VIII. PERTÜRBASYON TEORİSİ

VIII.1. Kesikli Spektrumun Pertürbasyonu.

$$H = K + V$$

operatörü için

$$H \, |\lambda\rangle = E_\lambda \, |\lambda\rangle$$

yı sağlayan E_λ özdeğerlerinin ve $|\lambda\rangle$ özvektörlerinin hesaplanmasını pertürbasyon teorisi ile ele alacağız. Burada

$V \rightarrow$ küçük bir pertürbasyon.

$K \, |a\rangle = \epsilon_a \, |a\rangle$ K: serbest Hamiltonyen
$|a\rangle$: " özvektör.

H: <u>tam</u> Hamiltonyen ve $|\lambda\rangle$: <u>tam</u> özvektör.

Pertürbasyon işleminde, K'nın her $|a\rangle$ özvektörüne H'nin bir $|\lambda(a)\rangle$ özvektörü karşı geldiği varsayılır, öyle ki

$$E_{\lambda(a)} = \epsilon_a + \text{düzeltme terimi}$$

$|a\rangle \longrightarrow |\lambda(a)\rangle$

$\epsilon_a \longleftarrow E_{\lambda(a)}$

(dejenere) $\Rightarrow$ ([illegible])

$V \to 0 \Rightarrow E_{\lambda(a)} = \epsilon_a$ olur.

ϵ_a'nın dejenere olduğu durumda (yani "a" yada "λ" yanında diğer kuantum sayıları varsa, "q") $E_{\lambda(a)}$ genel de bu kuantum sayılarına bağlıdır.

örnek: Alkali Atomlar : H, K, V.

a: K'nın n^2-katlı dejenere durumlarını işaretleyen n-kuantum sayısı

$$E_{a=n} = -me^4/(2\hbar^2 n^2)$$

$[L_i, H]=0$ olduğundan, serbest ve tam bazların özvektörleri $\vec{L}^2$ ve L_3 ün özvektörlerinden işaret olarak seçilebilir:

$$|a\gamma\rangle = |alm\rangle \quad , \quad |\lambda\gamma\rangle = |\lambda lm\rangle$$

O zaman problem non-dejenere problemler topluluğuna dönüşür: $\gamma = (lm)$ kuantum sayılarının herbir değeri için bir problem.

Eğer H; $\vec{L}^2$ ve L_3 ile sıradeğiştirmezse ve, H ve K ile aynı CSCO oluşturan başka operatörler kümesi bilinmez ise, o zaman problem non-dejenere probleme indirgenemez ve dejenere hal kullanılmalıdır. Sürekli spektrum için $\sum_a \to \int$ değişimi yapılır.

Tanım: $G(E) \equiv (EI - H)^{-1}$ Green fonk.'u (fiz.)
resolvent (mat)

H'nin E_λ özdeğerlerini bulmak, $G(E)$'nin tekilliklerini bulmaya özdeştir.

Tanım: $F(E) \equiv G(E)\dfrac{1}{g(E)}$

$R(E) \equiv V F(E)$: düzey kaydırma op.'ü

$$g(E) \equiv \sum_a |a\rangle\langle a|\, G_a(E)$$

$$G_a(E) \equiv \langle a|\, G(E)\, |a\rangle$$

$$(E-H)\,G(E)=I$$

$$(E-H)\,F(E)\,|a\rangle = (E-H)\,G(E)\,\frac{1}{g(E)}\,|a\rangle$$

$$= \frac{1}{g(E)}\,|a\rangle = \frac{1}{G_a(E)}\,|a\rangle$$

$R(E)$'nin köşegen matris elemanları için,

$$R(E) = V\,F(E) = (H-K)\,F(E)$$

$$R_a(E) = \langle a|\,(H-K)\,F(E)\,|a\rangle$$

$$= \langle a|\,(E-K)\,F(E)\,|a\rangle - \langle a|\,(E-H)\,F(E)\,|a\rangle$$

$$= (E-\epsilon_a)\,\underbrace{\langle a|F(E)|a\rangle}_{1} - \frac{1}{G_a(E)}$$

$$E = \epsilon_a + R_a(E) + 1/G_a(E)$$

E, H'nin bir E_λ özdeğerine yaklaşır iken, $G_a(E)$ sonsuz olur ve

$$(E_\lambda - H)\,F(E_\lambda)\,|a\rangle = 0$$

$$E_\lambda = \epsilon_a + R_a(E_\lambda)$$

Bu sonuç herhangi E_λ ve ϵ_a için geçerli olmasına rağmen, ϵ_a'ya en yakın E_λ değerini ($E_{\lambda(a)}$) belirlemekte kullanılır

