Ders 35

Metindeki ilgili bölümler §5.6

Fermi'nin Altın Kuralı

Birinci mertebeden pertürbasyon teorisi geçiş olasılığı için aşağıdaki ifadeyi verir :

$$P(i \to n, i \neq n) = \frac{4|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \sin^2 \left\{ \frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right\}$$

"Enerji koruyan" geçişlerin (eğer mevcut olan varsa) yeterince büyük bir zaman aralığı sonrasında baskın hale büründüğünü gördük. Gerçekten de, enerji korumayan geçiş olasılıkları zamanla sınırlıdır, oysa ki enerji koruyan geçişlerin olasılığı zamanın karesi ile orantılı olarak büyür (elbette yaklaşıklık geçerli olduğu müddetçe). Burada, "geniş zaman" enerji korumayan geçişler için geçen sürenin, geçiş olasılığı salınım periyodundan çok daha büyük olması anlamına gelir.

$$T := \frac{2\pi\hbar}{|E_n - E_i|}$$

Atomik yapı için tipik enerji ölçeğinin elektron-volt mertebesinde olduğunu not edin. Bunun tipik bir zaman ölçeğine çevirisi $T \sim 10^{-15}\, s$'dir, bundan dolayı "geniş zaman" çoğunlukla çok iyi bir yaklaşıklıktır.

Yukarıda belirtilenlerde, son durumun enerji spektrumunun kesikli kısmından gelen bir enerji durumu olduğunu üstü kapalı olarak kabul ediyorduk. Eğer bitiş durumunun enerjileri bir süreklilik içinde yer alıyorsa (en azından yaklaşık olarak) nitel olarak benzer bir resim elde ederiz, fakat ayrıntılar değişir. Geçiş olasılığının "geniş zamanlar"da hala enerji koruyan geçişleri tercih ettiğini göreceğiz, fakat bu, zamanla sadece doğrusal olarak büyüyecektir, çünkü böyle geçişlere ait olasılık dağılımının genişliği zamanla daha daralıyor. Bunu, olasılığın $\Delta E = E_n - E_i$'nin sürekli bir fonksiyonu olduğunu varsayarak ve geniş t limitini

$$\lim_{\alpha \to \infty} \frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \pi\delta(x), \qquad \delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

özelikleri ile göz önüne alarak görebiliriz (aşağıdaki tartışmaya bakın). Bundan sonra

$$P(i \to n, i \neq n) = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2 \delta(\Delta E) t \qquad t >> T$$

buluruz (alıştırma). Bu, bu halde (bitiş durumlarının sanki sürekliliği) *geçiş hızı* $\frac{dP}{dt}$'nin geç zamanlarda sabit olduğunu ima eder :

$$\frac{d}{dt} P(i \to n, i \neq n) \approx \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2 \delta(\Delta E) \qquad t >> T$$

ki bu sonuç *Fermi'nin Altın Kuralı*nın bir biçimidir.

Bitiş durumlarının sürekliliğinin bir örneği Helyum atomunun Auger iyonizasyonunda ortaya çıkar. Burada, 2S (pertürbe edilmemiş) durağan durumundaki iki elektron (aralarındaki elektrostatik itme sayesinde) elektronlardan birinin 1S durumunda olduğu ve diğerinin de dışarı atıldığı bir duruma geçiş yaparlar. Bir başka örnek bir elektronun bir iyondan esnek olmayan saçılması olacaktır. Böyle hallerde, $|n\rangle$ ile gösterilen durum olarak iş görecek, (neredeyse) dejenere olan durumların bir sürekliliği (veya sürekliliğe yakını) vardır. Bu şartlarda bir $\rho(E)$ "durumların yoğunluğu" faktörü olacaktır. $\rho(E)dE$ büyüklüğü E ile $E + dE$ arasındaki enerjilere sahip olan durumların sayısıdır. O zaman, başlangıç durumu $|i\rangle$'den $E \in \varepsilon$ enerjili durumlara geçiş hızı

$$\frac{d}{dt}P(i \to \varepsilon) = \int_{\varepsilon} dE_n \rho(E_n) \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_i, E_n) = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_i) |V_{ni}|^2.$$

Bu herhalde Fermi Altın Kuralı'nın en yaygın kullanılan biçimidir. Buna bir örneği biraz sonra ele alacağız.

Harmonik Pertürbasyonlar

Şimdi zamana bağlı olan pertürbasyonları düşünüyoruz. Genellikle, zaman bağımlığının bir Fourier analizini yapabilir ve pertürbasyonu herbiri zamana harmonik olarak bağlı birçok pertürbasyonun bir üstüste gelmesi olarak görebiliriz. Bu nedenle, göz önüne alacağımız bir sonraki şey bu şekilde harmonik olarak değişen pertürbasyonlardır. İyi bir örnek olarak, daha sonra ele alacağımız, bir atomik elektron üzerine düşen bir elekromanyetik dalganın etkisini düşünün. Eğer dalga hemen hemen tekrenkli ise bununla ilgili pertürbasyonun zamana bağımlılığı harmonik olarak modellenebilir.

