مناسبة). حيث نحل المصفوفة U لفترات زمنية قصيرة بمعنى عندما تكون كلا من t_2 وt_1 متقاربتين. إذا تمكنت من ايجاد تسلسل لـ U لفترات متعاقبة من الزمن يمكننا ان نرى كيف تتغير الاشياء كدالة في الزمن. يمكنك في الحال معرفة ان هذه الطريقة غير جيدة للنسبية لأنك لا تريد ان تحدد كيف كل شيء يبدو انيا في كل مكان. لكن لا داعي للقلق بهذا الشأن – حيث اننا سوف نهتم بالميكانيكا الغير نسبية.

افترض ان المصفوفة U تتأخر من الزمن t_1 إلى الزمن t_3 والذي هو أكبر من t_2. بمعنى دعنا نأخذ ثلاثة ازمنة متعاقبة بحيث ان t_1 اقل من t_2 واقل من t_3. ومن ثم ندعي ان المصفوفة المنتقلة بين t_1 وt_3 هي حاصل الضرب المتسلسل لما يحدث عندما تتأخر من t_1 إلى t_2 ومن t_2 حتى t_3. انها تشبه تماما الحالة عندما يكون لدينا جهازين B وA على التوالي. يمكننا ان نكتب الترميز التالي للجزء 5-6،

$$U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2) \cdot U(t_2, t_1). \qquad (8.30)$$

بمعنى اننا يمكن ان نحلل اي فترة زمنية إذا تمكنا من تحليل اي تسلسل لفترات زمنية قصيرة. ببساطة نضرب كل الاجزاء مع بعضها البعض، بهذه الطريقة تحلل ميكانيكا الكم بطريقة غير نسبية.

تكمن مشكلتنا في فهم المصفوفة $U(t_2,t_1)$ للفترات الزمنية المتناهية في الصغر لـ $t_2 = t_1 + \Delta t$. نسأل أنفسنا السؤال التالي: إذا كان لدينا الحالة ϕ الان فماذا تبدو الحالة بعد مرور فترة زمنية متناهية في الصغر مقدارها Δt؟ دعنا نرى كيف نكتب هذه. استدعي الحالة عند الزمن t، $|\psi(t)\rangle$ (نبين هنا الاعتماد على الزمن لـ ψ لتبدو واضحة تماما باننا نقصد الشرط عند الزمن t). الان نسأل هذا السؤال: ما هو الشرط بعد فترة زمنية صغيرة Δt؟ الاجابة هي

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = U(t + \Delta t, t)\,|\psi(t)\rangle. \qquad (8.31)$$

هذا يعني نفس الامر في (25.8) اي ان السعة لـ χ ثابتة عند الزمن $t+\Delta t$ يكون على النحو التالي:

$$\langle \chi \mid \psi(t + \Delta t)\rangle = \langle \chi \mid U(t + \Delta t, t) \mid \psi(t)\rangle. \qquad (8.32)$$

حيث اننا لا نمتلك الخبرة الكافية حول هذه الاشياء المجردة دعنا نستخدم السعات في تمثيل له معنى. إذا ضربنا كلا الطرفين في المعادلة (31.8) في $\langle i|$، نحصل على ما يلي:

$$\langle i \mid \psi(t + \Delta t)\rangle = \langle i \mid U(t + \Delta t, t) \mid \psi(t)\rangle. \qquad (8.33)$$

يمكننا ايضا ان نقوم بتحليل $|\psi(t)\rangle$ لحالتين أساسيتين ونكتب

$$\langle i \mid \psi(t + \Delta t)\rangle = \sum_j \langle i \mid U(t + \Delta t, t) \mid j\rangle\langle j \mid \psi(t)\rangle. \qquad (8.34)$$

يمكننا ان نفهم المعادلة (34.8) بالطريقة التالية. إذا افترضنا ان $C_i(t)= \langle i \mid \psi(t)\rangle$ تمثل السعة في الحالة الاساسية i عند الزمن t، ومن ثم يمكننا ان نفكر في ان هذه السعة (تذكر هي عبارة عن عدد!) تتغير مع الزمن. كل C_i تصبح دالة في t. ولدينا ايضا معلومات عن كيف تتغير السعة C_i مع الزمن. كل سعة عند $(t+\Delta t)$ تتناسب مع كل السعات عند t مضروبة في مجموعة من المعاملات. دعنا نطلق على المصفوفة U بـ U_{ij} وهذا يعني ما يلي:

$$U_{ij} = \langle i \mid U \mid j\rangle.$$

وبالتالي يمكن كتابة المعادلة (34.8) على النحو التالي:

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j U_{ij}(t + \Delta t, t)C_j(t). \qquad (8.35)$$

وعليه تكون هذه هي الطريقة التي تبدو عليها ديناميكا ميكانيكا الكم.

لا نعلم الكثير عن U_{ij} حتى الان ما عدا شيء واحد. نعلم انه إذا كانت Δt تؤول إلى الصفر فلن يحدث شيء – نحصل فقط على الحالة الاصلية. لذلك تؤول U_{ii} إلى 1 وتؤول U_{ij} إلى الصفر إذا كانت i لا تساوي j. بمعنى انه $U_{ij} \leftarrow \delta_{ij}$ لـ $\Delta t \leftarrow 0$. ايضا يمكننا ان نفترض انه لقيم Δt صغيرة فان لكل معاملات U_{ij} يجب ان تختلف عن δ_{ij} بمقادير تتناسب مع Δt لذلك يمكننا ان نكتب

$$U_{ij} = \delta_{ij} + K_{ij}\,\Delta t. \qquad (8.36)$$

على اية حال فانه من المعتاد اخذ المعامل $(-i/\hbar)$ من المعاملات K_{ij} لأسباب تاريخية واسباب اخرى، نفضل ان نكتب

$$U_{ij}(t + \Delta t, t) = \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t)\,\Delta t. \qquad (8.37)$$

انها بالطبع نفس المعادلة (36.8) وإذا رغبت قم بتعريف المعاملات $H_{ij}(t)$. الحدود H_{ij} هي المشتقات بالنسبة إلى t_2 للمعاملات $U_{ij}(t_2,t_1)$، مرفوعة عند $t_2 = t_1 = t$.

باستخدام هذا الشكل لـ U في المعادلة (35.8) يكون لدينا

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j \left[\delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t)\,\Delta t\right] C_j(t). \qquad (8.38)$$

بأخذ المجموع على الحد δ_{ij}، نحصل على $C_i(t)$ فقط والذي يمكننا ان نضعه على الجانب الاخر من المعادلة. ومن ثم بالقسمة على Δt نحصل على المشتقة

$$\frac{C_i(t + \Delta t) - C_i(t)}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H_{ij}(t) C_j(t)$$

أو

$$i\hbar \frac{dC_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij}(t) C_j(t). \qquad (8.39)$$

لعلك تذكر ان Ci(t) هي السعة $\langle i|\psi\rangle$ لإيجاد الحالة ψ في أحد الحالات الاساسية i (عند الزمن t). لذلك فان المعادلة (39.8) تخبرنا بكيف كل من المعاملات $\langle i|\psi\rangle$ يتغير مع الزمن. لكن هذا هو نفس الامر عندما نقول ان المعادلة (39.8) تخبرنا كيف تتغير الحالة ψ مع الزمن، لأننا نصف ψ بدلالة السعات $\langle i|\psi\rangle$. يصف التغير لـ ψ مع الزمن بدلالة حدود المصفوفة H_{ij}، والتي يجب ان تشتمل بالطبع الاشياء التي نقوم بها للنظام لنجعله يتغير. إذا عرفنا الـ H_{ij} – والتي تحتوي على فيزياء الحالة والتي يمكن ان تعتمد على الزمن – يكون لدينا وصف كامل لسلوك النظام في الزمن. (المعادلة (39.8) هي قانون ميكانيكا الكم لديناميكا العالم.

(يجب ان نقول انه علينا دائما ان نأخذ مجموعة من الحالات الاساسية الثابتة والتي لا تتغير مع الزمن. هناك اشخاص يستخدمون الحالات الاساسية التي تتغير ايضا. على اية حال هذا يشبه نظام الاحداثيات الدورانية في الميكانيكا ولا نريد ان ندخل في مثل هذه التعقيدات).

5-8 مصفوفة الهاملتونين The Hamiltonian matrix

الفكرة الان تكمن في وصف عالم ميكانيكا الكم الذي نحتاجه لاختيار مجموعة من الحالات الاساسية i ونكتب القوانين الفيزيائية بإعطاء مصفوفة معاملات H_{ij}. بعد ذلك يكون لدينا كل شيء – يمكننا ان نجاوب على اي سؤال حول ماذا سوف يحدث. لذلك علينا ان نتعلم ما هي القواعد لإيجاد الـ H's المتوافقة مع اي حالة فيزيائية – ما يقابل المجال المغناطيسي او المجال الكهربي وهكذا. وهذا هو أصعب ما في الامر. على سبيل المثال لجسيم غريب وجديد، لا يكون لدينا اي فكرة عن H_{ij} التي سوف نستخدمها. بمعنى لا أحد يعلم H_{ij} لكل العالم. (جزء من الصعوبة يكمن في ان أحد يأمل بصعوبة اكتشاف الـ H_{ij} في حين لا أحد يعرف ماذا تكون الحالات

الاساسية!) لدينا تقريب ممتاز للظاهرة الغير نسبية ولحالات خاصة اخرى. بالأخص، لدينا الاشكال المطلوبة لحركات الالكترونات – لوصف الكيمياء. لكن لا نعرف الـ H الكاملة لكل الكون.

تعرف المعاملات H_{ij} على انها مصفوفة الهاملتونيون او الهاملتونيون للاختصار. (من هو هاملتون، هو من عمل في الثلاثينات من القرن التاسع عشر وحصل على اسمه في مصفوفة ميكانيك الاكم وهذا مسرد في قصة تاريخية). من الافضل ان نطلق عليها اسم مصفوفة الطاقة لأسباب سوف ندركها عند التعامل معها. لذلك فان المشكلة هي معرفة الهاملتونين!

يمتلك الهاملتونين خاصية واحدة يمكن استنتاجها الان وهي

$$H_{ij}^{*} = H_{ji}. \qquad (8.40)$$

هذا ينتج من الشرط بان الاحتمالية الكلية ان النظام هو في حالة لا تتغير. إذا بدأت بجسيم – جسم او العالم – فان لازلت تحصل عليه مع مرور الزمن. الاحتمالية الكلية لإيجاده في مكان ما تكون على النحو التالي:

$$\sum_i |C_i(t)|^2,$$

والتي لا يجب ان تتغير مع الزمن. إذا كان هذا صحيحا لأي شرط بداية ϕ، فان المعادلة (40.8) يجب ان تكون ايضا صحيحة.

كما هو في مثالنا الاول، نأخذ حالة التي فيها الظروف الفيزيائية لا تتغير مع الزمن، ونعني بذلك الشروط الفيزيائية الخارجية، بذلك فان H لا تعتمد على الزمن. لا أحد يقوم بتشغيل المغناطيس واطفائه. كما اننا ايضا نأخذ النظام بحيث يكون المطلوب حالة اساسية واحدة لوصفه، انها بشكل تقريبي يمكننا ان نجعل ذرة الهيدروجين في حالة سكون، او اي شيء مشابه. تصبح المعادلة (39.8) على النحو التالي:

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1. \qquad (8.41)$$

فقط معادلة واحدة – هذا كل شيء! وإذا كانت H_{11} ثابتة فان المعادلة التفاضلية تحل بشكل سهل لتعطي ما يلي:

$$C_1 = (\text{const})e^{-(i/\hbar)H_{11}t}. \qquad (8.42)$$

هذه هي حالة الاعتماد على الزمن مع تعريف الطاقة $E = H_{11}$. ترى لماذا H_{ij} يجب ان نطلق عليها مصفوفة الطاقة. انها تعميم الطاقة لحالات أكثر تعقيدا.

