Ders 32

Metindeki ilgili bölümler §5.2

Dejenere Pertürbasyon Teorisi (Devam)

Dejenere pertürbasyon teorisi aşağıdaki sonuçlara yol açıyor (türetimlerin ayrıntılarını görmek için kitabınıza bakın). Pertürbe edilmemiş özdeğerde dejenerelik varken enerji ve özvektörlere gelen birinci mertebeden düzeltmeleri hesaplamak için aşağıdaki gibi ilerlenir.

1. Adım

V pertürbasyonunun d boyutlu dejenere altuzayına $\tilde{V}$ kısıtlamasını düşünün. $\tilde{V}$ şöyle tanımlanır. D'den bir vektöre V'nin etkisi Hilbert uzayında başka bir vektördür. Bu vektrörün D yönündeki bileşenini alın, yani bunu tekrar D'ye yansıtın. Bu işlem D'den kendisine Hermitesel doğrusal bir $\tilde{V}$ dönüşümü tanımlar. Pratikte, $\tilde{V}$'yı hesaplamanın en uygun yolu D için bir baz seçmektir. V'nin matris elemanlarını bu bazda hesaplayın. Şimdi, $\tilde{V}$'yı temsil eden $d \times d$ Hermitesel bir matris bulunmuş olur.

2. Adım

$\tilde{V}$'nın özdeğer ve özvektörlerini bulun. Yine, bunu yapmanın en uygun yolu $\tilde{V}$'nın matris formunu kullanmaktır.

3. Adım

$E_n^{(0)}$'ın birinci mertebeden enerji düzeltmeleri, $\tilde{V}$'nın özdeğerleridir. Gerçek özdeğerlere karşılık gelen gerçek özvektörlerin sıfırıncı mertebe limiti, özdeğerlere gelen birinci mertebeden düzeltmelere karşılık gelen $\tilde{V}$'nın özvektörleridir.

4. Adım

Özdeğerlere gelen birinci mertebeden düzeltmeler daha önceki formülle aynı şekilde verilir, ama şimdi toplamda D'den gelen vektörler hariç tutulur. Sıfırıncı mertebeden özvektörler 3. adımda tanımlananlardır.

İlk bakışta, bu adımlar oldukça karışık görünüyor. Aslında bu kadar kötü değildir. Bir örnek bu şeyleri daha açık hale getirmek için faydalı olacaktır.

Örnek : Aşırı inceyapı

İnceayar yapısı çekirdeksel ve elektronik spin etkileşiminden kaynaklanır. Hidrojen atomu özelinde bunu aşağıdaki gibi modelleyebiliriz. Elektronu, spini 1/2 olan bir parçacık olarak modelleriz, böylece hem ötelemsel hem de spin serbestlik dereceleri olur. Çekirdeği (proton) uzayda sabit olarak örnekleyeceğimizden dolayı bunu bir spin 1/2 sistemi olarak modelleriz. Ondan sonra, toplam sistem, elektronun ve diğer spin 1/2 sistemin durum uzaylarının bir direkt çarpımı olan Hilbert uzayında tanımlıdır. Bu uzay için bir baz, çarpım durumları tarafından

$$|\psi; S_{(e)z}, \pm; S_{(p)z}, \pm\rangle := |\psi\rangle \otimes |S_{(e)z}, \pm\rangle \otimes |S_{(p)z}, \pm\rangle$$

formunda verilir, burada $|\psi\rangle$ spinsiz bir parçacığın Hilbert uzayına ait bir baz üzerindedir (örneğin, hidrojen atomu Hamilton işlemcisine ait enerji özfonksiyonları), $|S_{(e)z}, \pm\rangle$ spin 1/2 sistemine ait bilinen bazdır – burada elektron için kullanıldı, ve $|S_{(p)z}, \pm\rangle$ spin 1/2 sistemine ait bilinen bazdır – burada proton için kullanıldı.