O zaman, pertürbasyonun

$$V(t) = \mathcal{V} e^{i\omega t} + \mathcal{V}^{\dagger} e^{-i\omega t}$$

formunda olduğunu varsayın, burada $\mathcal{V}$ zamana bağlı bir işlemcidir ve ω belirli bir frekanstır. (Artık şimdi problemde iki zaman ölçeği olduğunu dikkate alın : biri pertürbasyonla ilişkili ve diğeri pertürbe edilmemiş enerjilerdeki fark ile doğal olarak tanımlanan) Yine, $t = 0$ zamanında sistemin H_0'ın bir $|i\rangle$ özdurumunda olduğunu varsayıyoruz. Sistemin t zamanında $|n\rangle$ $(n \neq i)$ durumunda bulunma olasılığının ne olduğunu sorguluyoruz. Önceki sonuçlarımızı kullanarak

$$P(i \to n, i \neq n) = \left| \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' (\mathcal{V}_{ni} e^{i\omega t'} + \mathcal{V}^{\dagger}_{ni} e^{-i\omega t'}) \right|^2, \qquad \omega_{ni} := \frac{E_n - E_i}{\hbar}$$

buluruz (alıştırma). İntegral iki terimin toplamından oluşuyor, ki burada bunlardan herbiri, üstellerdeki frekansın artık

$$\omega_{ni} \to \omega_{ni} \pm \omega$$

yoluyla kayması dışında, zamandan bağımsız pertürbasyon halinde karşılaşılan formdadır. Bu, geç zamanlardaki geçiş hızı için olan daha önceki analizimizi, mevcut vaziyetin üstesinden gelmek için yukarıda gösterildiği gibi frekansların modifiye edilmesi şartıyla, kullanmamıza olanak verir.

Ayrıntılı olarak, olasılık için olan yukarıdaki formülde mutlak kareyi aldıktan sonra 3 terim elde ederiz : iki "doğrudan terim" ve bir çapraz terim. Herbiri "rezonansta", yani başlangıç ve bitiş durumları $\omega_{ni} \pm \omega = 0$ şeklinde olduğunda, yok olan bir bölene sahiptir. Önceden olduğu gibi, herbir terimdeki bölenin kaybolduğu limit sonludur ve zamanla büyür. Bundan dolayı, önceki gibi "geç zamanlarda" esas geçişler bu frekans kombinasyonlarından birinin yok olacağı şekildedir. Belirli bir başlangıç ve bitiş durumu için bu seçeneklerden ($\pm$) sadece biri gerçekleşebilir. Doğrudan terimler bu büyüyen olasılığın karesine sahipken çapraz teim sadece bu büyüklüğü doğrusal olarak içerir. Bu nedenle, çapraz terim doğrudan terime kıyasla ihmal edilebilir.

Özet olarak, yeterince büyük zamanlarda, kayda değer bir olasılığı olan geçişler yalnızca şunlardan olacaktır, ya

$$\omega_{ni} + \omega = 0$$

ya da

$$\omega_{ni} - \omega = 0.$$

Tabii ki, belirli bir ω frekansı seçimi ve belirli bir başlangıç ve bitiş durumu için bu şartlardan sadece biri gerçekleşebilir. Birinci halde,

$$\omega_{ni} + \omega = 0 \Longleftrightarrow E_n = E_i - \hbar\omega$$

elde ederiz, ve ikinci halde

$$\omega_{ni} - \omega = 0 \Longleftrightarrow E_n = E_i + \hbar\omega$$

buluruz. Dolayısıyla, pertürbe edilmemiş enerji gözlenebilirini bu sonuçları yorumlamak için kullanarak, aşağıdaki vaziyeti elde ederiz. $E_n = E_i - \hbar\omega$ iken *uyarılmış yayım*dan bahsederiz, çünkü pertürbasyon (pertürbe edilmemiş bakış açısıyla) sistemin bir $\hbar\omega$ enerji kuantumu "yayma"sına neden olmuştur. $E_n = E_i + \hbar\omega$ iken *uyarılmış soğurma*dan bahsederiz, çünkü pertürbasyon (pertürbe edilmemiş bakış açısıyla) sistemin bir $\hbar\omega$ enerji kuantumu "soğurma"sına neden olmuştur.

Geç zaman geçiş hızlarına ait bir formül bulmak için basitçe daha önceki formüllerimizde uygun kaydırmayı

$$\omega_{ni} \to \omega_{ni} \pm \omega$$

yapmak zorundayız. Bitiş durumlarının (yarı-) sürekliliği halinde

$$P(i \to n, i \neq n) = \frac{2\pi}{\hbar} \left[|\mathcal{V}_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i + \hbar\omega) + |\mathcal{V}_{ni}^{\dagger}|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \right]$$

buluruz. Bu Fermi'nin Altın Kuralı'nın bir diğer biçimidir.

$$|\mathcal{V}_{ni}|^2 = \mathcal{V}_{ni}^* \mathcal{V}_{ni} = \mathcal{V}_{in}^{\dagger} (\mathcal{V}_{in}^{\dagger})^* = |\mathcal{V}_{in}^{\dagger}|^2$$

olduğundan $i \to n$ için geçiş hızının (birim enerji başına) $n \to i$ için olanla aynı olduğunu not edin, sıklıkla "ayrıntılı dengeleme" olarak adlandırılan bir hadise.