بعد ذلك، لفهم المزيد عما تعنيه المعادلة سوف ننظر على النظام والذي يحتوي على حالتين اساسيتين. بالتالي تصبح المعادلة (39.8) على النحو التالي:

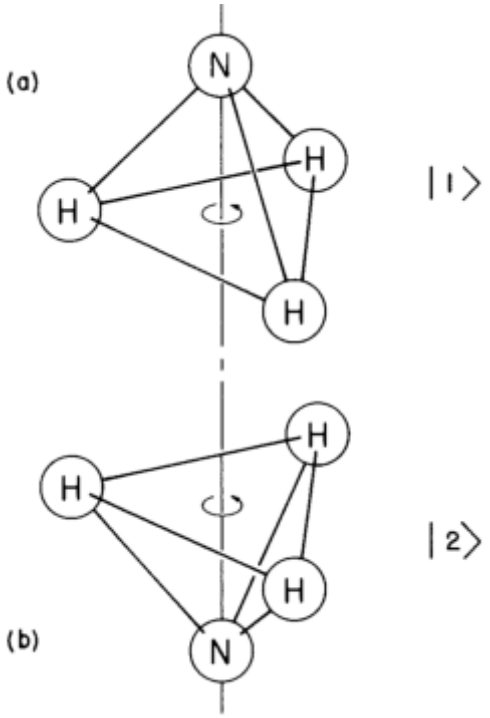
$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2,$$
$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \qquad (8.43)$$

إذا كانت H's غير معتمدة على الزمن فيمكنك بسهولة ان تحل هذه المعادلات. سوف نتركها لك لتحلها وسوف نعود لها فيما بعد. نعم يمكنك حل ميكانيكا الكم بدون معرفة الـ H's طالما انها لا تعتمد على الزمن.

6-8 جزئي الامونيا The ammonia

نريد الان ان نبين كيف تستخدم المعادلة الديناميكية لميكانيكا الكم لوصف ظروف فيزيائية خاصة. اخترنا مثال شيق وسهل من خلال وضع بعض التخمينات المنطقية حول الهاملتونين، يمكننا الحصول على بعض النتائج الهامة والعملية ايضا. اننا سوف نأخذ حالة يمكن ان نصفها بمستويين: جزيء الامونيا.

يمتلك جزيء الامونيا على ذرة نيتروجين وثلاثة ذرات هيدروجين تقع في مستوى أسفل النيتروجين بحيث ان شكل الجزيء يشبه الهرم، كما هو موضح في الشكل 8-1 (a). الان هذا الجزيء مثل اي جزيء اخر يمتلك عدد لانهائي من المستويات. انها تغزل حول اي محور ممكن ويمكنها ان تتحرك في اي اتجاه، ويمكنها ان تتذبذب وهكذا. انها لهذا السبب ليست نظام من مستويين على الاطلاق. لكننا نريد ان نقوم بتقريب وهو ان كل المستويات تبقى ثابتة، لأنها لا تدخل في مجال اهتمامنا في هذه اللحظة.



الشكل 8-1 ترتيبين هندسيين متكافئين لجزيء الامونيا

سوف نعتبر فقط الجزيء يقوم بعمل غزل حول محور تماثله (كما هو موضح في الشكل)، وبالتالي فهو لا يمتلك اي كمية حركة انتقالية ويتذبذب بأقل درجة ممكنة. هذا يحدد كل الشروط ما عدا واحدة: هناك لا يزال موضعين ممكنين لذرة النيتروجين – يمكن لذرة النيتروجين ان تأخذ مكانها على اي من جانبي مستوى ذرات الهيدروجين او على الجانب الاخر، كما هو موضح في الشكل 8-1 (a) و(b). لذلك سوف نناقش الجزيء على اساس انه نظام من مستويين او حالتين. نعني بذلك ان هناك حالتين يجب ان نهتم بهما وكل الاشياء الاخرى افترضنا انها تبقى على وضعها. سوف ترى انه إذا عرفنا الغزل مع كمية الحركة الزاوية حول المحور وانه يتحرك بكمية حركة وتذبذب محددين بطريقة معرفة، فانه يكون هناك حالتين ممكنتين. لازلنا نقول ان الجزيء في الحالة $\langle 1|$ عندما يكون النيتروجين للأعلى كما هو موضح في الشكل 8-1 (a) وفي الحالة $\langle 2|$ عندما يكون النيتروجين للأسفل كما في الشكل (b). سوف نعتبر الحالتين $\langle 1|$ و$\langle 2|$ على انهما الحالتين او المستويين الاساسيين في تحليلنا لسلوك جزيء الامونيا. عند اي لحظة فان المستوى الفعلي $\langle \psi|$ للجزيء يمكن ان تمثل بافتراض ان $C_1 = \langle 1|\psi\rangle$ لسعة المستوى $\langle 1|$، و$C_2 = \langle 2|\psi\rangle$ لسعة المستوى $\langle 2|$. ومن ثم باستخدام المعادلة (8.8؟ يمكن ان نتكتب متجه المستوى $\langle \psi|$ على النحو التالي

$$|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1|\psi\rangle + |2\rangle\langle 2|\psi\rangle$$

أو

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2. \qquad (8.44)$$

الان الامر الشيق هو انه إذا كان الجزيء معروف على انه في مستوى معين عند لحظة ما، فانه لن يكون في نفس المستوى بعض لحظة اخرى. المعاملين C سوف يتغيران مع الزمن طبقا للمعادلتين (43.8) – والمتحققة لأي نظام من مستويين. افترض على سبيل المثال إنك قمت بملاحظة او قمت باختيار ما للجزيئات – وبذلك فإنك تعرف ان الجزيء يكون في البداية في المستوى $\langle 1|$. في وقت لاحق يكون هناك بعض التغير يوجد في المستوى $\langle 2|$. لإيجاد التغير هذا سوف نقوم بحل المعادلات التفاضلية والتي تخبرنا بكيف تتغير السعة مع الزمن.

تكمن المشكلة الوحيدة في اننا لا نعرف ما نستخدم لمعاملات H_{ij} في المعادلة (43.8). لكن هناك بعض الاشياء يمكن ان نذكرها. افترض انه بمجرد ان يكون الجزيء في الحالة $\langle 1|$ فانه لا يوجد اي فرصة له ليكون في الحالة $\langle 2|$ والعكس صحيح. لذلك فان H_{12} وH_{21} يكونا صفر والمعادلة (43.8) تصبح على النحو التالي:

$$i\hbar\frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1, \qquad i\hbar\frac{dC_2}{dt} = H_{22}C_2.$$

يمكن بسهول حل هاتين المعادلتين والحصول على ما يلي:

$$C_1 = (\text{const})e^{-(i/\hbar)H_{11}t}, \qquad C_2 = (\text{const})e^{-(i/\hbar)H_{22}t}. \qquad (8.45)$$

هذه هي السعات للحالات المستقرة مع الطاقة $E_1 = H_{11}$ والطاقة $E_2 = H_{22}$. نلاحظ ان الحالتين لجزيء الامونيا $|1\rangle$ و$|2|$ لهما تماثل محدد وعناصر المصفوفة H_{11} وH_{22} يجب ان تكون متساوية. سوف نسمي كلاهما بـ E_0 لانهما يقابلان طاقة المستويات عندما تكون H_{12} وH_{21} تساوي صفر. لكن المعادلتين (45.8) لا تخبرنا ماذا يفعل الامونيا. لقد تبين انه من الممكن للنيتروجين ان يدفعها من خلال ذرات الهيدروجين الثلاثة وينقلب على الجانب الاخر. انه امر صعب ان تدخل نصف الطريق لان الامر يتطلب الكثير من الطاقة. فكيف لها ان تمر من خلالها إذا لم تكن تمتلك الطاقة الكافية؟ هناك بعض السعة التي يمكن لها ان تعبر حاجز الطاقة. انه ممكن في ميكانيكا الكم لان تتسلل بسرعة عبر منطقة غير مسموحة من ناحية الطاقة. هناك بعض السعة الصغيرة التي يمتلكها الجزيء والتي تبدأ في $|1\rangle$ وتنتقل إلى المستوى $|2\rangle$. المعاملات H_{12} وH_{21} لا تساوي صفر. مرة اخرى من خلال التماثل فانهما يجب ان يكونا متساويين – على الاقل من ناحية المقدار. في الحقيقة نحن نعرف ان H_{ij} يجب ان تكون مساوية للقرين المركب لـ H_{ji}، لذلك يمكنها ان تختلف فقط في الطور. لقد تبين كما سوف ترى انه لا يوجد فقد في العمومية إذا افترضنا انهما مساويتين لبعضهما البعض. وللتبسيط سوف نفترض انهما يساويان عدد سالب، حيث ان $H_{12}=H_{21}=-A$. بهذا يكون لدينا زوج المعادلات التالية:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1 + C_2) = (E_0 - A)(C_1 + C_2),$$

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = E_0 C_1 - AC_2, \qquad (8.46)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = E_0 C_2 - AC_1. \qquad (8.47)$$

هذه المعادلات بسيطة ويمكن حلها باي طريقة من الطرق. ومن أحد الطرق المناسبة. بأخذ مجموع المعادلتين نحصل على ما يلي:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1 + C_2) = (E_0 - A)(C_1 + C_2),$$

وحلها على النحو التالي:

$$C_1 + C_2 = ae^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}. \qquad (8.48)$$

ومن ثم بأخذ الفرق للمعادلة (47.8) والمعادلة (46.8) نحصل على ما يلي:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1 - C_2) = (E_0 + A)(C_1 - C_2),$$

والتي تعطي

$$C_1 - C_2 = be^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \qquad (8.49)$$

أطلقنا على ثوابت التكاملين a و b وهما بالطبع قد تم اختيارهما ليعطيا شرط بداية مناسب لأي مشكلة فيزيائية. الان بجمع وطرح المعادلتين (48.8) و(49.8)، نحصل على كلا من C_1 وC_2:

$$C_1(t) = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}, \qquad (8.50)$$

$$C_2(t) = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \qquad (8.51)$$

انهما متشابهتين فيما عدا الاشارة في الحد الثاني.

لدينا الحلول، الان ماذا نفعل بهم؟ (المشكلة مع ميكانيكا الكم لا تكمن فقط في حل المعادلات ولكن في فهم ماذا يعني الحل الذي نحصل عليه!) في البداية لاحظ انه إذا كانت b = 0 فان كلا الحدين يكون لهما نفس التردد $\omega = (E_0 - A)/\hbar$. إذا تغير كل شيء عند تردد واحد فان هذا يعني ان النظام يكون في حالة ذات طاقة محددة – هنا تكون الطاقة هي $(E_0 - A)$. لذلك هناك حالة مستقرة لهذه الطاقة بحيث ان السعتين C_1 وC_2 تكونا متساويتين. نحصل على النتيجة بان جزيء الامونيا له طاقة محددة $(E_0 - A)$ إذا كانت السعتين متساويتين لذرة النيتروجين لتكون للأعلى وللأسفل.

هناك حالة مستقرة اخرى ممكنة إذا كانت a = 0، فان كلا السعتين لهما تردد $(E_0 + A)/\hbar$. لذلك فان هناك حالة اخرى لها طاقة محددة تساوي $(E_0 + A)$ إذا كانت السعتين متساويتين ولهما اشارتين متعاكستين اي ان C_2=-C_1. هاتين هما الحالتين من الطاقة المحددة. سوف نناقش حالات جزيء الامونيا بتفاصيل أكثر في الفصل القادم، وسوف نذكر هنا فقط شيئين.

نستنتج انه بسبب ان هناك فرصة ما لتكون ذرة النيتروجين ان تنقلب من موضع إلى اخر، فان طاقة الجزيء لا تكون E_0 فقط كما كنا نتوقع، لكن هناك مستويي طاقة $(E_0 - A)$ و$(E_0 + A)$. كل حالة ممكنة من حالات الجزيء وعند اي طاقة يمتلكها فانه ينفصل إلى مستويين. وهذا يحدث لكل مستوي من مستويات الطاقة بسبب اننا اخذنا حالة واحدة خاصة من الدوران والطاقة الداخلية وهكذا. لكل شرط ممكن من هذا النوع يكون هناك ازدواج لمستويات الطاقة بسبب انقلاب الجزيء.

