

Ders 33

Metindeki ilgili bölümler §5.2, 5.6

Örnek : Aşırı inceyapı (Devam)

Şimdi,

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

formunu alan pertürbasyonun matris elemanlarını

$$|1, 0, 0\rangle \otimes |\pm\rangle \otimes |\pm\rangle$$

ile taranan dejenere altuzayında hesaplıyoruz.

Pertürbe edilmemiş altuzayın “ötelemsel kısmı” tam olarak hidrojenin temel durumudur ve dolayısıyla pertürbasyonun matris elemanlarını hesaplarken

$$\langle 1, 0, 0 | \delta(\mathbf{r}) | 1, 0, 0 \rangle = \int d^3x |\psi_{100}(r)|^2 \delta(\mathbf{r}) = |\psi_{100}(0)|^2$$

ortak faktörünü buluruz. $|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a^3}$ kullanarak, 4×4 pertürbasyon

$$\frac{4ge^2}{3m_p m_e a} (\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e)_{ij}$$

formunu alır, burada a Bohr yarıçapıdır ve ij , $|S_{(e)z}, S_{(p)z}\rangle = |++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$, bazına işaret eder. Dolayısıyla, örneğin,

$$(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e)_{12} = \langle + | \mathbf{S}_e | + \rangle \cdot \langle + | \mathbf{S}_p | - \rangle = 0.$$

Matris elemanlarının çok basit bir hesabı

$$(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e)_{ij} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

verir. Bu matrisin özdeğer ve (boylandırılmış) özvektörleri (alıştırma)

$$\text{özdeğer : } \frac{\hbar^2}{4}, \quad \text{özvektörler : } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\text{özdeğer : } -\frac{3\hbar^2}{4}, \quad \text{özvektörler : } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

Tabii ki, $\frac{\hbar^2}{4}$ özdeğeri üç katlı dejeneredir; bunun üç özvektörünün herhangi bir doğrusal kombi- nasyonu da uygun olacaktır.

Bu sonucu, ayrıca

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_e$$

yazarak ve

$$\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e = \frac{1}{2}(S^2 - S_p^2 - S_e^2) = \frac{1}{2}S^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 I$$

hesaplayarak da elde edebilirsiniz. Tekli ve üçlü durumların, S^2 'nin sırasıyla 0 ve $2\hbar^2$ özdeğerli özvektörleri olduğunu hatırlayın. Buradan hareketle, tekli durum, $\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e$ 'nin $-\frac{3}{4}\hbar^2$ özdeğerli özvektörüdür ve tüm üçlü durumlar $\frac{1}{4}\hbar^2$ özdeğerine sahiptir. Özvektörlerin yukarıda bulduğumuz çarpım bazındaki bileşenleri gerçekten tekli ve üçlü durumların bileşenleridir ve özdeğerler de buna göre belirlenir. Üç katlı dejenere özdeğer için seçtiğimiz baz elbette, toplam spini $\sqrt{2}\hbar$ ve $S_z = \pm\hbar, 0$ olan durumlardır.

Böylece, elektron ve protonun spin-spin etkileşiminin (pertürbasyonda birinci derecede) “üçlü” spin durumlarının enerjilerini

$$\Delta E_{\text{üçlü}} = \frac{g\hbar^4}{3m_p m_e a^3}$$

kadar arttıracak ve “tekli” spin durumunun enerjisini

$$\Delta E_{\text{tekli}} = -\frac{g\hbar^4}{m_p m_e a^3}$$

kadar azaltacak şekilde olduğunu görüyoruz.

Aşırı inceyapı etkileşimini hesaba katarak, tekli durumun doğru (sıfıncı dereceden yaklaşıklıkta) taban durumu olduğunu görürüz. Tekli ve üçlü durumlar arasındaki enerji farkı

$$\Delta E_{\text{üçlü}} - \Delta E_{\text{tekli}} = 5.9 \times 10^{-6} eV$$

ile verilir. Bu durumlar arasındaki geçişleri foton yayılması ve soğurulması ile ilişkili düşünürsek bu enerji farkı 21 *cm* civarında bir foton dalgaboyuna tekabül eder. Bu, radyo teleskoplarının mikrodalga spektrumunda gözlenen meşhur “21 santimetre” tayfsal çizgisi için bir açıklamaya yol açar. Bu da, tekliden üçlü duruma geçişler yapan muazzam miktarlardaki yıldızlararası hidrojene bağlanmaktadır.

Zamana bağlı pertürbasyon teorisi

Zamana bağlı pertürbasyon teorisi (TDPT), Schrödinger denklemi açıktan çözülemediğinde bir kuantum sisteminden dinamik bilgi çıkarmak için son derece önemli bir yaklaşıklık tekniğidir.*

*Bu olağan yorumlar basit olmayan fiziksel sistemlerde ve açıkça çözülebilirliğin yokluğunda geçerlidir.

TDPT diferansiyel denklemlere tekrarlanarak yaklaşan çözümler bulmak için bir teknik olarak görülebilir. Fiziğin pek çok kilit sonucu TDPT yoluyla ortaya çıkar. Örneğin, bu, (önceden böyle adlandırılan) durağan durumlar arasında bir dizi geçiş olarak (mesela, elektromanyetik ışına ile etkileşen atomlar için), kuantum dinamiğinin ana resmine ulaştırır. “Fermi’nin Altın Kuralı”na yol açar, “yasak geçişler” fikrine yol açar, ve zaman enerji belirsizlik ilkesinin hoş bir halini verir. Ve daha birçokları var.