Böylece $R_a(E_\lambda)$, pertürbe olmamış E_a değerinden buna karşılık gelen $E_{\lambda(a)}$ ya düzey kaymasını temsil eder. $F(E)$ op.'ü öyle oluşturuldu ki $F(E_{\lambda(a)})$, $|a\rangle$ yı buna karşılık gelen $|\lambda(a)\rangle = F(E_{\lambda(a)})|a\rangle$ ya dönüştüren op.'dur.

Bu pertürbasyon teorisinin temelini oluşturan varsayım şudur: her $|a\eta\rangle$ ya bir $|\lambda(a)\eta\rangle$ karşılık gelir, ancak $E_{\lambda(a)}$, η'nın bir fonk.'u olur, çünkü $R_a(E_\lambda)$ genelde η'ya bağlıdır.

Örneğin, alkali atomlarda,

$$R_{a\eta}(E_\lambda) = \langle a\eta | R(E_\lambda) | a\eta\rangle = \langle nlm | R(E_\lambda) | nlm\rangle$$

ifadesi genelde n, l, m'ye bağlı olacaktır. $[R(E), L_i] = 0$ özel halinde, $R_{a\eta}(E_\lambda)$'nın m'ye bağlı olmadığı çıkar, ancak n'ye bağlılığına ek olarak, l'ye de bağlı olacaktır. Böylece tüm $|a\eta\rangle$ lar pertürbe olmamış sistemin E_a enerji düzeylerine aittir ve pertürbasyon etkisi ile bu düzey $E_{\lambda(a)\eta}$ alt düzeylere yarılır ve pertürbe olmamış sist.'in $|a\eta\rangle$ durumu pertürbe sist.'in $|\lambda(a)\eta\rangle$ durumuna gider.

Düzey kayırma $R_a(E_{\lambda(a)})$ ve böylece $E_{\lambda(a)}$ çeşitli yaklaşıklıklar dizisi ile hesaplanır.

Herhangi iki terslenebilir A ve B op.'ü için

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B-A)\frac{1}{A}$$

yazılabilir. $A = g(E)(E-H)$ ve $B = g(E)\left(E-K-O(E)\right)$ seçelim.

Böylece $\frac{1}{A} = F(E)$, $\frac{1}{B} = \frac{1}{E-K-O(E)}\,\frac{1}{g(E)}$ olur.

$$F(E) = \frac{1}{E-K-O(E)}\,\frac{1}{g(E)} + \frac{1}{E-K-O(E)}\left(V-O(E)\right)F(E)$$

BS K

Burada $O(E)$ herhangi bir op. olabilir, ancak biz sadece

$$O(E) = \sum_{a'} O_{a'}(E)\,|a'\rangle\langle a'|$$

biçimindeki op.'leri alacağız. (Sayılar) (yani $[O(E), K] = 0$ özelliğine sahip olduğu varsayılıyor)

$F(E)$ her vektör üzerinde tanımlanmaz, hatta her $|a\rangle$ vektörü üzerinde bile (herhangi E değeri için). Örneğin ilk terim, sadece bu $|a\rangle$ lar üzerinde ve

$$(E - \epsilon_a - O_a(E))\,G_a(E) \neq 0$$

olan E'ler için tanımlanır.

$$F(E)|a\rangle = \frac{1}{E-K-O(E)}\,(E-\epsilon_a-R_a(E))\,|a\rangle + \frac{1}{E-K-O(E)}\,(V-O(E))\,F(E)\,|a\rangle$$

$O(E)$ öyle seçilecek ki bu ifade $F(E_{\lambda(a)})|a\rangle$ için mümkün olan en basit bağıntı olsun; Eğer $F(E_{\lambda(a)})|a\rangle$ yı $|a\rangle$ + düzeltme terimi olarak yazabilirsek, bu yapılabilir. Böylece $O(E)$, ilk terim $|a\rangle$ olacak şekilde seçilmelidir. $O(E)$'nin iki seçimi özellikle iyi tanınan pertürbasyon açılımına götürür.