دعنا نسأل الان السؤال التالي حول جزيء الامونيا. افترض انه عند الزمن t = 0، نعلم ان الجزيء يكون في المستوى $|1\rangle$ او بمعنى اخر ان $C_1(0) = 1$ و$C_2(0) = 0$. ما هي احتمالية ان الجزيء يوجد في المستوى $|2\rangle$ عند الزمن t، او انه سوف لا يزال موجودا في المستوى $|1\rangle$ عند الزمن t؟ يخبرنا شرطنا الاولي ما هي a وb في المعادلتين (50.8) و(51.8). بالتعويض عن t = 0 يكون لدينا ما يلي:

$$C_1(0) = \frac{a + b}{2} = 1, \qquad C_2(0) = \frac{a - b}{2} = 0.$$

بوضوح فان a = b = 1. بوضع القيم الثلاثة في الصيغ لـ $C_1(t)$ و$C_2(t)$ وبإعادة ترتيب الحدود نحصل على ما يلي:

$$C_1(t) = e^{-(i/\hbar)E_0 t}\left(\frac{e^{(i/\hbar)At} + e^{-(i/\hbar)At}}{2}\right),$$

$$C_2(t) = e^{-(i/\hbar)E_0 t}\left(\frac{e^{(i/\hbar)At} - e^{-(i/\hbar)At}}{2}\right).$$

ويمكن اعادة كتابتها على النحو التالي

$$C_1(t) = e^{-(i/\hbar)E_0 t}\cos\frac{At}{\hbar}, \qquad (8.52)$$

$$C_2(t) = ie^{-(i/\hbar)E_0 t}\sin\frac{At}{\hbar}. \qquad (8.53)$$

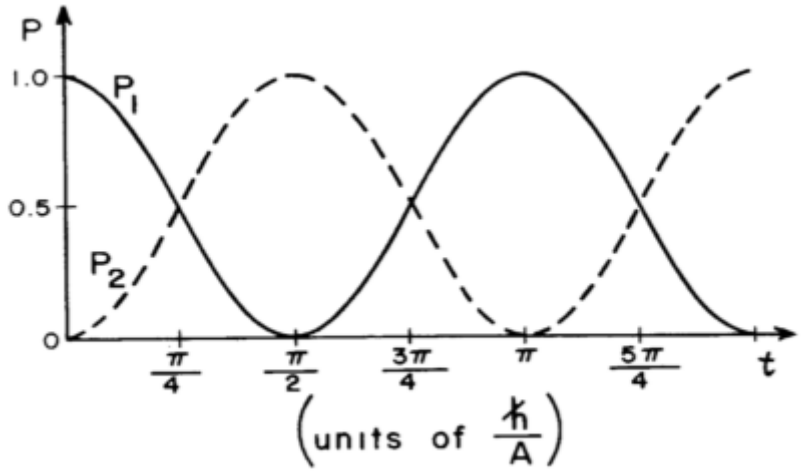
السعتين لهما نفس المقدار والذي يتغير بدالة توافقية مع الزمن.

ان الاحتمالية لإيجاد الجزيء في المستوى $|2\rangle$ عند الزمن t يساوي مربع الـ $C_2(t)$:

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2\frac{At}{\hbar}. \qquad (8.54)$$

تبدأ الاحتمالية من الصفر (كما يجب ان تكون) وتزداد إلى الواحد ومن ثم تتذبذب للخلف والامام بين القيمتين صفر وواحد كما هو موضح في المنحنى المعنون بـ P_2 في الشكل 8-2. الاحتمالية لان تكون في المستوى $|1\rangle$ لا تبقى بالطبع عند الواحد. انها تنتقل إلى الحالة الثانية حتى تصبح الاحتمالية لإيجاد الجزيء في الحالة الاولى يساوي صفر، كما هو موضح في المنحنى P_1 في الشكل 8-2. تتذبذب الاحتمالية ذهابا وايابا بين الاثنتين.

منذ زمن بعيد شاهدنا ما يحدث عندما يكون لدينا بندولين متساويين مرتبطين بازدواج بسيط (انظر الفصل 49 الجزء 1).



الشكل 8-2 الاحتمالية P1 لجزيء الامونيا في الحالة |1⟩ عند الزمن t = 0 سوف نجدها في الحالة |1⟩ عند t. الاحتمالية P2 التي توجد في الحالة |2⟩

عندما نرفع أحدهما للأعلى ونتركه فانه يتمرجح، لكنه بعد ذلك يبدأ البندول الثاني تدريجيا بالتمرجح. وبسرعة يكون البندول الثاني قد اخذ كل الطاقة. من ثم تنعكس العملية مرة اخرى وتنتقل الطاقة بالكامل إلى البندول الاول. انها تماما نفس الشيء. تعتمد سرعة انتقال الطاقة بين الاثنين على التزاوج بين البندولين – وهو المعدل الذي يكون التذبذب قادرا على الانتقال عبرهما. كذلك تذكر انه مع البندولين هناك حركتين خاصتين كل حركة لها تردد محدد – والذي سوف نسميه بالأنماط الاساسية. إذا سحبنا كلا البندولين مع بعضهما البعض فانهما يتمرجحان مع بعضهما البعض عند تردد واحد. على الجانب الاخر إذا سحبنا واحد للخارج وسحبنا الاخر للخارج في الاتجاه الاخر يكون لدينا نمط مستقر اخر عند تردد محدد.

حسنا، هنا لدينا نفس الحالة – حيث ان جزيء الامونيا يشبه رياضيا البندولين. هذين الترددين وهما $(E_0 + A)/h$ و $(E_0 - A)/h$ هما الترددين عندما يتذبذبان مع بعضهما البعض، او يتذبذبان في اتجاهين متعاكسين.

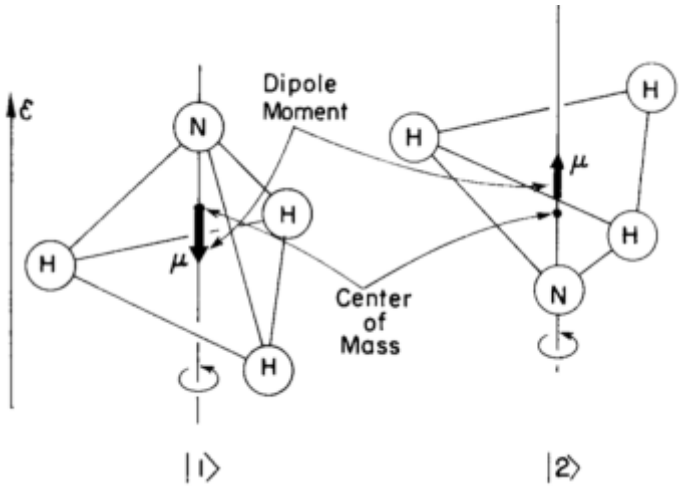
مثال البندول ليس أعمق بكثير من مبدأ ان نفس المعادلات لها نفس الحلول. المعادلات الخطية للسعات (39.8) تشبه كثير المعادلات الخطية للمتذبذبات التوافقية. (في الحقيقة هذا هو السبب خلف نجاح النظرية الكلاسيكية لمعامل الانكسار بحيث استبدلنا ميكانيكا الكم للذرة بمتذبذب توافقي، وحتى ان الوصف الكلاسيكي هذا لا يناسب دوران الالكترونات حول النواة). إذا سحبت النيتروجين لاحد الجانبين فإنك تحصل على تراكب لهذين التذبذبين وتحصل على نغمة ضربات لان النظام ليس في حالة تردد واحد محدد. الانفصال في مستويات الطاقة لجزيء الامونيا هو تأثير ميكانيكا كم.

الانفصال في مستويات الطاقة لجزيء الامونيا له تطبيقات عملية هامة والتي سوف نأتي لذكرها في الفصل القادم. على الاقل هنا لدينا مثال لمشكلة فيزيائية عملية يمكنك ان تفهمها بواسطة ميكانيكا الكم!

1-9 حالات جزيء الامونيا The states of an ammonia molecule

في هذا الفصل سوف نناقش تطبيق ميكانيكا الكم على جهاز عملي وهو جهاز ميزر الامونيا. ربما تتسأل عن سبب توقفنا على تطوير ميكانيكا الكم للقيام بمسألة خاصة، لكنك سوف تجد ان هناك الكثير من المزايا لهذه المسألة الخاصة وهي شائعة جدا في النظرية العامة لميكانيكا الكم، وسوف تتعلم الكثير من المعلومات من خلال التعامل مع هذه المسألة. ميزر الامونيا عبارة عن جهاز لتوليد امواج كهرومغناطيسية، وفكرة عمله تعتمد على خواص جزيء الامونيا والتي سوف نناقشها بشكل من التفصيل في الفصل الاخير. نبدأ من خلال تلخيص ما توصلنا له.

يمتلك جزيء الامونيا الكثير من المستويات لكننا سوف نعتبرها على انه نظام من مستويين، وسنفكر فقط عن ما سوف يحدث عندما يكون الجزيء في اي مستوى محدد من الدوران او الانتقال. النموذج الفيزيائي للمستويين يمكن ان نتخيلهما على النحو التالي. إذا كان جزيء الامونيا يدور حول محور يمر من خلال ذرة النيتروجين وعموديا على مستوى ذرات الهيدروجين كما هو موضح في الشكل 9-1، لا يزال هناك شرطين ممكنين – يمكن ان يكون النيتروجين على واحد من جانبي مستوى ذرات الهيدروجين او على الجانب الاخر. سوف نطلق على هذين المستويين $|1\rangle$ و$|2|$. اعتبرا هذين المستويين على انهما مجموعة مستويات اساسية لتحليلنا لسلوك جزيء الامونيا.



الشكل 9-1 نموذج فيزيائي لمستويين اساسيين لجزيء الأمونيا. هذه المستويات تمتلك عزوم ثنائي قطب كهربي μ.

في نظام مكون من مستويين طاقة فان اي مستوى $|\psi\rangle$ في النظام يمكن ان نصفه كاندماج خطي للمستويين، وبالتالي يكون هناك سعة محددة C_1 لاحد المستويين وسعة C_2 للمستوى الاخر. يمكننا ان نكتب متجه المستوى على النحو التالي

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2, \qquad (9.1)$$

حيث ان

$$C_1 = \langle 1|\psi\rangle \quad \text{and} \quad C_2 = \langle 2|\psi\rangle.$$

تتغير هاتين السعتين مع الزمن طبقا لمعادلة الهاملتونين، المعادلة (43.8). باستخدام تماثل المستويين في جزيء الامونيا، نضع $H_{11} = H_{22} = E_0$ و$H_{12} = H_{21} = -A$، ونحصل على الحل (انظر المعادلتين (50.8) و(51.8))

$$C_1 = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t} + \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}, \qquad (9.2)$$

$$C_2 = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t} - \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}. \qquad (9.3)$$

نريد الان ان نلقي نظرة عن قرب على هذه الحلول العامة. افترض ان الجزيء كان في البداية في المستوى $\langle \psi_{II} |$ في حالة ان المعامل b يساوي صفر. ومن ثم عند t = 0 فان السعات للمستويين ⟨1 | و⟨2 | متماثلين، ويبقيا هكذا في كل الاوقات. تتغير اطوارها مع الزمن بنفس الطريقة – مع التردد $(E_0 - A)/\hbar$. بالمثل، إذا وضعنا الجزيء في المستوى $\langle \psi_I |$ بحيث ان a = 0، والسعة C_2 تكون سالبة لـ C_1، وهذه العلاقة سوف تبقى للأبد. كلا السعتين سوف تتغير الان مع الزمن ومع التردد $(E_0 + A)/\hbar$. هاتين هما المستويين الممكنين التي تكون فيها العلاقة بين C_1 وC_2 لا تعتمد على الزمن.

لقد وجدنا حلين خاصين بحيث ان السعتين لا تتغير في المقدار وعلاوة على ذلك يمتلكان اطوار تتغير عند نفس الترددات. هذه هي المستويات المستقرة التي قمنا بتعريفها في الجزء 7-1، والتي تعني انها مستويات لها طاقة محددة. المستوى $\langle \psi_{II} |$ ويمتلك طاقة $E_{II} = E_0 - A$، والمستوى $\langle \psi_I |$ والذي يمتلك طاقة $E_I = E_0 + A$. هاذين هما فقط المستويين المستقرين اللذان يتواجدان، لذلك نجد ان الجزيء يمتلك مستويين للطاقة بفرق في الطاقة مقداره 2A. (نعني بذلك بالطبع مستويين الطاقة للمستوي المفترض من الدوران والاهتزاز والذي أشرنا لها بالافتراضات الابتدائية).

إذا لم نكن نسمح لإمكانية النيتروجين بالانقلاب للخلف والامام، فإننا كنا سنأخذ A مساوية للصفر ومستويي الطاقة يكونا فوق بعضهما البعض عند طاقة مقدارها E_0. المستويات الحقيقية ليست كذلك، حيث ان متوسط طاقتها هي E_0 لكنها تنفصل بمقدار ±A، مما يعطي انفصال مقداره 2A بين طاقات المستويين. حيث ان A صغيرة جدا فان الفرق في الطاقة يكون ايضا صغيرا.

لكي تقوم بإثارة الكترون، داخل الذرة والطاقات المستخدمة تكون عالية جدا نسبيا – مما تتطلب فوتونات في المدى المرئي او الفوق بنفسجي. اما لإثارة اهتزازات الجزيئات فنستخدم فوتونات في مدى الاشعة تحت الحمراء. اما إذا تحدثنا عن اثارة الحركة الدورانية للجزيئات فان فروقات مستويات الطاقة تتطابق مع فوتونات في مدى الاشعة تحت الحمراء البعيدة. لكن فرق الطاقة 2A اقل من اي من هذه الطاقات وهي في الواقع اقل من الاشعة تحت الحمراء وتقع في مدى اشعة الميكروويف. عمليا، وجد ان هناك زوج من مستويات الطاقة تفصلها طاقة مقدارها 10^{-4} الكترون فولت – وهي ما تقابل تردد 24,000 مليون دورة (megacycles). وهذا يعني ان 2A = hf حيث f تساوي 24,000 مليون دورة (وهذا يقابل طول موجي يساوي 1.24cm). لذلك يكون لدينا جزيء يمتلك انتقال لا يشع ضوء لكنه يشع امواج ميكروويف.

