BÖLÜM 5

YAKLAŞIKLIK METHODLARI

5.1 Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Teorisi

Dejenere olmayan durum

RSPT

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$$

$V = 0$ olduğu zaman $\mathcal{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$

tam enerji özdeğerleri

tam enerji özhetleri

$(\mathcal{H}_0 + V)|n\rangle = E_n |n\rangle$ tam Hamiltonieni çözmek istiyoruz.

pertürbasyon.

$$\left(\mathcal{H}_0 + \lambda V\right)|n\rangle = E_n |n\rangle$$

sürekli reel bir parametre.

pertürbasyonun seviyesini tespit için

$\lambda \to 1$

$$\left.\begin{aligned} |n^{(0)}\rangle &\longrightarrow |n\rangle \\ E_n^{(0)} &\longrightarrow E_n \end{aligned}\right\} \text{pürüzsüz bir geçiş}$$

$\lambda : 0 - 1$

yaklaşım methodunun uygulanabilirliği için

BS K

iki-durum problemi

$$\mathcal{H} = E_1^{(0)} |1^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}| + E_2^{(0)} |2^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}|$$

$$+ \lambda V_{12} |1^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{21} |2^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}|$$

$\lambda = 0$ için $|1^{(0)}\rangle$, $|2^{(0)}\rangle$ enerji özketleri

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)} \end{pmatrix}$$

$V_{12}^* = V_{12}$ $\quad V_{21}^* = V_{21}$ reel

$V_{12} = V_{21}$ Hermitsellik

$$\mathcal{H} = a_0 + \vec{\sigma}\cdot\vec{a} = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 \\ a_1 & a_0 - a_3 \end{pmatrix}$$ 'ye analoji

$\vec{a} = (a_1, 0, a_3)$ küçük

reel

$$E = a_0 \pm \sqrt{a_1^2 + a_3^2}$$

$$\Rightarrow \begin{Bmatrix} E_1 \\ E_2 \end{Bmatrix} = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)})^2}{4} + \lambda^2 |V_{12}|^2 \right.}$$

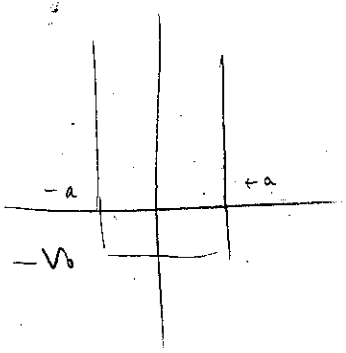
$$|\lambda V_{12}| \ll |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|$$

$$\sqrt{1+\epsilon} = 1 + \frac{1}{2}\epsilon - \frac{\epsilon^2}{8} + \cdots$$

$$E_1 = E_1^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})} + \cdots$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \cdots$$

- Pertürbasyon açılım yeterince zayıf pertürbasyonlar için olmalı. Ama durum bu değil, örneğin



$$E = -\left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}\right)|\lambda V|^2 \qquad \lambda > 0$$

- .

BS K

Pertürbasyon açılımının formal Gelişimi

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

$\{ |n^{(0)}\rangle \}$ tam

$\sum_n |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = 1$ kapanış bağıntısı geçerli anlamında

$$(H_0 + \lambda V)|n\rangle_\lambda = E_n^{(\lambda)} |n\rangle_\lambda$$

- $\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)}$

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n\rangle = (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

$$\langle n^{(0)}| (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = 0 \quad = \langle n^{(0)}| \lambda V \underbrace{- E_n + E_n^{(0)}}_{-H_0} |n\rangle$$

tanımlayıcı projeksiyon op.'ü

- $$\phi_n \stackrel{d}{=} 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|$$

ters op.

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n = \sum_{k\neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|$$

$\phi_n + |n^{0}\rangle\langle n^{0}|$

$$(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \phi_n (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

$\cancel{\langle n^{0}| \lambda V - \Delta_n |n\rangle}$ 0

$$|n\rangle \stackrel{?}{=} \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$$

Bununla birlikte, bu doğru değil, çünkü $\lambda \to 0$ iken

$|n\rangle \to |n^{(0)}\rangle$ olmalı. $(\Delta_n \to 0)$

$\lambda \neq 0$ için $|n\rangle$ ye herzaman 5.1.18 e bir çözüm ekleyebiliriz.

$$|n\rangle = C_n(\lambda)\,|n^{(0)}\rangle + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\,\phi_n\,(\lambda V - \Delta_n)\,|n\rangle .$$

$$\lim_{\lambda \to 0} C_n(\lambda) = 1 \qquad C_n(\lambda) = \langle n^{(0)} | n\rangle$$

$\lambda \neq 0$ olsa bile, $\langle n^{(0)} | n\rangle = C_n(\lambda) = 1$ i kullanacağız.