Bu elektron ve proton için manyetik momentler

$$\mu_e = -\frac{e}{m_e}\mathbf{S}_{(e)}, \qquad \mu_p = -\frac{ge}{2m_p}\mathbf{S}_{(p)}$$

ile verilir, burada g protonun "g-faktörü"dür, ki bu 5.6 civarındadır.

Bir noktadaki salt bir manyetik dipolün (ki protonu bu şekilde modelliyoruz) aşağıdaki manyetik alanın kaynağı olduğunu kontrol etmek iyi bir alıştırmadır,

$$\mathbf{B(r)} = \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mu_p) - \mu_p}{r^3} + \frac{8\pi}{3}\mu_p\delta(\mathbf{r})$$

ve

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Burada, ilk terim yerel bir akım dağılımının dışında oluşan manyetik alanın çok kutuplu açılımındaki bilindik dipol terimini temsil eder. İkinci terim, μ_p manyetik momentini sabit tutarken kaybolduğu kabul edilen akım dağılımının uzaysal boyutlarının limitini modellemek için kulllanılır. Bu alanın varlığında bir elektronun enerjisi,

$$U := -\mu_p \cdot \mathbf{B}$$

ile verilir. Bu enerjiyi olağan hidrojenik enerjiinin bir pertürbasyonu olarak ele alalım ve bu mevcut modelimizdeki hidrojenin taban durumuna gelen bu pertürbasyonun etkisini çalışalım.

Hidrojenin pertürbe edilmemiş taban durumu protonun manyetik alanını "bilmez". Bu nedenle enerjisi her zamanki -13.6 eV'dir. Ancak, hem elektronun hem de protonun spin serbestlik derecelerini hesaba kattığımız için şimdi spin yönelimlerinin muhtemel farklı durumlarına ve bunların üstüste gelmelerine karşılık gelen dört katlı bir dejenereliğimiz var. Temel durum enerjisinin dejenere altuzayı dört ortonormal,

$$|\psi_{ground}; S_{(e)z}, \pm; S_{(p)z}, \pm\rangle$$

vektörü ile taranır, burada

$$|\psi_{ground}\rangle = |n = 1, l = 0, m_l = 0\rangle.$$

Dejenere pertürbasyon teorisine göre ilk adımımız pertürbasyonun bu dejerenere altuzayda matris elemanlarını hesaplamaktır. Taban durumlarının herbiri için

$$(sabit) \times \int d^3x \frac{1}{4\pi} |R_{10}(r)|^2 \left[\frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a}) - \mathbf{a}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \mathbf{a} \delta \mathbf{r} \right] \cdot \mathbf{b}$$

formunda bir matris elemanı buluruz, burada a ve b vektörleri, manyetik moment vektörlerinin matris elemanlarını temsil eder.

$$\mathbf{a} = \langle S_{(p)z}, \pm | \mu_p | S_{(p)z}, \pm\rangle$$

$$\mathbf{b} = \langle S_{(e)z}, \pm | \mu_p | S_{(e)z}, \pm\rangle$$

Şimdi,

$$Q(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{r} \cdot \mathbf{b}) - \frac{1}{3} r^2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

*dört kutuplu tensör*ü EMT'nin standart bir sonucudur, burada sabit bir vektör çifti üzerinde hesaplanmıştır ve birim küre üzerinde sıfır olan bir ortalamaya sahiptir :

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Q(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0$$

Bunu kontrol etmenin bir yolu bu tensörü küresel kutupsal koordinatlarda yazmaktır. Bu tensörün açısal bağımlılığının bir küre üzerinde integrallendiğinde sıfır veren $Y_{l=2,m}$ küresel harmoniği olduğunu bulacaksınız (çünkü bu, sabitlere, yani Y_{00}'a, ortogonaldir). Bu sonuç, sadece **B**'nin delta fonksiyonu parçasının temel durumdaki pertürbasyonun matrisinde rol oynadığına işaret eder.

Devam edecek...