للخطوة التالية فإننا نحتاج ان نصف مستويي الطاقة المعرفين بشكل أفضل. افترض اننا حصلنا على سعة C_{II} بأخذ مجموع العددين C_1 وC_2:

$$C_{II} = C_1 + C_2 = \langle 1 | \Phi \rangle + \langle 2 | \Phi \rangle. \qquad (9.4)$$

ماذا يعني هذا؟ حسنا، هذا فقط السعة لإيجاد المستوى $\langle \Phi \mid$ في مستوى جديد $\langle II \mid$ بحيث ان سعات المستويات الاساسية الاصلية تكون متساوية. هذا يعني كتابة $C_{II} = \langle II|\Phi\rangle$، يمكننا ان نخرج $\langle \Phi \mid$ من المعادلة (4.9) لأنها صحيحة لأي Φ وعليه نحصل على ما يلي:

$$\langle II \mid = \langle 1 \mid + \langle 2 \mid,$$

والتي تعني نفس الشيء مثل

$$\mid II\rangle = \mid 1\rangle + \mid 2\rangle. \qquad (9.5)$$

السعة للمستوى $\langle II \mid$ ليكون في المستوى $\langle I \mid$ يكون على النحو التالي:

$$\langle 1 \mid II\rangle = \langle 1 \mid 1\rangle + \langle 1 \mid 2\rangle,$$

والتي بالطبع تساوي 1 لان كلا من $\langle 1 \mid$ و$\langle 2 \mid$ هي مستويات اساسية. السعة للمستوى $\langle II \mid$ يكون في المستوى $\langle 2 \mid$ يساوي ايضا 1، لذلك فان المستوى $\langle II \mid$ يكون مساويا للسعات الموجودة في المستويين الأساسين $\langle 2 \mid$ و$\langle 2 \mid$.

هنا نحن في مشكلة بعض الشيء. المستوى $\langle II \mid$ يمتلك احتمالية كلية أكبر من تلك الموجودة في مستوى اساسي اخر. هذا يعني ان متجه المستوى غير normalized بشكل جيد. ويمكننا ان نراعي هذه النقطة بضرورة ان يكون $\langle II|\mathrm{II}\rangle = 1$ والتي يجب ان تكون كذلك لأي مستوى. باستخدام العلاقة العامة هذه

$$\langle \chi \mid \Phi\rangle = \sum_i \langle \chi \mid i\rangle\langle i \mid \Phi\rangle,$$

بافتراض ان كلا من Φ و χ تكون في المستوى II وبأخذ المجموع على المستويات الاساسية $\langle 1 \mid$ و$\langle 2 \mid$، نحصل على ما يلي:

$$\langle II \mid II\rangle = \langle II \mid 1\rangle\langle 1 \mid II\rangle + \langle II \mid 2\rangle\langle 2 \mid II\rangle.$$

هذه سوف تساوي واحد كما يجب إذا غيرنا تعريفنا لـ C_{II} في المعادلة (4.9) لتصبح على النحو التالي:

$$C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}}[C_1 + C_2].$$

بنفس الطريقة يمكننا ان نحصل على السعة

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}}[C_1 - C_2],$$

او

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle I \mid \Phi\rangle - \langle 2 \mid \Phi\rangle]. \qquad (9.6)$$

هذه السعة هي مسقط المستوى ⟨Φ | في مستوى جديد ⟨I | والذي يمتلك سعة معاكسة للمستويين ⟨1 | و⟨2 |. اي ان المعادلة (6.9) تعني ما يلي:

$$\langle I \mid = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle I \mid - \langle 2 \mid],$$

او

$$\mid I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\mid I\rangle - \mid 2\rangle], \qquad (9.7)$$

والذي ينتج عنه ما يلي:

$$\langle I \mid I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} = -\langle 2 \mid I\rangle \cdot$$

الان السبب الذي من اجله قمنا بكل هذا هو ان المستويات ⟨I | و⟨II | يمكن ان تؤخذ كمجموعة جديدة من المستويات الاساسية التي تعتبر ملائمة بشكل مميز لوصف المستويات المستقرة لجزيء الامونيا. تذكر ان المطلوب لمجموعة المستويات الاساسية هو

$$\langle i \mid j\rangle = \delta_{ij}.$$

لدينا الان اشياء ثابتة وبالتالي فان

$$\langle I \mid I\rangle = \langle II \mid II\rangle = 1.$$

يمكنك بسهولة ان تثبت من المعادلتين (5.9) و(7.9) ان

$$\langle I \mid II\rangle = \langle II \mid I\rangle = 0.$$

السعتين$\langle I|\Phi\rangle = C_I =$ و$\langle II|\Phi\rangle = C_{II}$ لأي مستوى ϕ ليكون في مستويات جديدة اساسية ⟨I | و⟨II | يجب ايضا ان تحقق معادلة هاملتونين من شكل المعادلة (39.8). في الواقع إذا قمنا بطرح المعادلتين (2.9) و(3.9) واجراء التفاضل بالنسبة للزمن t نحصل على ما يلي:

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = (E_0 + A)C_I = E_I C_I. \qquad (9.8)$$

بأخذ مجموع المعادلتين (2.9) و(3.9) نحصل على ما يلي:

$$i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} = (E_0 - A)C_{II} = E_{II} C_{II}. \qquad (9.9)$$

باستخدام ⟨I | و⟨II | للمستويات الاساسية، يكون لمصفوفة الهاملتونين الشكل المبسط التالي:

$$H_{I,I} = E_I, \qquad H_{I,II} = 0,$$
$$H_{I,II} = 0, \qquad H_{II,II} = E_{II}.$$

لاحظ ان كل من المعادلتين (8.9) و(9.9) تبدو مثل ما كان لدينا في الجزء 8-6 للمعادلة من نظام مستوى واحد. انهم يمتلكوا اعتماد اسي بسيط على الزمن يقابل كل طاقة. مع مرور الوقت فان السعات لكل مستوى تتصرف بشكل منفصل.

المستويين المستقرين $\langle \psi_I \mid$ و$\langle \psi_{II} \mid$ اللذان وجدناهما اعلاه هما حلول للمعادلتين (8.9) و(9.9). المستوي $\langle \psi_I \mid$ (حيث $C_1 = -C_2$) له

$$C_I = e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}, \qquad C_{II} = 0. \qquad (9.10)$$

والمستوى $\langle \psi_{II} \mid$ (حيث $C_1 = C_2$) له

$$C_I = 0, \qquad C_{II} = e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}. \qquad (9.11)$$

تذكر ان السعات في المعادلة (10.9) تكون على النحو التالي:

$$C_I = \langle I \mid \psi_I \rangle, \qquad \text{and} \qquad C_{II} = \langle II \mid \psi_I \rangle;$$

لذلك فان المعادلة (10.9) تعني نفس الشيء مثل

$$\mid \psi_I \rangle = \mid I \rangle \, e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}.$$

وبالتالي فان متجه المستوى للمستوى المستقر $\langle \psi_I \mid$ هو نفس متجه المستوى للمستوى الاساسي $\langle I \mid$ ما عدا للمعامل الاسي المناسب لطاقة المستوى. في الواقع عند $t = 0$ فان

$$\mid \psi_I \rangle = \mid I \rangle;$$

يمتلك المستوى $\langle I \mid$ نفس الترتيب الفيزيائي للمستوى المستقر للطاقة $E_0 + A$. بنفس الطريقة لدينا المستوى المستقر الثاني وهو

$$\mid \psi_{II} \rangle = \mid II \rangle \, e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}.$$

المستوى $\langle II \mid$ هو مستوى مستقر من الطاقة $E_0 - A$ عند $t = 0$. لهذا فان المستويين الجديدين $\langle I \mid$ و$\langle II \mid$ لهما نفس الشكل الفيزيائي للمستويات التي لها طاقة محددة، مع التخلص من المعامل الزمني الاسي بحيث تصبح مستويات اساسية غير معتمدة على الزمن. (فيما يلي سوف نجدها مناسبة للعدم التمييز بين المستويات المستقرة $\langle \psi_I \mid$ و$\langle \psi_{II} \mid$ ومستوياتها الاساسية $\langle I \mid$ و$\langle II \mid$، حيث انها تختلف فقط بمعاملات زمنية واضحة).

في الخلاصة، متجهات المستوى $\langle I \mid$ و$\langle II \mid$ هي زوج من المتجهات الاساسية المناسبة لوصف مستويات الطاقة لجزيء الامونيا. وهي مرتبطة مع متجهاتنا الاساسية الاصلية من خلال

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle - |2\rangle], \qquad |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle + |2\rangle]. \qquad (9.12)$$

السعات لان يكون موجودا في $|I\rangle$ و$|II\rangle$ يرتبط مع C_1 وC_2 بالعلاقة التالية:

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}}[C_1 - C_2], \qquad C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}}[C_1 + C_2]. \qquad (9.13)$$

اي مستوى على الاطلاق يمكن ان يمثل باتحاد خطي من $|1\rangle$ و$|2\rangle$ مع المعاملات C_1 وC_2 – او بالاتحاد الخطي للطاقة المعرفة للمستويات الاساسية $|I\rangle$ و$|II\rangle$ - مع المعاملات C_I وC_{II}. ولهذا فان

$$|\Phi\rangle = |I\rangle C_1 + |2\rangle C_2$$

او

$$|\Phi\rangle = |I\rangle C_I + |II\rangle C_{II}.$$

يعطي الشكل الثاني السعات لإيجاد المستوى $|\Phi\rangle$ في مستوى له طاقة $E_I = E_0 + A$ او في مستوى الطاقة $E_{II} = E_0 - A$.

2-9 الجزيء في مجال كهربي ساكن The molecule in a static electric field

إذا كان جزيء الامونيا في اي من مستويي الطاقة وقمنا بإحداث اضطراب عند تردد ω بحيث ان $\hbar\omega = E_I - E_{II} = 2A$، والنظام يقوم بعمل انتقال من مستوى إلى اخر. او إذا كان في المستوى الاعلى فانه يمكن ان ينتقل إلى المستوى الادنى ويشع فوتون. لكن لكي نستحث مثل هذه الانتقالات يجب ان يكون هناك اتصال فيزيائي للمستويات – بعض الاحيان احداث اضطراب في النظام. هناك بعض الاليات الخارجية للتأثير على المستويات مثل المجالات المغناطيسية او المجالات الكهربائية. في هذه الحالة الخاصة تكون المستويات حساسة للمجال الكهربي. سوف ندرس فيما يلي مشكلة سلوك جزيء الامونيا في مجال كهربي خارجي.

لمناقشة السلوك في المجال الكهربي سوف نعود إلى النظام الاساسي الاصلي $|1\rangle$ و$|2|$، بدلا من استخدام $|I\rangle$ و$|II|$. افترض ان هناك مجال كهربي في اتجاه عمودي على مستوى ذرات الهيدروجين. مع تجاهل بشكل مؤقت امكانية حدوث انقلاب للخلف والامام، فهل من الصحيح ان الطاقة لهذا الجزيء هي نفسها للموضعي ذرة النيتروجين؟ بصفة عامة الاجابة لا. تميل الالكترونات ان تقع بالقرب من النيتروجين أكثر من نواة الهيدروجين، لذلك فان الهيدروجين يكون موجبا. يعتمد المقدار الفعلي على تفاصيل توزيع الالكتروني. ان معرفة التوزيع الالكتروني مشكلة معقدة لكن في اي حالة تكون النتيجة الكلية هي ان جزيء الامونيا يمتلك عزم ثنائي قطب كهربي كما هو موضح في الشكل 9-1. يمكننا ان نستمر بتحليلنا بدون معرفة اتجاه او مقدر ازاحة الشحنة بشيء من التفصيل. على اية حال لكي تكون متوافقة مع الرموز المستخدمة من قبل دعنا نفترض ان عزم ثنائي القطب هو μ مع اتجاه يشير من ذرة النيتروجين وعموديا على مستوى ذرات الهيدروجين.

الان عندما تنقبل ذرة النيتروجين من جانب إلى اخر فان مركز ثقل الكتلة لا يتحرك، لكن عزم ثنائي القطب سوف ينقلب. كنتيجة لهذا فان الطاقة في المجال الكهربي ε سوف تعتمد على الاتجاه الجزيئي. مع اخذ الافتراض اعلاه بعين الاعتبار فان طاقة الجهد سوف تكون اعلى إذا كانت ذرة الهيدروجين تشير في اتجاه المجال، واقل إذا كانت في الاتجاه المعاكس، والانفصال في الطاقتين سوف يكون مساويا لـ $2\mu\varepsilon$.