(i) Wigner – Brillouin $\cancel{O(E) = R_a(E)|a\rangle}$

$$O(E) = R_a(E)\,|a\rangle\langle a|$$

$$O_{a'}(E) = R_{a'}(E)\,\delta_{a'a} \quad \begin{cases} R_{a'}(E) & a = a' \\ 0 & a \neq a' \end{cases}$$

BS K

$$\frac{1}{E-K-O(E)} = \frac{1}{E-\epsilon_a-R_a(E)}|a\rangle\langle a| + \sum_{a'\neq a}\frac{1}{E-\mathcal{E}_{a'}}|a'\rangle\langle a'|$$

$R_{a'}(E)\,|a'\rangle\langle a'|$

Böylece ilk terim $|a\rangle$ olur: $VF(E)\equiv R(E)$ $\to I$

$\langle a|R(E)|a\rangle - \langle a|O(E)F(E)|a\rangle$

$$\langle a|\,(V-O(E))F(E)|a\rangle = 0$$

açıkları ifadeyi kullan.

$$F(E)|a\rangle = |a\rangle + \sum_{a'\neq a}\frac{1}{E-\epsilon_{a'}-O_{a'}(E)}|a'\rangle\langle a'|(V-O(E))F(E)|a\rangle$$

$$= |a\rangle + \sum_{a'\neq a}\frac{1}{E-\mathcal{E}_{a'}}|a'\rangle\langle a'|V\,F(E)|a\rangle$$

bu denklem sağdan iterasyon ile çözülür:

$$F(E)|a\rangle = |a\rangle + \sum_{a'\neq a}\frac{1}{E-\mathcal{E}_{a'}}|a'\rangle\langle a'|V|a\rangle$$

$$+\sum_{a'\neq a}\sum_{a''\neq a}\frac{1}{E-\mathcal{E}_{a'}}\frac{1}{E-\mathcal{E}_{a''}}|a'\rangle\langle a'|V|a''\rangle\langle a''|V|a\rangle$$

$$+\ \dots$$

Düzey kayması soldan V ile ve $|a\rangle$ ile çarpılarak elde edilir.

$$E_{\lambda(a)} = \mathcal{E}_a + \langle a|V|a\rangle + \sum_{a'\neq a}\frac{1}{E_{\lambda(a)}-\epsilon_{a'}}\langle a|V|a'\rangle\langle a'|V|a\rangle$$

$$+\ \dots$$

$$\langle a|VF(E)|a\rangle = (E_{\lambda(a)}-\epsilon_a)\langle a|F(E)|a\rangle$$

$$= E_{\lambda(a)}-\epsilon_a$$

$H-K$

$K|a\rangle = \epsilon_a|a\rangle$

BS K

(ii) Rayleigh – Schrödinger

$$O(F) = R_a(E)\,|a\rangle\langle a| + (E - \epsilon_a)\sum_{a'\neq a} |a'\rangle\langle a'|$$

$$\Rightarrow \quad O_{a'}(F) = \begin{cases} R_{a'}(E) & a' = a \\ E - \epsilon_a & a' \neq a \end{cases}$$

$$\frac{1}{E - K - O(E)} = \frac{1}{E - \epsilon_a - R_a(F)}\,|a\rangle\langle a| + \sum_{a'\neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}}\,|a'\rangle\langle a'|$$

$$F\left(E_{\lambda(a)}\right)|a\rangle = |a\rangle + \sum_{a'\neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}}\,|a'\rangle\langle a'|\left(V - R_a(\epsilon_{\lambda(a)})\right)F(\epsilon_{\lambda(a)})|a\rangle$$

Rüzey kaynması için

$$R_a(\epsilon_{\lambda(a)}) = \langle a|\,V F(E_{\lambda(a)})\,|a\rangle$$

Bunlar ötelenerek herhangi bir merteleye kadar bulunur.

$R_a(E_{\lambda(a)})$ nın n. merteleden yaklaşımı $R_a^{(n)}$

$F(E_{\lambda(a)})\,|a\rangle$ " " " $F^{(n)}\,|a\rangle$ ile

gösterelim!...