Böylece, istersek, ket'i hesabın sonunda normalize edebiliriz.

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\,\phi_n \to \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}$$

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\,\phi_n = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\,\phi_n$$

$$\Rightarrow \quad |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}\,(\lambda V - \Delta_n)\,|n\rangle \quad *$$

$$\boxed{\Delta_n = \lambda \langle n^{(0)} | V | n\rangle} \quad *$$

BS K

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \cdots$$

$$\Delta_n = \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \cdots$$

$$\lambda^1 : \quad \Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle$$

$$\lambda^2 : \quad \Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(1)} \rangle$$

$$\vdots$$

$$\lambda^N : \quad \Delta_n^{(N)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(N-1)} \rangle$$

$$|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \cdots$$

$$= |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \left(\lambda V - \lambda \Delta_n^{(1)} - \lambda^2 \Delta_n^{(2)} - \cdots \right)$$

$$\times \left(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \cdots \right)$$

$$\lambda : \quad |n^{(1)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle \qquad \cancel{\sum_{k \neq n} |k^0\rangle\langle k^0 | n^0\rangle} \; 0$$

$\phi_n \Delta_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = 0$ olduğu kullanıldı

$$\Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V | n^{(0)} \rangle$$

$$|n^{(2)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle - \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle$$

$$\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)} = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots$$

$$V_{nk} \equiv \langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle \neq \langle n | V | k \rangle$$

Dalga fonksiyonu Renormalizasyonu

○ Pertürbe ket $|n\rangle$ bilinen anlamda normalize değil.

$$|n\rangle_N = Z_n^{1/2} |n\rangle$$

$${}_N\langle n | n \rangle_N = 1 \quad \text{ile } Z_n \text{ sbt.}$$

$$Z_n^{1/2} = \langle n^{(0)} | n \rangle_N$$

○ Pertürbe enerji özdurumuna karşılık gelen pertürbe olmayan enerji özdurumunda bulunma olasılığı.

$${}_N\langle n | n \rangle_N = Z_n \langle n | n \rangle = 1$$

$$Z_n^{-1} = \langle n | n \rangle = \left(\langle n^{(0)} | + \lambda \langle n^{(1)} | + \lambda^2 \langle n^{(2)} | + \dots \right) \times \left(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots \right)$$

$$= 1 + \lambda^2 \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle + O(\lambda^3) + \dots$$

$$= 1 + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} + O(\lambda^3) + \dots$$

$$Z_n \simeq 1 - \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} < 1$$

leakage

$$Z_n = \partial E_n / \partial E_n^{(0)}$$

Örnek:

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m w^2 x^2 \qquad V = \frac{1}{2} \epsilon m w^2 x^2 \qquad \epsilon \ll 1$$

tam çözüm $\quad \omega \rightarrow \sqrt{1+\epsilon}\, w$

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq 0} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots$$

$$\Delta_0 = V_{00} + \sum_{k \neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$V_{00} = \frac{\epsilon m w^2}{2} \langle 0^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle = \frac{\epsilon \hbar w}{4}$$

$$V_{20} = \frac{\epsilon m w^2}{2} \langle 2^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle = \frac{\epsilon \hbar w}{2\sqrt{2}}$$

$V_{k0} = 0$ $$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle - \frac{\epsilon}{4\sqrt{2}} |2^{(0)}\rangle + O(\epsilon^2)$$

BS K

$$\Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = \hbar\omega\left(\frac{\epsilon}{4} - \frac{\epsilon^2}{16} + O(\epsilon^3)\right)$$

$$\frac{\hbar\omega}{2} \to \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\epsilon}\,\omega = \frac{\hbar\omega}{2}\left(1 + \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon^2}{8} + \cdots\right)$$

$$\langle x | 0^{(0)}\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}\, e^{-x^2/2x_0^2} \qquad x_0 \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$$