افترضنا في المناقشة اعلاه قيم E_0 وA بدون معرفة كيف نقوم بحسابهم. طبقا للنظرية الفيزيائية الصحيحة فانه يجب ان يكون من الممكن حساب هذه الثوابت بدلالة المواضع والحركات لكل الانوية والالكترونات. لكن لا أحد قد قام بذلك. تشتمل مثل هذه الانظمة على عشرة الكترونات واربعة انوية وهي مشكلة معقدة جدا. وفي الحقيقة لا يوجد اي شخص يعرف أكثر منا عن هذا الجزيء. كل ما يعرفه الاخرون هو انه عندما يكون هناك مجالا كهربيا تكون الطاقة لمستويين مختلفة ويتناسب الفرق مع المجال الكهربي. نطلق مصطلح معامل التناسب 2μ لكن قيمته يجب ان تحدد عمليا. كما يمكننا ان نقول الجزيء يمتلك السعة A وتنقلب ولكن هذا يجب قياسه عمليا. لا أحد قادر على اعطائنا قيم نظرية دقيقة لكلا من μ وA لان الحسابات معقدة جدا.

لجزيء الامونيا في مجال كهربي يجب ان يكون وصفنا متغيرا. إذا أهملنا السعة للجزيء لكي ينقلب من ترتيب إلى الاخر فإننا نتوقع ان تكون الطاقات للمستويين $\langle 1 \mid$ و$\langle 2 \mid$ لتكون $(E_0 \pm \mu\varepsilon)$. باتباع الخطوات المتبعة في الفصل السابق نحصل على ما يلي:

$$H_{11} = E_0 + \mu\varepsilon, \qquad H_{22} = E_0 - \mu\varepsilon. \tag{9.14}$$

ايضا سوف نفترض ان المجالات الكهربائية لا تؤثر بشكل ملحوظ على هندسة الجزيء ولهذا فانه لا يؤثر على السعة التي يقفز بها النيتروجين من موضع إلى الاخر. يمكننا اخذ كلا من H_{12} وH_{21} لا تتغيران ولذلك فان

$$H_{12} = H_{21} = -A. \tag{9.15}$$

يجب علينا الان ان نقوم بحل معادلات الهاملتونين (43.8) بالأخذ بعين الاعتبار القيم الجديدة لـ H_{ij}. يمكننا ان نحلها كما فعلنا في السابق لكن ولأنه سيكون لدينا العديد من الحالات التي نريد كحلول لأنظمة ثنائية المستويات، دعنا نحل المعادلات مرة واحدة ولجميع الحالات في الحالة العامة لـ Hij اختيارية – بافتراض واحد فقط وهو انها لا تتغير مع الزمن.

نريد الحل العام لزوج معادلات الهاملتونين.

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2, \tag{9.16}$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \tag{9.17}$$

لان هذه المعادلات التفاضلية خطية مع معاملات ثابتة فإننا يمكن ان نجد حلول تكون دوال اسية للمتغير المستقل t. سوف نبحث في البداية عن حل بحيث يكون كلا من C_1 وC_2 نفس الاعتماد على الزمن، ويمكننا ان نستخدم دوال تجريبية

$$C_1 = a_1 e^{-i\omega t}, \qquad C_2 = a_2 e^{-i\omega t}.$$

حيث ان مثل هذا الحل يقابل حالة الطاقة $E = \hbar\omega$، لذلك يمكننا ان نكتب

$$C_1 = a_1 e^{-(i/\hbar)Et}, \tag{9.18}$$

$$C_2 = a_2 e^{-(i/\hbar)Et}, \tag{9.19}$$

حيث ان E غير معرفة حتى الان وسوف نقوم بتحديدها بحيث ان المعادلتين التفاضليتين (16.9) و(17.9) متحققتان.

عندما نعوض عن C_1 وC_2 من المعادلة (18.9) والمعادلة (19.9) في المعادلتين التفاضليتين (16.9) و(17.9) فان المشتقات تعطينا $-iE/\hbar$ مضروبة في C_1 او C_2، لذلك فان الطرف الايسر يصبح فقط EC_1 وEC_2. بإلغاء المعاملات الاسية المشتركة نحصل على ما يلي:

$$Ea_1 = H_{11}a_1 + H_{12}a_2, \qquad Ea_2 = H_{21}a_1 + H_{22}a_2.$$

او بإعادة ترتيب الحدود نحصل على ما يلي:

$$(E - H_{11})a_1 - H_{12}a_2 = 0, \tag{9.20}$$

$$-H_{21}a_1 + (E - H_{22})a_2 = 0. \tag{9.21}$$

مع مثل هذه المجموعة من المعادلات الجبرية المتجانسة يكون هناك حلول غير صفرية لـ a_1 وa_2 فقط إذا كان محدد المعاملات a_1 وa_2 تساوي صفر، وهذا يعني إذا كان

$$\mathrm{Det}\begin{pmatrix} E - H_{11} & -H_{12} \\ -H_{21} & E - H_{22} \end{pmatrix} = 0. \tag{9.22}$$

على اية حال عندما يكون هناك معادلتين فقط ومجهولين فإننا لا نحتاج فكرة معقدة. المعادلتين (20.9) و(21.9) تعطي كل واحدة نسبة للمعاملين a_1 وa_2 وهاتين النسبتين يجب ان تكون متساوية. من المعادلة (20.9) نحصل على ما يلي:

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E - H_{11}}, \tag{9.23}$$

ومن المعادلة (21.9) نحصل على ما يلي:

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{E - H_{22}}{H_{21}}. \tag{9.24}$$

بمساواة هاتين النسبتين نحصل على ان E يجب ان تحقق ما يلي:

$$(E - H_{11})(E - H_{22}) - H_{12}H_{21} = 0.$$

هذه نفس النتيجة التي سنحصل عليها بحل المعادلة (22.9). باي طريقة لدينا معادلة تربيعية لـ E والتي لها حلين هما:

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \qquad (9.25)$$

هناك قيمتين ممكنتين للطاقة E. لاحظ ان كلا الحلين يعطيا اعداد حقيقية للطاقة لان H_{11} وH_{22} حقيقية و$H_{12}H_{21}$ تساوي $|H_{12}|^2=H_{12}H^*_{12}$، والتي هي حقيقية وموجبة.

باستخدام نفس الاصطلاح الذي استخدمناه من قبل سوف نطلق مصطلح الطاقة العليا على E_I والطاقة الدنيا على E_{II}. وبهذا نحصل على ما يلي:

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}, \qquad (9.26)$$

$$E_{II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \qquad (9.27)$$

باستخدام كل من هاتين الطاقتين بشكل منفصل في المعادلتين (18.9) و(19.9)، يكون لدينا السعات للمستويين المستقرين (مستويات الطاقة المحددة). إذا لم يكون هناك اضطرابات خارجية فان النظام الابتدائي في واحد من هذين المستويين سوف يبقى إلى الابد والذي يتغير فقط هو الطور.

يمكننا ان نتحقق من نتائجنا للحالتين الخاصتين. إذا كانت $H_{12} = H_{21} = 0$ ويكون لدينا $E_I = H_{11}$ ويكون ايضا $E_{II} = H_{22}$. هذا بالتأكيد صحيحا لان المعادلتين (16.9) و(17.9) غير متزاوجتين (غير مترابطتين)، وكل منها تمثل حالة من حالة الطاقة H_{11} وحالة الطاقة H_{22}. بعد ذلك إذا وضعنا $H_{11} = H_{22} = E_0$ ووضعنا ايضا $H_{21} = H_{12} = -A$ نحصل على الحل الذي حصلنا عليه من قبل:

$$E_I = E_0 + A \quad \text{and} \quad E_{II} = E_0 - A.$$

للحالة العامة فان الحلين E_I وE_{II} تشير إلى حالتين والتي نطلق عليها مرة اخرى المستويات

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)E_I t} \quad \text{and} \quad |\psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-(i/\hbar)E_{II} t}.$$

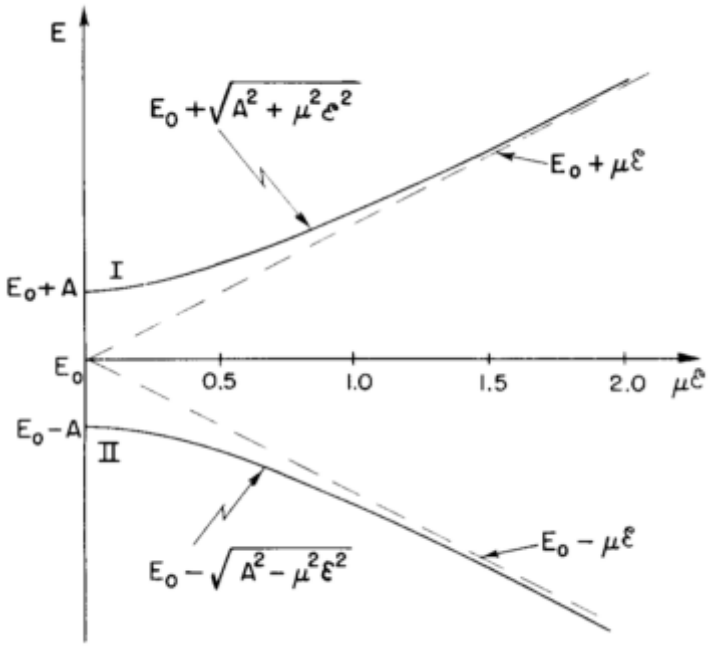
هاتين الحالتين سوف يكون لها C_1 وC_2 كما هو معطى في المعادلتين (18.9) و(19.9)، حيث ان a_1 وa_2 لا تزال بحاجة إلى تحديد. نسبتهما معطاة اما بواسطة المعادلة (23.9) او المعادلة (24.9). انهما يجب ان يحققا واحد او أكثر من الشروط. إذا النظام معروف بانه في واحد من الحالات المستقرة فان مجموع الاحتمالات التي سوف توجد في $|1\rangle$ او $|2\rangle$ يجب ان تكون مساوية للواحد. ويجب ان يكون لدينا ما يلي:

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1, \qquad (9.28)$$

او

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1. \qquad (9.29)$$

هذه الشروط لا تحدد a_1 وa_2 ولا تزال غير محددة بطور اختياري – بمعنى بمعامل مثل $e^{i\delta}$. مع انه بالإمكان كتابة الحلول العامة لـ a's، ولكن في العادة ومن الانسب ان يتم ايجاد حل لكل حالة خاصة.



الشكل 9-2 مستويات الطاقة لجزيء الامونيا في مجال كهربي.

دعنا نعود الان إلى مثالنا الخاص لجزيء الامونيا في مجالا كهربي. باستخدام القيم لـ H_{11} وH_{22} وH_{12} المعطاة في المعادلة (14.9) و(15.9) التي حصلنا عليها لطاقات المستويات المستقرة.

$$E_I = E_0 + \sqrt{A^2 + \mu^2\mathcal{E}^2}, \qquad E_{II} = E_0 - \sqrt{A^2 + \mu^2\mathcal{E}^2}. \qquad (9.30)$$

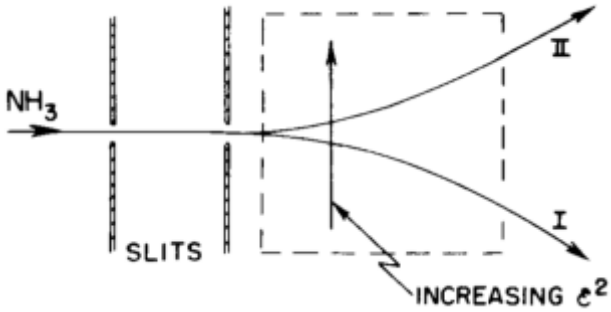
تم رسم هاتين الطاقتين كدالة في شدة المجال الكهربي ε في الشكل 9-2. عندما يكون المجال الكهربي مساويا للصفر، فان الطاقتين تكونا فقط $E_0 \pm A$. عندما يطبق مجالا كهربيا فان الانفصال بين المستويين يزداد. يزداد الانفصال في البداية ببطء مع ε لكن في النهاية يصبح متناسبا مع ε. (المنحنى يكون قطع زائد). لمجالات كهربية قوية جدا تكون الطاقات على النحو التالي:

$$E_I = E_0 + \mu\mathcal{E} = H_{11}, \qquad E_{II} = E_0 - \mu\mathcal{E} = H_{22}. \qquad (9.31)$$

الحقيقة بان هناك سعة للنيتروجين لان ينقلب للخلف والامام لها تأثير طفيف عندما الموقعين يمتلكا طاقات مختلفة. هذه نقطة هامة سوف نعود لها فيما بعد.