0. merterle,

$$R_a^{(0)} = 0 \qquad F^{(0)}\,|a\rangle = |a\rangle$$

BS K

1. mertebe;

$$R_a^{(1)} = \langle a | V F^{(0)} | a \rangle = \langle a | V | a \rangle$$

$$F^{(1)} | a \rangle = | a \rangle + \sum_{a' \neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} | a' \rangle \langle a' | (V - R_{a'}^{(0)}) F^{(0)} | a \rangle$$

$$= | a \rangle + \sum_{a' \neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} | a' \rangle \langle a' | V | a \rangle$$

2. mertebe;

$$R_a^{(2)} = \langle a | V | a \rangle + \sum_{a' \neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} \langle a | V | a' \rangle \langle a' | V | a \rangle$$

$$F^{(2)} | a \rangle = | a \rangle + \sum_{a' \neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} | a' \rangle \langle a' | V | a \rangle$$

$$+ \sum_{a' \neq a} \sum_{a'' \neq a} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} \frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_{a''}} | a' \rangle \left(\langle a' | V | a'' \rangle - \delta_{a'a''} \right.$$

$$\left. \times \langle a | V | a \rangle \right) \langle a'' | V | a \rangle$$

$F^{(n)} | a \rangle$, ya da genelde $F(E_{\lambda(a)}) | a \rangle$ vektörleri

a kuantum sayıları ile işaretlenir.

VIII. 2. Sürekli Spektrumun Pertürbasyonu.

Daha evvelki araçlar;

$|a\rangle$ has vektörler $\longrightarrow$ genelleştirilmiş vektörler

$$\int \longleftarrow \quad \Sigma \qquad\qquad \longleftarrow\!\rfloor$$

spekt. K $\subset$ spekt. H olduğunu varsayarız.

Sürekli bir spektrumun durumunda R_a düzey kayması bir gözlenebilir nicelik değildir ancak $E_\lambda = \epsilon_a + R_a(E_\lambda)$ bağıntısı hala geçerlidir.

$F(E_{\lambda(a)})|a\rangle$ yı : $|a\rangle$ genelleştirilmiş özvektörüne karşılık gelen ϵ_a özdeğerine özdeş olan ($\in$ spekt K) $E_{\lambda(a)}$ değeri için ($\in$ spekt. H) hesaplayacağız.

Yukarıdaki varsayım nedeni ile H nin spektrumunda böyle bir $E_{\lambda(a)}$ değeri vardır. Bu değere $E_{\lambda(a)} = E_a$ diyelim. E_a için

$$E_a - \epsilon_a = R_a(E_a) = 0$$

olur. $O(E)$ için, $O(E) = R_a(E)\,|a\rangle\langle a|$ seçilir ise

$$F(E_a)|a\rangle = |a\rangle + P\!\!\int da' \frac{1}{E_a - \epsilon_{a'}} |a'\rangle\langle a'| V F(E_a)|a\rangle \qquad (I)$$

principal value of integral.

$|a\rangle = |\epsilon_a \eta_a\rangle$ $\quad \eta_a$ sürekli ya da kesikli.

BS K

$|a\rangle$ lar normalize ise, öyle ki

$$\langle \eta_a' E_a' | E_a \eta_a \rangle = \rho^{-1}(E_a)\, \delta(E_a - E_a')\, \delta_{\eta_a \eta_a'}$$

o zaman

$$\int da = \sum_{\eta_a} \int \rho(E_a)\, dE_a$$

Yine $(E_a - H) F(E_a) |a\rangle = 0$ sağlanır.

İspat: (I)'i $(E_a - K)$ ile çarp ve

$$\left. \begin{array}{l} K|a\rangle = E_a |a\rangle \\ P\int da' |a'\rangle\langle a'| = I - |a\rangle\langle a| \end{array} \right\} \text{kullan.}$$

$$(E_a - K) F(E_a) |a\rangle = (E_a - K)|a\rangle + P\int da' (E_a - K) \frac{1}{E_a - E_a'} |a'\rangle\langle a'| V F(E_a) |a\rangle$$

$$(E_a - K - V) F(E_a) |a\rangle = -|a\rangle\langle a| V F(E_a) |a\rangle$$

$R_a(E_a) = 0$ olduğunda sağ yan sıfır.