TDPT’nin ana fikri çok basittir, belirli bir kuantum sistemine ait Hamilton işlemcisinin iki parçaya ayrıştırılabileceğini varsayıyoruz,

$$H = H_0 + V,$$

burada H_0 iyi anlaşılmiş bir fiziği tasvir ediyor ve V anlamaya çalıştığımız etkileşimleri temsil ediyor. Dolayısıyla, örneğin, H_0 hidrojen atomundaki bir elektron için Hamilton işlemcisi olabilir, ve V gelen bir elektromanyetik dalga ile etkileşimi temsil edebilir – varmayı umduğum bir örnek. Kilit kabul V ’nin dinamik üzerindeki etkisinin uygun şekilde (H_0 ’a nazaran) küçük olduğudur, öyle ki, H tarafından üretilen dinamik, H_0 tarafından üretilen dinamiğe V *pertürbasyonundan* dolayı gelen bazı küçük değişiklikler cinsinden ifade edilebilir. TDPT tekniği H , H_0 ve/veya V açıktan zamana bağlı olsun veya olmasın geçerlidir. Sadelik adına, dikkatimizi H_0 ’ın zamandan bağımsız seçildiği hallerle sınırlandıracağız; V zamana bağlı olabilir.

Ana şema aşağıdaki gibidir (alternatif bir tasvir için ders kitabımıza bakın). Schrödinger resminde, durum vektörü t anında

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle = (H_0 + V) |\psi, t\rangle$$

denklemini sağlar. Amacımız, başlangıç durumu verildiğinde, t zamanındaki durum vektörünü bulmaktır. $|\psi, t\rangle$ ’yi H_0 ’ın özvektörlerinin bazında açalım :

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle$$

burada

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

ve sadelik olsun diye bu genel geliştirmemizde spektrumun kesikli olduğunu kabul ediyoruz. Açılım katsayıları c_n ’lerin tanımına uygun bir faz çarpanı yerleştirdiğimizi dikkate alın. Bu faz çarpanı şu şekildedir : (1) $c_n(0)$ ’lar, $t = 0$ ’daki açılım katsayılarıdır ve (2) eğer $V = 0$ ise (yani pertürbasyonun etkisi ihmal edilirse veya “kapatılır” ise) o taktirde c_n ’ler zaman içinde sabit olur (alıştırma). Buradan hareketle, $c_n(t)$ ’lerin zamana bağımlılığı yalnızca pertürbasyondan dolayıdır.

Schrödinger denklemi, $c_n(t)$ için bir sıradan diferansiyel denklem (ODE) sistemi olarak görülebilir. Bunu görmek için, $|\psi, t\rangle$ ’nin açılımını Schrödinger denkleminde yerine yazın ve

bileşenleri $|n\rangle$ bazında alın.

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n t = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} V_{nm}(t) c_m(t), \quad V_{nm} = \langle n|V(t)|m\rangle$$

elde ederiz (alıştırma). Şimdiye değin yaptığımız hiçbir şey hiçbir yaklaşıklık içermiyordu. Yukarıda gösterilen ODE'lerin sistemi Schrödinger denkleminin eşittir.

Şimdi, V_{nm} matris elemanın etkisinin uygunca küçük olduğunu varsayıyoruz ve diferansiyel denklemlerin sağ tarafına bazı yaklaşıklıklar yapıyoruz. İlk önce, V_{nm} 'i tamamen ihmal edersek diferansiyel denklemleri

$$\frac{dc_n}{dt} \approx 0$$

şeklinde yaklaşık olarak buluruz. Bu sıfıncı dereceden yaklaşıklık ki, diferansiyel denklemlerin sağ tarafları sıfıncı mertebede doğrudur (yani, pertürbasyonun matris elemanlarında sıfıncı dereceye kadar hassaslıktadır), ve aynı şekilde açılım katsayıları sıfıncı mertebeye kadar doğrudur. Böylelikle, $c_n(t)$ 'lerin en düşük dereceli yaklaşıklıkla zaman içinde sabit olduklarını buluruz. Bu c_n katsayılarının fazlarını tanımladığımızı hatırlayacaksınız o yüzden bu şekilde olur. Tabii ki, fiziksel olarak bu, H_0 'a ait olasılık dağılımının zamandan bağımsız olduğu anlamına gelir. Bunu “sıfıncı dereceden yaklaşıklık” olarak adlandırırız ve bu yaklaşıklıkta açılım katsayılarını $c_n^{(0)}$ şeklinde gösteririz.

Şimdi denklemin sağ tarafına, sıfıncı dereceden çözümü yerine yazarak, daha iyi bir yaklaşıklık elde edebiliriz. Bu, Schrödinger denkleminin potansiyelde birinci dereceye kadar hassaslıkta yaklaşıklığı olan bir denklem verir. Göreceğimiz gibi, denklemin bu yaklaşık formunu basitçe her iki tarafın integralini alarak çözmek kolaydır. O zaman, potansiyelden dolayı bir zamana bağımlılık içeren yaklaşık bir çözüm buluruz. Potansiyel bu “birinci mertebeden yaklaşıklık” da doğrusal olarak görünür. Denkleme daha iyi bir yaklaşıklık bulmak için bu birinci dereceden yaklaşıklığı denklemin sağ tarafında yerine yazabiliriz. Bu denklemin çözümü “ikinci mertebeden yaklaşıklık”ı verir; çözüm V 'de ikinci mertebededir. Fikir, V yeterince “küçük” olduğu sürece bu tekrarlamalı süreç devam ettirilerek Schrödinger denkleminin çözümüne daha iyi yaklaşıklıklar elde edilebileceğidir. Bir takım önemli fiziksel özellikleri ve uygulamaları olan birinci mertebeden yaklaşıklığı çalışmakla yetineceğiz.