اننا الان جاهزون لفهم فكرة تشغيل ميزر الامونيا. هذه الفكرة على النحو التالي. في البداية نجد طريقة لفصل الجزيئات في المستوى $|I\rangle$ عن تلك التي في المستوى $|II\rangle$. من ثم تمر الجزيئات في مستوى الطاقة العالية $|I\rangle$ من خلال تجويف له تردد رنيني مقداره 24,000 مليون دورة. تنقل الجزيئات الطاقة إلى التجويف – بطريقة سوف نناقشها لاحقا – وتترك التجويف في المستوى $|II\rangle$. كل جزيء يقوم بانتقال سوف ينقل الطاقة $E = E_I - E_{II}$ إلى التجويف. سوف تظهر الطاقة من الجزيئات كطاقة كهربية في التجويف.

كيف يمكن فصل مستويات الجزيئات إلى مستويين؟ من احد هذه الطرق هو ترك غاز الامونيا يخرج من فتحة صغيرة ويمر عبر زوج من الشرائح ليعطي شعاع رفيع كما هو موضح في الشكل 9-3.



الشكل 9-3 شعاع الامونيا ينفصل بواسطة المجال الكهربي بحيث ان ε^2 لها تدرج عمودي على الشعاع.

يوجه الشعاع بعد ذلك إلى منطقة يكون فيها مجال كهربي عرضي كبير. الالكترودات الموجودة لإنتاج المجال الكهربي يكون لها شكل محدد بحيث ان المجال الكهربي يتغير بسرعة على امتداد الشعاع. من ثم يكون مربع المجال الكهربي $\boldsymbol{\varepsilon.\varepsilon}$ يمتلك تدرج كبير عموديا على الشعاع. الان الجزيء في المستوى $|I\rangle$ يمتلك طاقة تزداد مع ε^2، ولذلك فان هذا الجزء من الشعاع سوف ينحرف نحو المنطقة التي لها ε^2 منخفضة. الجزيء في المستوى $|II\rangle$ سوف ينحرف نحو المنطقة التي لها ε^2 كبيرة لان الطاقة تتناقص مع زيادة ε^2.

بشكل عرضي، مع المجالات الكهربائية المتولدة في المختبر تكون الطاقة $\mu\varepsilon$ دائما أصغر من A. في مثل هذه الحالات يمكن تقريب الجذر التربيعي في المعادلة (30.9) على النحو التالي:

$$A\left(1+\frac{1}{2}\frac{\mu^2\varepsilon^2}{A^2}\right). \qquad (9.32)$$

لذلك مستويات الطاقة تكون لجميع الاهداف العملية هي

$$E_I = E_0 + A + \frac{\mu^2\varepsilon^2}{2A} \qquad (9.33)$$

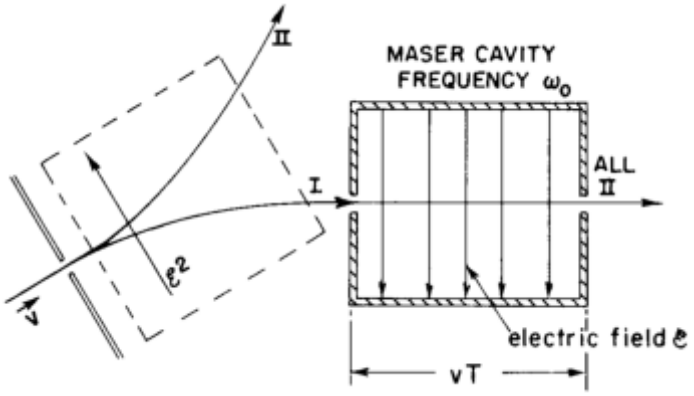
و

$$E_{II} = E_0 - A - \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{2A}. \qquad (9.34)$$

والطاقات تتغير خطيا مع ε^2. القوة المؤثرة على الجزيئات تكون على النحو التالي:

$$F = \frac{\mu^2}{2A} \nabla \mathcal{E}^2. \qquad (9.35)$$

الكثير من الجزيئات لها طاقة في المجال الكهربي يتناسب طرديا مع ε^2. المعامل هو الاستقطاب للجزيئات. يمتلك الامونيا في العادة درجة عالية من الاستقطاب لان A لها قيمة صغيرة في المقام. لهذا فان جزيئات الامونيا تكون حساسة للمجال الكهربي. (ماذا تتوقع ان يكون معامل العزل الكهربي dielectric coefficient لغاز NH_3)؟



الشكل 9-4 مخطط توضيحي لميزر الامونيا.

3-9 انتقالات في مجال معتمد على الزمن Transitions in a time-dependent field

في ميزر الامونيا، الشعاع مع الجزيئات في المستوى $|I\rangle$ وبطاقة E_I يمر من خلال تجويف الرنين كما هو موضح في الشكل 9-4. واما الشعاع الاخر فهو مهمل. يوجد داخل التجويف مجال كهربي متغير مع الزمن، والان سوف نناقش سلوك الجزيء في المجال الكهربي المتغير مع الزمن. لدينا الان نوع مختلف كليا للمشكلة – وهي هاملتونين متغير مع الزمن. حيث ان H_{ij} تعتمد على ε، والـ H_{ij} تتغير مع الزمن، ويجب ان نحدد سلوك النظام في هذه الظروف.

للبدء نقوم بكتابة المعادلات التي يجب ان نقوم بحلها:

$$ih\frac{dC_1}{dt} = (E_0 + \mu\mathcal{E})C_1 - AC_2,$$
$$ih\frac{dC_2}{dt} = -AC_1 + (E_0 - \mu\mathcal{E})C_2. \qquad (9.36)$$

لنكون واضحين دعنا نفترض ان المجال الكهربي يتغير بدالة جيبية ومن ثم نكتب ما يلي:

$$\mathcal{E} = 2\mathcal{E}_0 \cos\omega t = \mathcal{E}_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \qquad (9.37)$$

في العملية الحقيقية يتغير التردد ω بشكل يساوي تردد الرنيني للانتقال الجزيئي $\omega_0 = 2A/\hbar$، لكن في هذه المرحلة نرغب في ان نبقي على كل شيء عاما، لذلك سوف ندعه يمتلك اي قيمة. أفضل طريقة لحل هذه المعادلات هو تكوين دمج خطي لكلا من C_1 وC_2 كما فعلنا من قبل. لذلك سوف نجمع المعادلتين ونقسم على الجذر التربيعي لـ 2 ونستخدم تعريف كلا من C_I وC_{II} الذي حصلنا عليه في المعادلة (13.9). نحصل على ما يلي:

$$ih\frac{dC_{II}}{dt} = (E_0 - A)C_{II} + \mu\mathcal{E}C_I. \qquad (9.38)$$

سوف تلاحظ ان هذه هي نفس المعادلة (9.9) مع حد اضافي ناتج عن المجال الكهربي. بشكل مشابه إذا قمنا بطرح المعادلتين (36.9) نحصل على ما يلي:

$$ih\frac{dC_I}{dt} = (E_0 + A)C_I + \mu\mathcal{E}C_{II}. \qquad (9.39)$$

السؤال الان هو كيف نقوم بحل هذه المعادلات؟ انها أكثر صعوبة من المعادلات التي سبق وان تعاملنا معها لان ε تعتمد على t، والحل لـ $\varepsilon(t)$ العامة لا يمكن التعبير عنه بدوال اولية. لكن يمكننا ان نحصل على تقريب جيد طالما المجال الكهربي صغيرا. في البداية سوف نكتب

$$C_I = \gamma_I e^{-i(E_0+A)t/\hbar} = \gamma_I e^{-i(E_I)t/\hbar},$$
$$C_{II} = \gamma_{II} e^{-i(E_0-A)t/\hbar} = \gamma_{II} e^{-i(E_{II})t/\hbar}. \qquad (9.40)$$

إذا لم يكن هناك مجالا كهربيا، فان هذه الحلول تكون صحيحة مع γ_I وγ_{II} قد اختيرت كثابتين معقدين. في الحقيقة لان احتمالية ان يكون في المستوى $|I\rangle$ يكون مربع C_I واحتمالية ان يكون في المستوى $|II\rangle$ يكون مربع C_{II}، واحتمالية ان يكون في المستوى $|I\rangle$ او المستوى $|II\rangle$ يكون فقط $|\gamma_I|^2$ أو $|\gamma_{II}|^2$. على سبيل المثال إذا كان النظام يبدأ في المستوى $|II\rangle$ اي ان γ_I كان صفرا و$|\gamma_{II}|^2$ يساوي واحد، وهذا الشرط يطبق إلى الابد. لا يوجد هناك اي فرصة إذا كان الجزيء في البداية في المستوى $|II\rangle$ ليكون في المستوى $|I\rangle$.

الان فان فكرة كتابة معادلاتنا في صورة المعادلة (40.9) يكون فقط إذا كانت με صغيرة بالمقارنة مع A، والحلول تكتب بهذه الطريقة لكن تصبح كلا من γ_I وγ_{II} تصبح دوال تتغير ببطء مع الزمن – وهذا بالمقارنة مع الدوال الاسية. هنا يوجد فكرة. سوف نستخدم حقيقة ان γ_I وγ_{II} تتغيران ببطء للحصول على حلول تقريبية.

نريد الان ان نستبدل C_I من (40.9) في المعادلة التفاضلية (39.9)، لكن يجب ان نتذكر ان γ_I هي ايضا دالة في t. نحصل على ما يلي:

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = E_I\gamma_I e^{-iE_I t/\hbar} + i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} e^{-iE_I t/\hbar}.$$

تصبح المعادلات التفاضلية على النحو التالي:

$$\left(E_I\gamma_I + i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt}\right) e^{-(i/\hbar)E_I t} = E_I\gamma_I e^{-(i/\hbar)E_I t} + \mu\mathcal{E}\gamma_{II} e^{-(i/\hbar)E_{II} t}. \qquad (9.41)$$

بالمثل، المعادلة في dC_I/dt تصبح على النحو التالي:

$$\left(E_{II}\gamma_{II} + i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt}\right) e^{-(i/\hbar)E_{II} t} = E_{II}\gamma_{II} e^{-(i/\hbar)E_{II} t} + \mu\mathcal{E}\gamma_I e^{-(i/\hbar)E_I t}. \qquad (9.42)$$

الان سوف تلاحظ اننا لدينا حدود متساوية على كلا الطرفين من كل معدلة. سوف نلغيهما مع بعض ونضرب المعادلة الاولى في $e^{+iE_I t/\hbar}$ والثانية في $e^{+iE_{II} t/\hbar}$. تذكر ان $(E_I - E_{II}) = 2A = \hbar\omega_0$ ، وفي النهاية يكون لدينا ما يلي:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} &= \mu\mathcal{E}(t) e^{i\omega_0 t}\gamma_{II}, \\ i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} &= \mu\mathcal{E}(t) e^{-i\omega_0 t}\gamma_I. \end{aligned} \qquad (9.43)$$

الان لدينا زوج من المعادلات ولا تزال معادلات تامة، المشتقة لمتغير واحد هي دالة في الزمن $\mu\mathcal{E}(t)e^{i\omega_0 t}$، مضروبة في المتغير الثاني، والمشتقة الثانية هي ايضا نفس الدلة في الزمن مضروبة في الاولى. بالرغم من ان هذه المعادلات بسيطة الا انها لا تحل بصفة عامة، وسوف نقوم بحلها باستخدام بعض الحالات الخاصة.

اننا في هذه المرحلة مهتمون فقط في حالة تذبذب مجالا كهربيا. بأخذ ε(t) كما هو معطى في المعادلة (37.9)، سوف نجد ان المعادلات لـ γ_I وγ_{II} تصبح على النحو التالي:

$$i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} = \mu\mathcal{E}_0[e^{i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t}]\gamma_{II},$$
$$i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} = \mu\mathcal{E}_0[e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}]\gamma_I. \qquad (9.44)$$

الان إذا ε_0 صغيرة بدرجة كافية فان معدلات التغير لـ γ_I وγ_{II} تكون صغيرة ايضا. وكلا الـ γ لا يتغير كثيرا مع الزمن t، وبالأخص بالمقارنة مع التغيرات السريعة الناتج عن الحدود الاسية. هذه الحدود الاسية تمتلك اجزاء حقيقية واجزاء تخيلية تتذبذب عند تردد $\omega+\omega_0$ او $\omega-\omega_0$. الحد الذي به $\omega+\omega_0$ تتذبذب بسرعة كبيرة حول قيمة متوسطة للصفر ولهذا لا تساهم كثيرا بمعدل تغير γ. لذلك يمكننا ان نقوم بتقريب منطقي باستبدال هذه الحدود بقيم متوسطة، وبالتحديد صفر. سوف نتركها ونأخذها كتقريب:

$$i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} = \mu\mathcal{E}_0 e^{-i(\omega-\omega_0)t}\gamma_{II},$$
$$i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} = \mu\mathcal{E}_0 e^{i(\omega-\omega_0)t}\gamma_I. \qquad (9.45)$$

حتى الحدود المتبقية الاسية التي تتناسب مع $\omega-\omega_0$، سوف تتغير بسرعة ايضا ما لم تكون ω قريبة من ω_0. فقط في هذه الحالة يتغير الطرف الايمن ببطء بحيث ان اي مقدار كبير سوف يتجمع عندما نقوم بإجراء تكامل للمعادلات بالنسبة للزمن t. بمعنى انه في حالة وجود مجال كهربي ضعيف فان الترددات الهامة هي تلك التي تكون بالقرب من ω_0.