$$\frac{1}{x \pm i0} = \lim_{\eta \to 0^+} \frac{1}{x \pm i\eta} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\, \delta(x)$$

bağıntısı kullanılarak (I) şu hale gelir:

BS K

$$F(\hat{E}_a)|a\rangle = |a\rangle + \int da' \frac{1}{\hat{E}_a - \hat{E}_{a'} \pm i0} |a'\rangle\langle a'|VF(\hat{E}_a)|a\rangle$$

$$\underbrace{\pm i\pi \int da' \, \delta(\hat{E}_a - \hat{E}_{a'}) |a'\rangle\langle a'|VF(\hat{E}_a)|a\rangle}$$

$$\pm i\pi |a\rangle\langle a|VF(\hat{E}_a)|a\rangle = \pm i\pi R_a(E_a)|a\rangle = 0$$

$K|a'\rangle = \hat{E}_{a'}|a'\rangle$ nedeni ile son denklem,

$$F(\hat{E}_a)|a\rangle = |a\rangle + \frac{1}{E_a - K \pm i0} V(F(\hat{E}_a))|a\rangle)$$

Lippman-Schwinger denklemi. bu denklem,

$|\alpha\rangle = |\alpha(a)\rangle = F(\hat{E}_a)|a\rangle$ genelleştirilmiş özvektörler için bir denklemdir.

$$H|\alpha\rangle = H|\alpha(a)\rangle = \hat{E}_a|\alpha\rangle$$

$$K|a\rangle = E_a|a\rangle$$

L-S denklemi

$$|\alpha^{\pm}\rangle = |\alpha^{\pm}(a)\rangle = |a\rangle + \frac{1}{E_a - K \pm i0} V|\alpha^{\pm}\rangle$$

şeklinde de yazılır.

BS K

VARYASYON METODU

Spektrumun kesikli ve dejenere olmayan

$$\Downarrow$$

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle \qquad n=1,2,3,\ldots$$

E_0 H'nin en düşük özdeğeri

* herhangi bir $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \underbrace{\sum_n |c_n|^2}_{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$\Rightarrow \quad E_0 \leq \langle H\rangle = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$|\psi(\alpha)\rangle$ deneme "ket" leri

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\langle H\rangle(\alpha) = 0 \Rightarrow E_0 \text{ bulunur.}$$

(Ritz teoremi)

BS K

prb.) $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$

a) $\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}$ $(\alpha > 0)$ tek parametreli dalga fonk.'ları ailesi için $\langle \mathcal{H} \rangle$'yi min. yapan dalga fonk.'unu bulun.

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^* \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\right] \psi_\alpha \, dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^* \psi_\alpha \, dx} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha + \frac{1}{8}\mu\omega^2 \frac{1}{\alpha}$$

$$\left.\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial \alpha}\right|_{\alpha_0} = 0 \Rightarrow \alpha_0 = \mu\omega / 2\hbar \qquad \psi_{\alpha_0}(x) = e^{-\mu\omega x^2/2\hbar}$$

$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \hbar\omega/2$ olur.

b) Diğer bir $\psi_\beta(x) = x\, e^{-\beta x^2}$ tek parametreli dalga fonk.'ları ailesi için $\langle \mathcal{H} \rangle$'yi min. yapan dalga fonk.'unu hesaplayın.

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{3\hbar^2}{2\mu}\beta + \frac{3\mu\omega^2}{8}\frac{1}{\beta}$$

$$\left.\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial \beta}\right|_{\beta_0} = 0 \Rightarrow \beta_0 = \mu\omega / 2\hbar \rightarrow \psi_{\beta_0} = x\, e^{-\mu\omega x^2/2\hbar}$$

$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \frac{3}{2}\hbar\omega.$

c) $\psi_\alpha = 1/(x^2+\gamma)$ için aynı problemi tekrar edin.