○ $x_0 \to x_0 / (1+\epsilon)^{1/4}$

$$\langle x | 0^{(0)}\rangle \to \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}(1+\epsilon)^{1/8}\, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}(1+\epsilon)^{1/2}}$$

$$\simeq \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}\, e^{-x^2/2x_0^2} + \frac{\epsilon}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\, e^{-x^2/2x_0^2}\left(\frac{1}{8} - \frac{1}{4}\frac{x^2}{x_0^2}\right)$$

$$\simeq \langle x | 0^{(0)}\rangle - \frac{\epsilon}{4\sqrt{2}}\langle x | 2^{(0)}\rangle$$

○

$$\langle x | 2^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}\langle x | 0^{(0)}\rangle H_2(x/x_0)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}\, e^{-x^2/2x_0^2}\left(-2 + 4\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right)$$

BS K

Quadratic Stark Olayı

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_0(\vec{r}) \qquad V = -e|\vec{E}|z \qquad e<0$$

$n \neq 1$ 'in dışında dejenerelik var.

$$\Delta_k = -e|E| z_{kk} + e^2 |\vec{E}|^2 \sum_{j \neq k} \frac{|z_{kj}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} + \dots$$

* $z_{kk} = 0$ parity özelliği — lineer Stark olayı yok! daimi dipol mom. i yok.

$$\langle n'l'm'|z|nlm\rangle = 0 \quad \begin{cases} m' = m \\ l' = l \pm 1 \end{cases}$$ WE tesrem parite korun

$[V, L_z] = 0$ $\quad L_z$ iyi kuantum sayısı V varlığında bile.

$$\Delta = -\frac{1}{2}\alpha |\vec{E}|^2$$ atomun kutuplanabilirlik

$$\alpha = -2e^2 \sum_{k \neq 0}^{\infty} \frac{|\langle k^{(0)}|z|100\rangle|^2}{[E_0^{(0)} - E_k^{(0)}]}$$

$$\sum_{k \neq 0} |\langle k^{(0)}|z|100\rangle|^2 = \sum_{\text{tüm } k} |\langle k^{(0)}|z|100\rangle|^2 = \langle 100|z^2|100\rangle$$

BS K $\quad \langle z^2\rangle = \langle x^2\rangle = \langle y^2\rangle = \frac{1}{3}\langle r^2\rangle = a_0^2$

$$-E_0^{(0)} + E_k^{(0)} \geq -E_1^{(0)} + E_1^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0}\left(1 - \frac{1}{4}\right)$$

$$\alpha < \frac{16 a_0^3}{3} \simeq 5.3\, a_0^3 \qquad \alpha = \frac{9 a_0^3}{2} = 4.5\, a_0^3$$

5.2. Dejenere Durum.

$[H_0, A] = 0$ var demek

$$\frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \rightarrow \text{Singüler olacak}$$

baz ketlerimizi $V_{nk} = 0$ olacak şekilde seçeriz. Yani, dejenere pertürbe olmamış ketler tarafından gerilen alt uzayda H'yi köşegenleştiren dejenere pertürbe olmamış ketlerin bir lineer kombinasyonu kullanılıyor.

g-katlı olsun. $\rightarrow$ g farklı öz ket $\Rightarrow E_D^{(0)}$'a karşılık gelir.

$|m^{(0)}\rangle$ ile gösterelim.

farklı enerjili g-pertürbe ket olacaktır. (Pertürbasyonda)

$\{|l\rangle\}$ olsun.

$\lambda \to 0$ iken $|l\rangle \to |l^{(0)}\rangle$ H_0'ın $E_m^{(0)}$ enerjili

$$|l^{(0)}\rangle = \sum_{m \in D} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle$$

$P_0 \longrightarrow \{ |m^{(0)}\rangle \}$ a izdüşüm op.

$P_1 = 1 - P_0$ geri kalan durumlara a.

$$0 = (E - H_0 - \lambda V)|l\rangle$$

$$= (E - E_D^{(0)} - \lambda V)P_0|l\rangle + (E - H_0 - \lambda V)P_1|l\rangle$$

$$(E - E_D^{(0)} - \lambda P_0 V)P_0|l\rangle - \lambda P_0 V P_1 |l\rangle = 0$$

$$-\lambda P_1 V P_0 |l\rangle + (E - H_0 - \lambda P_1 V)P_1|l\rangle = 0$$

P_1 altuzayında çözebiliriz çünkü burada singüler değil.