مع التقريب الذي قمنا به في الحصول على المعادلة (45.9)، فان المعادلات يمكن حلها ولكن بصعوبة لذلك لن نقوم بها حتى وقت لاحق عندما نأخذ مسالة اخرى من نفس النوع. والان سوف نقوم بحلها بالتقريب او ايجاد الحل التام لحالة الرنين عندما $\omega=\omega_0$، والحل التقريبي للترددات القريبة من الرنين.

4-9 الانتقالات عند الرنين Transitions at resonance

دعنا نأخذ حالة الرنين في البداية. اذا اخذنا $\omega=\omega_0$ فان الحدود الاسية تتساوى على طرفي معادلات (45.9)، ونحصل على ما يلي:

$$\frac{d\gamma_I}{dt} = -\frac{i\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\gamma_{II}, \qquad \frac{d\gamma_{II}}{dt} = -\frac{i\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\gamma_I. \qquad (9.46)$$

إذا قمنا في البداية بحذف γ_I ومن ثم حذف γ_{II} من هذه المعادلات سوف نجد ان كل منها يحقق المعادلة التفاضلية للحركة التوافقية البسيطة:

$$\frac{d^2\gamma}{dt^2} = -\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)^2\gamma. \qquad (9.47)$$

الحلول العامة لهذه المعادلات يمكن ان تكون في صورة جيب او جيب تمام.

كما يمكنك ان تتحقق بسهولة ان المعادلات التالية هي حلول:

$$\gamma_I = a\cos\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)t + b\sin\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)t,$$
$$\gamma_{II} = ib\cos\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)t - ia\sin\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)t, \qquad (9.48)$$

حيث ان a و b هي ثوابت يتم تحديدها لتناسب اي حالة فيزيائية خاصة.

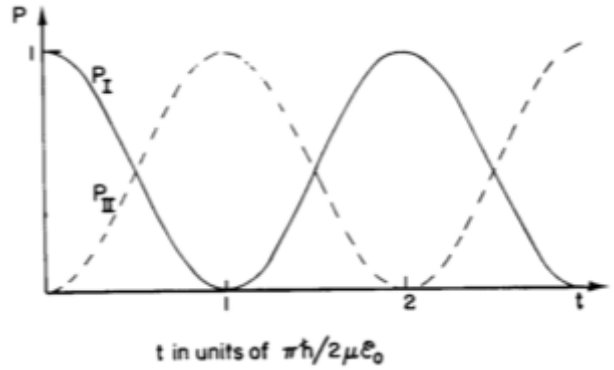
على سبيل المثال افترض انه عند t = 0 فان نظامنا الجزيئي يكون في مستوى الطاقة العلوي $|I\rangle$، والذي يتطلب – من المعادلة (40.9) – ان $\gamma_I=1$ و$\gamma_{II}=0$ عند t = 0. لهذه الحالة سوف نحتاج لان تكون a=1 و b=0. والاحتمالية بان يكون الجزيء في المستوى $|I\rangle$ بعد مرور زمن t تساوي الجذر التربيعي لـ γ_I أو

$$P_I = |\gamma_I|^2 = \cos^2\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)t. \qquad (9.49)$$

بالمثل فان الاحتمالية بان يكون الجزيء في المستوى $|II\rangle$ تعطى بالجذر التربيعي لـ γ_{II}،

$$P_{II} = \gamma_{II}^2 = \sin^2\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)t. \qquad (9.50)$$

طالما ε صغيرة وعند الرنين فان الاحتماليات تعطى بدوال تذبذب بسيطة. الاحتمالية لان يكون في المستوى $|I\rangle$ تتناقص من 1 إلى 0 والعودة مرة اخرى، في حين ان الاحتمالية لان يكون في المستوى $|II\rangle$ تزداد من 0 إلى 1 والعودة.. التغير الزمني للاحتماليتين موضحة في الشكل 9-5. لا نحتاج ان نقول ان مجموع الاحتمالين دائما يساوي 1، والجزيء يكون في مستوى ما!



الشكل 9-5 احتماليات المستويين لجزيء الامونيا في مجال كهربي جيبي.

دعنا نفترض انه يتطلب من الجزيء زمن مقداره T لينتقل عبر التجويف. إذا قمنا بجعل التجويف طويل كفاية بحيث ان $\mu\mathcal{E}_0T/\hbar = \pi/2$، وبالتالي فان الجزيء الذي يدخل في المستوى $|I\rangle$ سوف يغادره بالتأكيد في

المستوى $|II\rangle$. إذا دخل التجويف في المستوى العلوي فانه يترك التجويف في المستوى السفلي. بمعنى ان طاقته تتناقص والفقدان في الطاقة لا يمكن ان تذهب إلى اي مكان اخر لكن إلى الالة والتي تولد المجال. التفاصيل والتي يمكنك ان ترى كيف ان طاقة الجزيء تدخل في تذبذبات التجويف ليست سهلة، ولكن لا نحتاج إلى دراستها بالتفصيل لأننا يمكن استخدام مبدأ الحفاظ على الطاقة. (يمكننا ان ندرسها إذا توجب ذلك لكن في هذه الحالة يجب ان نتعامل مع ميكانيكا الكم للمجال في التجويف بالإضافة إلى مكانياك الكم للذرة).

الخلاصة: يدخل الجزيء التجويف ومجال التجويف يتذبذب عند التردد المناسب – يستحث انتقالات من المستوى الاعلى إلى المستوى الادنى، والطاقة المتحررة تدخل في المجال المتذبذب. في عملية تشغيل الميزر تعطي الجزيئات طاقة كافية للحفاظ على تذبذبات التجويف – لا توفر طاقة كافية لتعويض الفقد في التجويف فحسب ولكن لتعطي مقادير صغيرة من الطاقة يمكن استخلاصها من التجويف. لهذا فان الطاقة الجزيئية تتحول إلى طاقة المجال الكهرومغناطيسي الخارجي.

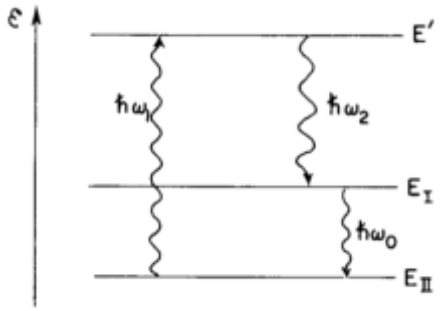
تذكر انه قبل ان يدخل الشعاع إلى التجويف علينا ان نستخدم مرشح (فلتر) لفصل الشعاع بحيث نسمح بدخول المستوى العلوي. من السهل ان نوضح هذا الامر حيث انه إذا بدأت الجزيئات من المستوى الادنى فان العملية تبدأ من المستوى الاعلى وتخرج الطاقة من التجويف. اما اذا ادخلت شعاع غير مفلتر فان الكثير من الجزيئات سوف تمتص الطاقة من الطاقة المبذولة وبهذا لا يحدث شيء يذكر. في العملية الفعلية ليس من الضروري بالطبع ان نجعل $(\mu\varepsilon_0 T/\hbar)$ مساويا لـ $\pi/2$. لأي قيم اخرى (ما عدا ان التكامل يساوي مضاعفات الـ π)، هناك بعض الاحتمالية للانتقالات من المستوى $|I\rangle$ إلى المستوى $|II\rangle$. للقيم الاخرى لا تكون كفاءة الجهاز 100%، حيث ان العديد من الجزيئات التي تغادر التجويف والتي من المفترض انها تعطي بعض الطاقة للتجويف لكن لا تفعل.

في حالة الاستخدام الفعلي نعلم ان سرعة كل الجزيئات غير متساوية حيث تمتلك توزيع ماكسويل. وهذا يعني ان الازمنة الدورية المثالية للجزيئات المختلفة سوف تكون مختلفة وبالتالي من المستحيل ان نحصل على كفاءة 100% لكل الجزيئات مرة واحدة. بالإضافة إلى ان هناك تعقيدات اخرى والتي من السهل ان تؤخذ في الحسبان ولكن لا نريد ان نشغل بالنا بها في هذه المرحلة. تذكر ان المجال الكهربي في التجويف عادة يتغير من مكان إلى اخر عبر التجويف. لهذا فانه عندما تنجرف الجزيئات عبر التجويف فان المجال الكهربي عند الجزيء يتغير بطريقة أكثر تعقيدا من التذبذب الجيبي البسيط في الزمن كما افترضنا. بوضوح فان من المفترض استخدام تكامل أكثر تعقيدا لحل المسألة بدقة لكن الفكرة العامة لا تزال نفسها.

هناك طريقة اخرى لصناعة الميزرات. بدلا من فصل الذرات في المستوى $|I\rangle$ عن تلك في المستوى $|II\rangle$ بواسطة معدات ستيرن وجارليتش، فانه من الممكن ان تكون الذرات في التجويف (مثل الغاز او المادة الصلبة) وتنتقل الذرات من المستوى $|II\rangle$ إلى المستوى $|I\rangle$ بطريقة ما. من هذه الطرق استخدام ما يعرف بميزر المستويات الثلاثة. وهنا يكون النظام الذري المستخدم يمتلك ثلاثة مستويات من الطاقة كما هو موضح في الشكل 9-6، مع الخواص الخاصة التالية. يمتص النظام اشعاع (مثل الضوء) بتردد $\hbar\omega_1$ وتنتقل من مستوى الطاقة الادنى E_{II} إلى مستوى طاقة اعلى E'، وبسرعة تنبعث فوتونات بتردد $\hbar\omega_2$ وتنتقل الذرات إلى مستوى الطاقة $|I\rangle$ بطاقة E_I. يمتلك المستوى $|I\rangle$ فترة عمر طويلة وبهذا يزداد تعداده وهذا الشرط المناسب لتشغيل

الميزر بين المستويين $\langle I \mid$ و$\mid II \rangle$. بالرغم من ان مثل هذا الجهاز يعرف باسم ميزر المستويات الثلاثة الا ان تشغيل الميزر في الحقيقة تعمل مثل لو كان النظام من مستويين.

الليزر (تكبير الضوء بواسطة الانبعاث المستحث للإشعاع) هو عبارة عن ميزر لكن يعمل في الترددات البصرية. يحتوي تجويف الليزر في العادة على مرآتين مستويتين تتولد بينهما امواج موقوفة.



الشكل 9-6 مستويات الطاقة لميزر المستويات الثلاثة.