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\gamma \qquad \gamma_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\mu\omega}$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{min} = \sqrt{2}\,\frac{\hbar\omega}{2}$$

BS K

prb. $\psi_D = A e^{-br/a_0}$ dalga fonk.'nu kullanarak H atomunun taban durumu enerjisini hesaplayınız.

$$\int |\psi_D|^2 d^3r = 1 \Rightarrow 4\pi A^2 \underbrace{\int_0^\infty r^2 dr\, e^{-2br/a_0}}_{2!/(2b/a_0)^3} = 1$$

$$A = \left(b^3/\pi a_0^3\right)^{1/2}$$

$$E_0 = \min\left\{ \int \psi_D^* H \psi_D \, d^3\vec{r} \right\}$$

$$= \frac{b^3}{\pi a_0^3} \int e^{-br/a_0} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r}\right) e^{-br/a_0} d^3\vec{r}$$

$$= \frac{b^3}{\pi a_0^3} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3\vec{r}\, e^{-br/a_0} \vec{\nabla}^2 e^{-br/a_0} - e^2 \int d^3\vec{r}\, e^{-br/a_0} \frac{1}{r} e^{-br/a_0}\right.$$

$$\vec{\nabla}^2 e^{-br/a_0} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-br/a_0}\right)$$

$$= \frac{2}{r}\left(-\frac{b}{a_0}\right) e^{-br/a_0} + \left(\frac{b}{a_0}\right)^2 e^{-br/a_0}$$

$$E_0 = \frac{b^3}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{\hbar^2}{\cancel{2}\mu} \frac{\cancel{2}b}{a_0} \int e^{-2br/a_0} \frac{1}{\cancel{r}} d^3\vec{r}\; 4\pi r^{\cancel{2}} dr \right.$$

$$- \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{b}{a_0}\right)^2 \int e^{-2br/a_0} d^3\vec{r}$$

$$- e^2 \int e^{-2br/a_0} \frac{1}{r} d^3\vec{r}\; 4\pi r^2 dr$$

$$= \frac{b^3}{\pi a_0^3} \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{b}{a_0} 4\pi\, 1! \frac{1}{(2b/a_0)^2} - \frac{b^3}{\pi a_0^3} \frac{\hbar^2}{2\mu} 4\pi\, 2! \frac{1}{(2b/a_0)^3}$$

$$- \frac{b^3 e^2}{\pi a_0^3} 4\pi\, 1! \frac{1}{(2b/a_0)^2} = \frac{b^2\hbar^2}{\mu a_0^2} - \frac{b^2\hbar^2}{2\mu a_0^2} - \frac{b e^2}{a_0}$$

BS K

$$E_b = \frac{b^2\hbar^2}{2\mu a_0^2} - \frac{be^2}{a_0}$$

$$\frac{\partial E_b}{\partial b} = 0 \Rightarrow b = e^2\mu a_0/\hbar^2$$

$$E_0 = -e^2/2a_0$$

Prb.VIII.1. Enerji op.'ü $H = K + \alpha Q^3 + \beta Q^4$ ile verilsin. Burada $K = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu w^2}{2} Q^2$. (a) pertürbasyon açılımında birinci merteleye kadar özdeğerleri hesaplayınız.

$$V(Q) = \alpha Q^3 + \beta Q^4.$$

$$Q = (\hbar/2\mu w)^{1/2} (a^+ + a)$$

$$Q^2 = (\hbar/2\mu w)(a + a^+)(a + a^+) = (\hbar/2\mu w)(a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2})$$

$$Q^3 = (\hbar/2\mu w)^{3/2} (a^2 + a^{+2} + aa^+ + a^+a)(a + a^+)$$

$$= (\hbar/2\mu w)^{3/2} (a^3 + a^2a^+ + a^{+2}a + a^{+3} + aa^+a + aa^{+2} + a^+a^2 + a^+aa^+)$$

$$Q^4 = (\hbar/2\mu w)^2 (a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2})(a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2})$$

$$= (\hbar/2\mu w)^2 (a^4 + a^3a^+ + a^2a^+a + \underline{a^2a^{+2}}$$
$$+ aa^+a^2 + \underline{aa^+aa^+} + \underline{aa^{+2}a} + aa^{+3}$$
$$+ a^+a^3 + \underline{a^+a^2a^+} + \underline{a^+aa^+a} + a^{+4} \quad \longrightarrow \neq 0$$
$$+ \underline{a^{+2}a^2} + a^{+2}aa^+ + a^{+3}a + a^{+4})$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

1.) $a^2a^{+2}|n\rangle = a^2\sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle = (n+1)(n+2)|n\rangle$