$$P_1(E - H_0 - \lambda P_1 V P_1)$$

$$P_1|l\rangle = P_1 \frac{\lambda}{E - H_0 - \lambda P_1 V P_1} P_1 V P_0 |l\rangle$$

$$|l\rangle = |l^{(0)}\rangle + \lambda |l^{(1)}\rangle + \cdots$$

$$\Downarrow$$

$$P_1|l^{(1)}\rangle = \sum_{k \notin D} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

BS K

$$\left(E - E_D^{(0)} - \lambda P_0 V P_0 - \lambda^2 P_0 V P_1 \frac{1}{E - H_0 - \lambda V} P_1 V P_0 \right) P_0 | \ell \rangle = 0$$

$$\lambda : \quad (E - E_D^{(0)} - \lambda P_0 V P_0) P_0 | \ell^{(0)} \rangle = 0$$

$$\det \left(V - (E - E_D^{(0)}) \right) = 0$$

$V =$ Matris $(P_0 V P_0)$ $\quad \langle m^{(0)} | V | m'^{(0)} \rangle$ matris elemanlarıdır

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots \\ V_{21} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)} | \ell^{(0)} \rangle \\ \langle 2^{(0)} | \ell^{(0)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta_\ell^{(1)} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)} | \ell^{(0)} \rangle \\ \langle 2^{(0)} | \ell^{(0)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\Delta_\ell^{(1)} = \langle \ell^{(0)} | V | \ell^{(0)} \rangle$$

bu özdeğer denklemi 1. mertebe hatası.

BS K

5.3. Hidrojen Benzeri Atomlar:

ince yapı ve Zeeman olayı

$V_c(r) = e\,\phi(r)$ $|e|Z$'den kaynaklanmıyor. iç tabakalardaki negatif yüklü elektronların bulutu da hesaba katılmalı.

$\vec{L}\cdot\vec{S} \rightarrow$ ince yapı.

valans elektronu $\vec{E} = -\frac{1}{e}\vec{\nabla}V_c(\vec{r})$ ye maruz kalır.

Bu $\vec{B}_{eff} = -\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{E}$ efektif magnetik alanını hisseder.

$$\vec{\mu} = \frac{e}{m_e c}\vec{S}$$

$$H_{LS} \overset{?}{=} -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \mu\cdot\left(\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{E}\right)$$

$$= \frac{e\vec{S}}{m_e c}\cdot\left[\frac{\vec{P}_e}{m_e c}\times\left(\frac{\vec{x}}{r}\right)\frac{1}{(-e)}\frac{dV_c}{dr}\right]$$

$$= \frac{1}{m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}(\vec{L}\cdot\vec{S})$$

$\frac{1}{2}$

$$H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V_c(r) \quad \Bigg\} \quad \begin{array}{l} \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z \\ \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z \end{array}$$

— H_{LS} olmadığında her ikisi de enerji özketleri

— olduğunda 2. si çünkü $\begin{cases} [\vec{L}\cdot\vec{S},\ L_z(S_z)] \neq 0 \\ [\vec{L}\cdot\vec{S},\ \vec{J}^2(J_z)] = 0 \end{cases}$

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\, \underbrace{\mathcal{Y}_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m}}_{\text{Spin-açısal}}$$

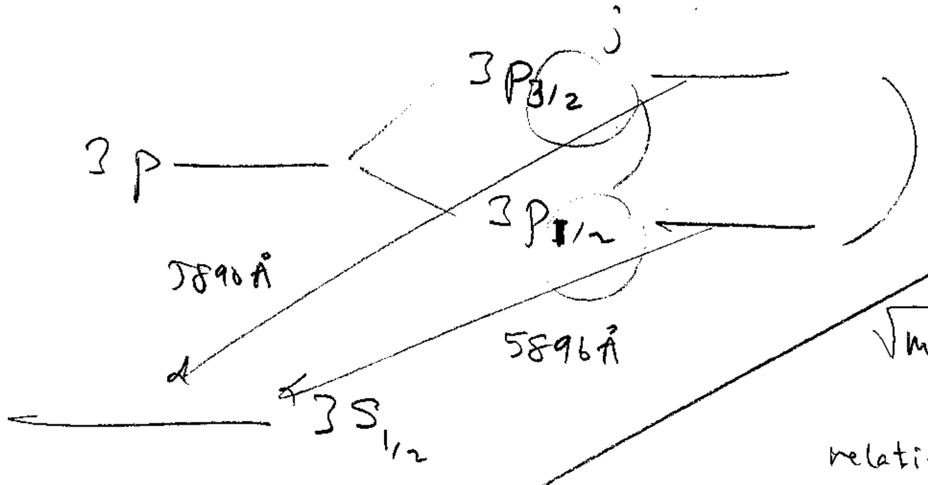
$$\Delta_{nlj} = \frac{1}{2m_e^2c^2}\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle \frac{\hbar^2}{2}\begin{Bmatrix} l \\ [-(l+1)] \end{Bmatrix} \begin{matrix} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2} \end{matrix}$$