9-5 الانتقالات بعيدا عن الرنين Transitions off resonance

في النهاية نرغب في ايجاد كيف ان المستويات تتغير في حالة ان يكون تردد التجويف قريبا من ω_0 ولكن لا تساويها. يمكننا ان نقوم بحل هذه المشكلة لكن عوضا عن ذلك سوف نأخذ حالة هامة وهي ان المجال الكهربي صغيرا وكذلك الزمن الدوري T صغيرا، بذلك فان $\mu\mathcal{E}_0 T/\hbar$ يكون اقل من الواحد. ومن ثم حتى في حالة الرنين التي قمنا بالتعامل معها فان الاحتمالية لعمل انتقال صغيرا. افترض مرة اخرى ان مع $\gamma_I=1$ و$\gamma_{II}=0$. خلال الزمن T فإننا نتوقع ان γ_I تبقى قريبة من 1 وγ_{II} تبقى صغيرة جدا بالمقارنة مع الوحدة. وبالتالي تصبح المشكلة سهلة ويمكننا ان نقوم بحساب γ_{II} من المعادلة الثانية (45.9) وبأخذ γ_I مساوية للواحد والتكامل من t=0 إلى t=T. نحصل على ما يلي:

$$\gamma_{II} = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\left[\frac{1 - e^{i(\omega-\omega_0)T}}{\omega - \omega_0}\right]. \qquad (9.51)$$

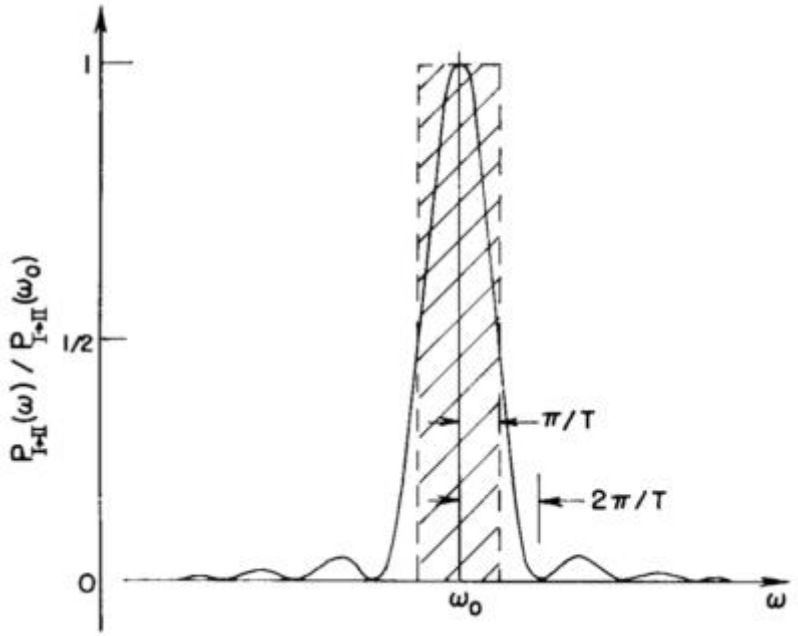
تعطي γ_{II} المستخدمة في المعدلة (40.9) السعة للانتقال من المستوى $\langle I \mid$ إلى المستوى $\mid I\, I \rangle$ خلال فترة زمنية T. الاحتمالية P(I→II) للقيام بالانتقال هي $|\gamma_{II}|^2$ او

$$P(I \to II) = |\gamma_{II}|^2 = \left[\frac{\mu\mathcal{E}_0 T}{\hbar}\right]^2 \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)T/2]}{[(\omega - \omega_0)T/2]^2}. \qquad (9.52)$$

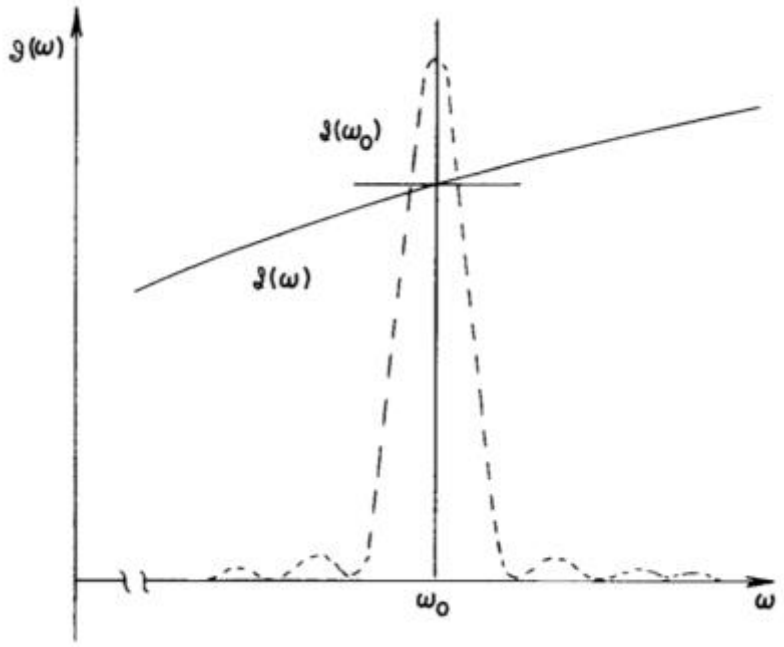
من الشيق ان نقوم برسم هذه الاحتمالية لطول ثابت من الزمن كدالة في تردد التجويف لكي نرى كيف هي حساسة للترددات القريبة من تردد الرنين ω_0. نبين ان مثل هذا المخطط لـ P(I→II) في الشكل 9-7. (تم تعديل المقياس الرأسي لتكون 1 عند قمته وبالقسمة على قيمة الاحتمالية عند $\omega=\omega_0$). لقد رأينا ان منحنى مثل

هذا في نظرية الحيود. يتناقص المنحنى بشكل مفاجئ إلى الصفر لـ $(\omega-\omega_0)=2\pi/T$ ولا تكتسب زيادة ملحوظة عند مناطق الترددات الكبيرة. في الحقيقة، الجزء الكبير من المساحة تحت المنحنى يقع داخل المدى $\pm\pi/T$. ومن الممكن ان نثبت ان المساحة تحت المنحنى تساوي $2\pi/T$ وهي مساوية لمساحة المستطيل المظلل في الشكل.

دعنا نختبر تأثير نتائجنا على الميزر الحقيقي. افترض ان جزيء الامونيا في التجويف لفترة معقولة من الزمن، لتكن مثلا 1 ms. ومن ثم لـ $f_0 = 24{,}000$ مليون دورة، فإننا نحسب ان الاحتمالية للانتقال تتناقص إلى الصفر لانزياح في التردد بمقدار $(f-f_0)/f_0=1/f_0T$، وهو عبارة عن خمسة اجزاء في 10^8. عمليا فان التردد يجب ان يكون قريبا جدا لـ ω_0 حتى نحصل على احتمالية انتقال كبيرة. يعتبر مثل هذا التأثير الاساس للدقة العالية التي يمكن الحصول عليها من الساعات الذرية والتي تعمل على مبدأ الميزر.



الشكل 9-7 احتمالية الانتقال لجزيء الامونيا كدالة في التردد.



الشكل 9-8 شدة الطيف $g(\omega)$ يمكن تقريبها بواسطة قيمتها عند ω_0.

6-9 امتصاص الضوء The absorption of light

معالجتنا السابقة تطبق على حالة أكثر عمومية من ميزر الامونيا. لقد تعاملنا مع سلوك جزيء تحت تأثير المجال الكهربي، وسواء كان هذا المجال محصور في التجويف او لا. لذلك فمن الممكن ببساطة ان نقوم بتسليط شعاع من الضوء عند ترددات الميكروويف على الجزيء والسؤال عن مقدار الاحتمالية لحدوث الانبعاث او الامتصاص. معادلاتنا تطبق بالتساوي على هذه الحالة، لكن دعنا نعيد كتابتهم بدلالة شدة الاشعاع بدلا من المجال الكهربي. إذا عرفنا الشدة $\mathcal{I}$ على انها متوسط الطاقة المتدفقة لكل وحدة مساحة ولكل وحدة زمن، وبالتالي من الفصل 27 من الجزء II يمكننا ان نكتب ما يلي:

$$\mathcal{I} = \epsilon_0 c^2 |\mathcal{E} \times \boldsymbol{B}|_{\text{ave}} = \tfrac{1}{2}\epsilon_0 c^2 (\mathcal{E} \times \boldsymbol{B})_{\max} = 2\epsilon_0 c \mathcal{E}_0^2.$$

(اقصى قيمة لـ ε هي $2\varepsilon_0$). واحتمالية الانتقال تصبح الان على النحو التالي:

$$P(I \to II) = 2\pi \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 c}\right] \mathcal{I} T^2 \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)T/2]}{[(\omega - \omega_0)T/2]^2}. \qquad (9.53)$$

من الطبيعي ان الضوء المسلط على هكذا نظام ليس ضوء احادي اللون. لهذا فانه من الشيق ان نقوم بحل مسألة اخرى – وهي حساب احتمالية الانتقال عندما تكون شدة الضوء $\vartheta(\omega)$ لكل وحدة تردد تغطي مدى واسع يشتمل على ω_0. ومن ثم فان احتمالية الانتقال من $|I\rangle$ إلى $|II\rangle$ سوف تصبح تكامل

$$P(I \to II) = 2\pi \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 c}\right] T^2 \int_0^\infty \vartheta(\omega) \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)T/2]}{[(\omega - \omega_0)T/2]^2}\, d\omega. \qquad (9.54)$$

بصورة عامة فان $\vartheta(\omega)$ سوف تتغير ببطء أكثر عند ω أكثر من حد الرنين الحاد. من الممكن ان تبدو الدالتين على النحو الموضح في الشكل 9-8. في مثل هذه الحالة يمكننا ان نستبدل $\vartheta(\omega)$ بقيمتها $\vartheta(\omega_0)$ عند مركز منحنى الرنين الحاد واخراجها من التكامل. ما يتبقى هو التكامل تحت المنحنى الموضح في الشكل 9-7 والذي يساوي $2\pi/T$. نحصل على النتيجة التالية:

$$P(I \to II) = 4\pi^2 \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 c}\right] \vartheta(\omega_0) T. \qquad (9.55)$$

هذه نتيجة هامة لأنها نظرية عامة لامتصاص الضوء بواسطة اي نظام جزيئي او ذري. بالرغم من اننا بدأنا بحالة يكون فيها المستوى $|I\rangle$ اعلى طاقة من المستوى $|II\rangle$ فان اي من مناقشاتنا تعتمد على هذه الحقيقة. حيث ان المعادلة (55.9) لا تزال متحققة إذا كان المستوى $|I\rangle$ يمتلك طاقة اقل من $|II\rangle$، ومن ثم فان $P(I\to II)$ يمثل احتمالية الانتقال مع امتصاص طاقة من الامواج الكهرومغناطيسية الساقطة. ان امتصاص الضوء بواسطة اي نظام ذري تشتمل دائما على سعة الانتقال في المجال الكهربي المتذبذب بين مستويين منفصلين بطاقة مقدارها $E = \hbar\omega_0$. وهذا تتحقق ايضا لأي حالة خاصة وتعطي صيغة مثل تلك في المعادلة (55.9). لهذا فإننا نؤكد على ان المزايا التالية لهذه النتيجة. اولا، تتناسب الاحتمالية طرديا مع T. بمعنى ان هناك ثابت للاحتمالية لكل وحدة زمن بان الانتقالات سوف تحدث. ثانيا، هذه الاحتمالية تتناسب طرديا مع شدة الضوء الساقط على النظام. واخيرا، تتناسب احتمالية الانتقال طرديا مع μ^2، حيث ان $\mu\varepsilon$ تعرف الانزياح في الطاقة والناتج عن المجال الكهربي ε. بسبب هذا فان $\mu\varepsilon$ تظهر ايضا في المعادلتين (38.9) و(39.9) كحد ازدواج مسؤولا عن الانتقال بين المستويين $|I\rangle$ و$|II\rangle$. بمعنى انه لقيم ε صغيرة فان $\mu\varepsilon$ تعرف بحد الاضطراب في عنصر مصفوفة الهاملتونين والذي يربط المستويين $|I\rangle$ و$|II\rangle$. في الحالة العامة نستبدل $\mu\varepsilon$ بعنصر المصفوفة $\langle II|H|I\rangle$ (انظر القسم 5-6).

تحدثنا في الجزء I (القسم 42-5) حول العلاقات بين الامتصاص والانبعاث المستحث والانبعاث التلقائي بدلالة معاملات اينشتين A وB. هنا لدينا طريقة ميكانيكا الكم لاحتساب هذه المعاملات. وما استخدمناه هنا $P(I\to II)$ لجزيء الامونيا المكون من مستويين يطابق بدقة معامل الامتصاص B_{nm} لنظرية اينشتين للإشعاع. لجزيء الامونيا المعقد – والذي يعد صعب جدا لأي أحد بحسابه – اخذنا عنصر المصفوفة $\langle II|H|I\rangle$ على انه $\mu\varepsilon$ حيث يتم الحصول على μ من التجربة. لأنظمة ذرية ابسط فان μ_{mn} والتي تخص اي انتقال خاص يمكن ان تحسب من التعريف التالي:

$$\mu_{mn}\mathcal{E} = \langle m\,|H|\,n\rangle = H_{mn}, \qquad (9.56)$$

حيث ان Hmn هو عنصر مصفوفة الهاملتونين والذي يشتمل على تأثيرات المجال الكهربي الضعيف. وμ_{mn} المحسوبة بهذه الطريقة تعرف على انها عنصر مصفوفة ثنائي القطب الكهربي. نظرية ميكانيكا الكم لامتصاص وانبعاث الضوء تختزل إلى احتساب عناصر هذه المصفوفة للأنظمة الذرية الخاصة.

ان دراستنا لنظام بسيط من مستويين قد ادى بنا لفهم المشكلة العامة لامتصاص وانبعاث الضوء.