طرق تقريبية لحل مسائل ميكانيكا الكم
Approximative methods in solving quantum mechanics problems

لقد تم سابقاً معالجة وحل معظم المسائل الفيزيائية (مثل المتذبذب التوافقي، ذرة الهيدروجين وجسيم بداخل مربع أو مستطيل جهد) حلاً كاملاً. هذه المسائل لها الهملتونيان البسيط والخاص بها وبالتالي استطعنا حل معادلات شرودنجر وحصلنا على طاقة المستويات ودوالها المميزة. وفى الحقيقة أنه توجد أنظمة فيزيائية أخرى مهمة ولا يكون لها حل متكامل. وذلك ناشئ من تعقد معادلة شرودنجر نظراً لوجود حد الجهد فيها. مثال لهذه النظم: ذرة الهليوم أو ذرة الهيدروجين في مجال كهربي أو مغناطيسي أو كليهما معاً. ولحل هذه المسائل يجب أن نلجأ إلى طرق تقريبية مختلفة، :

* **نظريـة الاضطراب** **Perturbation theory**
* **نظريـة التغاير** Variational theory
* WKB approximation

نظريـة الاضطراب
Perturbation theory

1. **<u>المقدمة:</u>**

في المحاضرات السابقة عولجت مسائل ميكانيكا الكم البسيطة والتي تعطي حلولا دقيقة لمعادلة شرودينجر وذلك لأننا درسنا هاملتوني الطاقة البسيط بدون أي مؤثرات جانبية ،ولكن المسألة الحقيقية ليست كذلك وليست بتلك الدقة بل هناك تشويشات صغيرة نسبيا تؤثر على دقة القيم الذاتية وعلى الدالة الموجية وبالتالي سندرس الهاملتوني كمجموع حدين الحد الأول يمثل الحد الدقيق والحد الثاني الحد المشوش.

2. **<u>نظرية الاضطراب المستقلة عن الزمن:</u>**

وهي طريقة تقريبية لحل معادلة شرودينجر حيث تعطى معادلة شرودينجر غير المشوشة بالعلاقة التالية:

$$\hat{H}_0 u_m = E_m u_m$$
$$m = 0, 1, 2, 3, \dots \qquad (1)$$

ونعتبر الهاملتوني المشوش كمجموع حدين كما يلي :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$$
$$where \quad 1 \ge \lambda > 0$$
$$\hat{H}\psi = \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'\right)\psi = w\,\psi \qquad (2)$$

حيث $\hat{H}'$ عامل التشويش أو مقدار الانحراف عن الهاملتوني غير المضطرب، w الطاقة التي تحوي القسم المضطرب والتي يمكن معالجتها مع الدالة الموجية بنشرهما كسلسلة طاقة من الشكل :

$$\psi = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i \psi_i^n$$
$$\psi = \psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + ...$$
$$w = w_0^n + \lambda^1 w_1^n + \lambda^2 w_2^n + ... \qquad (3)$$

حيث i رتبة التشويش و n الى مستوي الطاقة المدروس ويمكن إسقاط هذا الرمز في المعادلات القادمة للتقليل من الرموز غير الضرورية. وبتعويض العلاقة (3) في العلاقة (2) نجد:

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'\right)\left(\psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + ...\right) = \left(w_0^n + \lambda^1 w_1^n + \lambda^2 w_2^n + ...\right) \times$$
$$\left(\psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + ...\right) \qquad (5)$$

بفك الأقواس في المعادلة(5) ومساواة معاملات λ المرفوعة لنفس الأس من الطرفين نجد ما يلي:

$$\hat{H}_0 \psi_0 = w_0 \psi_0$$
$$\hat{H}_0 \psi_1 + \hat{H}' \psi_0 = w_0 \psi_1 + w_1 \psi_0$$
$$\hat{H}_0 \psi_2 + \hat{H}' \psi_1 = w_0 \psi_2 + w_1 \psi_1 + w_2 \psi_0 \qquad (6)$$

بمقارنة العلاقة الأولى من (6) مع العلاقة(1) نجد أن :

$$\psi_0 = u_m$$
$$w_0 = E_m \qquad (7)$$

والقيم في العلاقة (7) تمثل القيم والدوال الخاصة في حال غياب التشويش(الاضطراب) أو **حلول المرتبة صفر.**

- **نعالج الآن حلول اضطراب المرتبة الأولى:**

يمكن كتابة الدالة الموجية ذات الاضطراب من المرتبة الأولى بالشكل التالي:

$$\psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n \qquad (8)$$

بتعويض العلاقة (8) في العلاقة الثانية من العلاقات (6) نجد:

$$\psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n$$
$$\hat{H}_0 \psi_1 + \hat{H}' \psi_0 = w_0 \psi_1 + w_1 \psi_0$$
$$\hat{H}_0 \sum_n a_n^1 u_n + \hat{H}' u_m = E_m \sum_n a_n^1 u_n + w_1 u_m$$
$$\sum_n a_n^1 E_n u_n + \hat{H}' u_m = E_m \sum_n a_n^1 u_n + w_1 u_m \qquad (9)$$

بضرب العلاقة الأخيرة في (9) بـ u_k^* من الطرفين ومن اليسار ثم تطبيق رموز ديراك نجد:

$$\sum_n a_n^1 E_n u_n + \hat{H}' u_m = E_m \sum_n a_n^1 u_n + w_1 u_m$$

$$\langle u_k \| \sum_n a_n^1 E_n u_n \rangle + \langle u_k | \hat{H}' | u_m \rangle = \langle u_k \| E_m \sum_n a_n^1 u_n \rangle + \langle u_k \| w_1 u_m \rangle$$

$$if \qquad \langle u_n | u_k \rangle = \delta_{nk} \Rightarrow$$

$$\sum_n a_n^1 E_n \delta_{kn} + \hat{H}'_{km} = E_m \sum_n a_n^1 \delta_{kn} + w_1 \delta_{km}$$

$$when \quad k = n \Rightarrow$$

$$a_k^1 E_k + \hat{H}'_{km} = E_m a_k^1 + w_1 \delta_{km}$$

$$when \quad k \neq m$$

$$a_k^1 E_k + \hat{H}'_{km} = E_m a_k^1$$

$$a_k^1 = \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)}$$

$$when \quad k = m \Rightarrow w_1 = H'_{mm}$$

$$a_m^1 E_m + H'_{mm} = E_m a_m^1 + w_1 \delta_{mm}$$

$$a_m^1 (E_m - E_m) = w_1 - H'_{mm} = 0 \Rightarrow a_m^1 = 0 \qquad (10)$$

العلاقة الأخيرة من (10) مقدار التصحيح من المرتبة الأولى للطاقة E_m ، أما المعادلة (8) فيمكن معالجتها كما يلي:

$$a_k^1 E_k + \hat{H}'_{km} = E_m a_k^1 + w_1 \delta_{km}$$

$$when \quad k \neq m \Rightarrow a_k^1 = \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)}$$

$$when \quad k = m \Rightarrow a_m^1 E_m + H'_{mm} = E_m a_m^1 + w_1 \delta_{mm}$$

$$a_m^1 (E_m - E_m) = w_1 - H'_{mm} = 0 \Rightarrow a_m^1 = 0$$

$$if \quad m = n \Rightarrow \psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n$$

$$\psi_1 = a_m^1 u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k = 0 u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\psi_1 = \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$then \quad \psi = \psi_0 + \psi_1 \Rightarrow$$

$$\psi = \psi_0 + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\psi = u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$and \ (\lambda = 1) \qquad w = w_0 + w_1 = E_m + H'_{mm} \qquad (11)$$