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle = \underbrace{\int_0^\infty R_{nl}\frac{1}{\cancel{r}}\frac{dV_c}{dr}R_{nl}\, r^{\cancel{2}\,1}\, dr}_{\sim e^2/a_0^3}$$

$$V_c = \frac{Ze}{r}$$

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R^2 \frac{1}{r^3} = \frac{e^3}{a_0^3}\frac{1}{n^3(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

$\underbrace{1s^2\,2s^2\,2p^6}_{\text{10 küresel simetrik elektron sistemi}}\,3s$ — dıştaki elektronu daha üst seviyelere ($l \neq 0$) örn. 3p ye uyarılmasını inceleyelim.



Dublet — ince yapı.

$$\sqrt{m_e^2c^4+p^2c^2} - m_ec^2 \simeq \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3c^2}$$

relativistik kütle düzeltme terimi

BS K

Zeeman Olayı (Anomal)

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B}\times\vec{r}) \qquad \vec{B} = B\hat{z}$$

$$= -\frac{1}{2}(By\,\hat{x} - Bx\,\hat{y})$$

$$\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}$$

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + V_c(r) - \frac{e}{2m_e c}(\vec{p}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{p}) + \frac{e^2\vec{A}^2}{2m_e c^2}$$

$$\langle \vec{x}'|\,\vec{p}\cdot\vec{A}(\vec{x})|\,\rangle = -i\hbar\vec{\nabla}'\cdot\left[\vec{A}(\vec{x}')\langle\vec{x}'|\,\rangle\right]$$

$$= \langle\vec{x}'|\vec{A}(\vec{x})\cdot\vec{p}|\,\rangle + \langle\vec{x}'|\,\rangle\left[-i\hbar\vec{\nabla}'\cdot\vec{A}(\vec{x}')\right]$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A}(\vec{x}) = 0$$

$$\vec{A}\cdot\vec{p} = \frac{|\vec{B}|}{2}L_z \qquad \vec{A}^2 = \frac{1}{4}|\vec{B}|^2(x^2+y^2)$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V_c(r) - \frac{e}{2m_e c}|\vec{B}|L_z + \frac{e^2}{8m_e c^2}|\vec{B}|^2(x^2+y^2)$$

$$-\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{-e}{m_e c}\vec{S}\cdot\vec{B} = \frac{-e|\vec{B}|}{m_e c}S_z$$

BS K

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V_c(r)$$

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}\vec{L}\cdot\vec{S}$$

$$H_B = \frac{-e|\vec{B}|}{2m_e c}(L_z + 2S_z)$$

nin özhetleri kullanarak H_B yi pertürbasyon

$$L_z + 2S_z = J_z + S_z$$

$$\frac{-e|\vec{B}|}{2m_e c}\langle J_z + S_z\rangle_{j=l\pm\frac{1}{2}\, m}$$

$$|j = l\pm\tfrac{1}{2}, m\rangle = \pm\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m_l = m-\tfrac{1}{2}, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m_l = m+\tfrac{1}{2}, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$\langle J_z\rangle = m\hbar$$

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(|C_+|^2 - |C_-|^2\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{2l+1}\right)\left[\left(l\pm m+\tfrac{1}{2}\right) - \left(l\mp m+\tfrac{1}{2}\right)\right] = \pm\frac{m\hbar}{2l+1}$$

$$\Delta E_B = \frac{-e\hbar B}{2m_e c}\, m\left[1 \pm \frac{1}{2l+1}\right]$$

BS K

5.4. Varyasyonel Yöntemler

$|\tilde{0}\rangle$ deneme keti

$|0\rangle$ gerçek taban durum

$$\bar{H} \equiv \frac{\langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle}$$

Teorem:

$$\bar{H} \geq E_0 .$$

Bu, çeşitli $|\tilde{0}\rangle$ alarak E_0'a bir üst sınır bulabiliriz.