2.) $aa^+aa^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,aa^+a|n+1\rangle = (n+1)\,aa^+|n\rangle = (n+1)^2|n\rangle$

3.) $aa^{+2}a|n\rangle = aa^{+2}\sqrt{n}\,|n-1\rangle = n\,aa^+|n\rangle = n\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle = (n)(n+1)|n\rangle$

4.) $a^+a^2a^+|n\rangle = n(n+1)|n\rangle$

5.) $a^+aa^+a|n\rangle = n^2|n\rangle$

6.) $a^{+2}a^2|n\rangle = (n-1)n|n\rangle$

$$\langle n|Q^3|n\rangle \longrightarrow 0$$

BS K

$$\langle n|Q^4|n\rangle = \left(\hbar/2\mu\omega\right)\left[(n+1)(n+2)+(n+1)^2+n(n+1)+n(n+1)+n(n-1)+n^2\right]$$

$$=\left(\hbar/2\mu\omega\right)\left[6n^2+6n+3\right]$$

b) $\beta=0$ için H'nin özdeğerlerini RSPT serisinin 2. mertebesine kadar hesaplayın ve (a) ile kıyaslayın.

$$R_a^{(2)} = \langle n|\alpha Q^3|n\rangle + \sum_{n'\neq n} \frac{1}{\underbrace{\epsilon_n-\epsilon_{n'}}_{\hbar\omega(n-n')}} |\langle n|\alpha Q^3|n'\rangle|^2$$

$$\langle n|\alpha Q^3|n'\rangle = \alpha\left(\hbar/2\mu\omega\right)^{3/2}\{\langle n|a^3|n'\rangle + \langle n|a^2a^+|n'\rangle$$
$$+\langle n|a^{+2}a|n'\rangle + \langle n|a^{+3}|n'\rangle$$
$$+\langle n|aa^+a|n'\rangle + \langle n|aa^{+2}|n'\rangle$$
$$+\langle n|a^+a^2|n'\rangle + \langle n|a^+aa^+|n'\rangle\}$$

$$=\alpha\left(\hbar/2\mu\omega\right)^{3/2}\{\sqrt{n'(n'-1)(n'-2)}\;\langle n|n'-3\rangle \quad n=n'-3 \quad \delta_{n',n+3}$$
$$+\sqrt{(n'+1)(n'+1)n'}\;\langle n|n'-1\rangle \quad n=n'-1 \quad \delta_{n',n+1}$$
$$+\sqrt{n'n'(n'+1)}\;\langle n|n'+1\rangle \quad n=n'+1 \quad \delta_{n',n-1}$$
$$+\sqrt{(n'+1)(n'+2)(n'+3)}\;\langle n|n'+3\rangle \quad n=n'+3 \quad \delta_{n',n-3}$$
$$+\sqrt{n'n'n'}\;\langle n|n'-1\rangle \quad n=n'-1 \quad \delta_{n',n+1}$$
$$+\sqrt{(n'+2)(n'+2)(n'+1)}\;\langle n|n'+1\rangle \quad n=n'+1 \quad \delta_{n',n-1}$$
$$+\sqrt{n'(n'-1)(n'-1)}\;\langle n|n'-1\rangle \quad n=n'-1 \quad \delta_{n',n+1}$$
$$+\sqrt{(n'+1)(n'+1)(n'+1)}\;\langle n|n'+1\rangle\} \quad n=n'+1 \quad \delta_{n',n-1}$$

BS K

$$R_a^{(2)} = \alpha^2 \left(\hbar/2\mu\omega\right)^3 \sum_{n'\neq n} \frac{1}{\hbar\omega(n-n')}$$

$$\times \Big\{ \sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)}\, \delta_{n',n+3} + \overbrace{\left[\sqrt{(n+1)(n+2)^2} + \sqrt{(n+1)^3} + \sqrt{n^2(n+1)} \right]}^{\#} \delta_{n',n+1}$$

$$+ \underbrace{\left[\sqrt{n\,(n+1)^2} + \sqrt{(n-1)^2 n} + \sqrt{n^3} \right]}_{\#\#} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n(n-1)(n-2)}\,\delta_{n',n-3} \Big\}^2$$

$$= (\alpha^2/\hbar\omega)\left(\hbar/2\mu\omega\right)^3 \Big\{ + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{-3} + \frac{[\ \#\ ]^2}{-1}$$

$$+ \frac{[\ \#\#\ ]^2}{+1} + \frac{n(n-1)(n-2)}{+3} \Big\}$$

$$= (\alpha^2/\hbar\omega)(\hbar/2\mu\omega)^3 \left(-30n^2 - 3n - 11\right)$$

(c) $\beta = 0$ iken H'nin özdeğerlerin WBPT ile 2. mertebeye kadar hesaplayın.