İspat:

$$|\tilde{0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k|\tilde{0}\rangle \qquad H|k\rangle = E_k |k\rangle$$

$$E_k = E_k - E_0 + E_0$$

$$\bar{H} = \frac{\sum_k |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2 E_k}{\sum |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2}$$

$$= \frac{\sum_{k=1}^{\infty} |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2 (E_k - E_0)}{\sum |\langle k|\tilde{0}\rangle|^2} + E_0 \geq E_0$$

BS K

1°)

H atomu için $\langle x|0\rangle \propto e^{-r/a}$ olduğunu varsayalım

$E_0 = -e^2/2a_0$ doğru taban durum enerjisini bulunuz.

2°)

$$V = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$$

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \qquad E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{4a^2} \quad \text{tam çözümler}$$

$$\langle x|\tilde{0}\rangle = a^2 - x^2$$

$$\bar{H} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{+a} (a^2-x^2)\, d_x^2 (a^2-x^2)\, dx}{\int_{-a}^{+a} (a^2-x^2)^2\, dx}$$

$$= \frac{10}{\pi^2}\frac{\pi^2\hbar^2}{8a^2 m} \simeq 1.0132\ E_0 \qquad \%1.3$$

$$\langle x|\tilde{0}\rangle = |a|^\lambda - |x|^\lambda$$

$$\bar{H} = \frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{2\lambda-1}\frac{\hbar^2}{4ma^2} \qquad \lambda = \frac{1+\sqrt{6}}{2} \simeq 1.72$$

$$\bar{H}_{min} = \frac{5+2\sqrt{6}}{\pi^2} E_0 \simeq 1.00298\, E_0 \qquad \%0.3$$

BS K

5.5. Zaman bağımlı potansiyeller

Etkileşim Resmi

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(t) \qquad \mathcal{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

başlangıçta $\mathcal{H}_0$'ın enerji özdurumlarından sadece birinde, söz. $|i\rangle$ de popüle olduğu durum ile ilgileniyoruz. Zaman ilerler iken $V(t) \neq 0$ ile $|i\rangle$ den başka durumlarda popüle olduğunu biliyoruz. Evrim op.'ü $e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$ gibi basit değil.

* $n \neq i$'li $|n\rangle$ durumunda sistemi bulunma olasılığı nedir?

Daha genel olarak, keyfi bir ket'in zamanla nasıl değiştiğini arıyoruz. $t=0$ da bir fiziksel sistemin durum ketinin

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n(0) |n\rangle$$

ile verildiğini varsayalım. $t>0$ için $C_n(t)$ yi arıyoruz.

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

Schrödinger resminde

$|n\rangle$ bulunma olasılığı $|C_n(t)|^2$

BS K

Etkileşim Resmi

durum keti $t=t_0$ da $|\alpha\rangle$ ile çalışan fiziksel bir sist. aldım.

Daha sonraki bir zamanda, Schr. Res. durum keti $|\alpha,t_0;t\rangle_S$ olsun..

$$|\alpha,t_0;t\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}\,|\alpha,t_0;t\rangle_S$$

$t=0$ da $|\;\rangle_I = |\;\rangle_S$

$$A_I \equiv e^{iH_0t/\hbar}\,A_S\,e^{-iH_0t/\hbar}$$

$$V_I = e^{iH_0t/\hbar}\,V\,e^{-iH_0t/\hbar}$$

S.R de zaman-bağımlı pot.

$$|\alpha\rangle_H = e^{iHt/\hbar}\,|\alpha,t_0=0;t\rangle_S$$

$$A_H = e^{iHt/\hbar}\,A_S\,e^{-iHt/\hbar}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle_I = V_I\,|\alpha,t_0;t\rangle_I$$

Schrödinger benzeri Schrödingerimsi

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I, H_0]$$

Heisenberg-benzeri Heisenbergimsi

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n C_n(t)|n\rangle$$

$t_0 = 0$ S.S.4 denklemi ile gelen $e^{iH_0t/\hbar}$ ile sağdan çarp.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle n|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_m \langle n|V_I|m\rangle\langle m|\alpha, t_0; t\rangle_I$$

$$\langle n|e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}|m\rangle = V_{nm}(t)\, e^{i(E_n-E_m)t/\hbar}$$

$$C_n(t) = \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I$$

$$i\hbar\, \dot{C}_n(t) = \sum_m V_{nm}\, e^{i\omega_{nm}t}\, C_m(t)$$

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = -\omega_{mn}$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \vdots \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \cdots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