$$E_n = \epsilon_n + \sum_{n'\neq n} \frac{\langle n | \alpha Q^3 | n' \rangle \langle n' | \alpha Q^3 | n \rangle}{E_n - \epsilon_{n'}} \qquad \epsilon_{n'} = (n' + 1/2)\hbar\omega$$

$$= \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) + \alpha^2 \left(\hbar/2\mu\omega\right)^3 \Big\{ \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{E_n - \frac{\hbar\omega}{2} - \hbar\omega(n+3)}$$

$$+ \frac{[\ \#\ ]^2}{E_n - \frac{\hbar\omega}{2} - \hbar\omega(n+1)} + \frac{[\ \#\#\ ]^2}{E_n - \frac{\hbar\omega}{2} - \hbar\omega(n-1)} + \frac{n(n-1)(n-3)}{E_n - \frac{\hbar\omega}{2} - \hbar\omega(n-3)} \Big\}$$

$$(E_n - \hbar\omega/2)/\hbar\omega = x \qquad a = \alpha^2 (\hbar/2\mu\omega)^3$$

$$x = n + a\{\quad\}$$

BS K

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I} + \alpha L_3 + \beta L_1$$

$$K = \frac{\vec{L}^2}{2I} + \alpha L_3 \qquad V = \beta L_1$$

$$K|\ell m\rangle = [\underbrace{\frac{\hbar^2}{2I}\ell(\ell+1) + \alpha m\hbar}_{\epsilon_{\ell m}}]|\ell m\rangle$$

$$L_1 = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

1°) $\langle n|V|n\rangle = 0$

$$\langle \ell m|V|\ell' m'\rangle = \frac{\beta}{2}\langle \ell m|L_+ + L_-|\ell' m'\rangle$$

$$= \frac{\beta\hbar}{2}\langle \ell m|\{[(\ell'-m')(\ell'+m'+1)]^{1/2}|\ell' m'+1\rangle + [(\ell'+m')(\ell'-m'+1)]^{1/2}\}|\ell' m'-1\rangle$$

$$= \frac{\beta\hbar}{2}\{[(\ell'-m')(\ell'+m'+1)]^{1/2}\delta_{\ell\ell'}\delta_{m m'+1} + [(\ell'+m')(\ell'-m'+1)]^{1/2}\delta_{\ell\ell'}\delta_{m m'-1}\}$$

$$E_{\ell m} = \epsilon_{\ell m} + \sum_{m'\neq m}\frac{|\langle \ell m|V|\ell m'\rangle|^2}{\epsilon_{\ell m} - \epsilon_{\ell m'}}$$

$$= \epsilon_{\ell m} + \frac{\hbar^2\beta^2}{4\alpha\hbar}\sum_{m'\neq m}\frac{|[(\ell-m')(\ell+m'+1)]^{1/2}\delta_{mm'+1} + [(\ell+m')(\ell-m'+1)]^{1/2}\delta_{mm'-1}|^2}{m-m'}$$

BS K

$$= \varepsilon_{lm} + \frac{\hbar^{\cancel{2}}\beta^2}{4\alpha\cancel{\hbar}}\left\{ \frac{(l-m+1)(l+m)}{m-(m-1)} + \frac{(l+m+1)(l-m)}{m-(m+1)} \right\}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2I}\, l(l+1) + \alpha m \hbar + \frac{\hbar\beta^2}{\cancel{4}_{2}\alpha}\,\cancel{2}m$$

$$[\vec{L}^2, L_3] = 0$$

$$\langle lm |\, [\vec{L}^2, L_3] \,| l'm' \rangle = 0$$

$$[l(l+1) - l'(l'+1)]\,\hbar^2 \langle lm | L_3 | l'm' \rangle = 0$$

$l = l'$ olmalı.

BS K