BS K

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1\\ \dot{c}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \gamma e^{i\omega t}e^{i\omega_{12}t}\\ \gamma e^{-i\omega t}e^{i\omega_{21}t} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}$$

$$\omega_{21}=-\omega_{12}=(E_2-E_1)/\hbar$$

Sma
$$\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{i(\omega-\omega_{21})t/2}\alpha_1\\ e^{-i(\omega-\omega_{21})t/2}\alpha_2\end{pmatrix}$$

$$\frac{i(\omega-\omega_{21})}{2}\alpha_1+\dot{\alpha}_1=\frac{\gamma}{i\hbar}\alpha_2 \qquad \frac{-i(\omega-\omega_{21})}{2}\alpha_2+\dot{\alpha}_2=\frac{\gamma}{i\hbar}\alpha_1$$

$$\ddot{\alpha}_1=-\left[\gamma^2/\hbar^2+\frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}\right]\alpha_1 \quad \ddot{\alpha}_2=-\left[\gamma^2/\hbar^2+\left(\frac{\omega-\omega_{21}}{2}\right)^2\right]\alpha_2$$

$$\alpha_2\propto\begin{pmatrix}\sin\\ \cos\end{pmatrix}\left[(\gamma^2/\hbar^2+(\omega-\omega_{21})^2/4\right]^{1/2}t$$

$$\Rightarrow\quad c_2=e^{-i(\omega-\omega_{21})t/2}\alpha_2$$

$$i\hbar\dot{c}_2=\gamma e^{-i\omega t}e^{i\omega_{21}t}c_1$$

BS K

Zaman bağımlı iki-durum problemi

tam çözülebilir :

$$H_0 = E_1 |1\rangle\langle 1| + E_2 |2\rangle\langle 2| \qquad E_2 > E_1$$

$$V(t) = \gamma e^{i\omega t} |1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t} |2\rangle\langle 1|$$

reel ve pozitif.

$$\begin{cases} V_{12} = V_{21}^{*} = \gamma e^{i\omega t} \\ V_{11} = V_{22} = 0 \end{cases} \qquad |1\rangle \rightleftarrows |2\rangle \text{ arasında geçiş var.}$$

$t=0$ da $\quad c_1(0) = 1 \quad c_2(0) = 0$

düşük olan enerji düzeyi popüle edilmiş ise,

Her iki durumun her birinde bulunma olasılığı, (Rabi formülü)

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4} \sin^2\left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\}$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \qquad \text{prs. 30.}$$

BS K

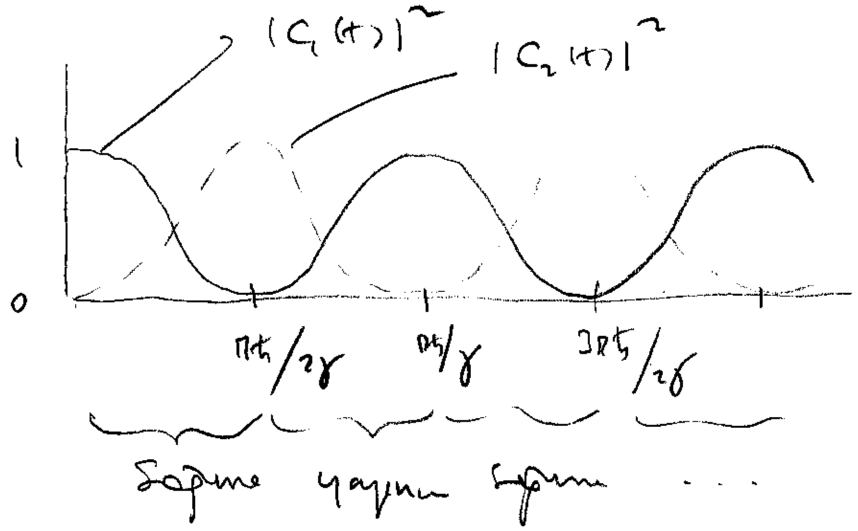
E_2 üst durumunda bulunma olasılığı

$$\Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}}$$

frekansı 2 katı ile osilasyon yapar. Osilasyonun genliği,

$$\omega \simeq \omega_{21} = \frac{E_2-E_1}{\hbar} \qquad \text{rezonans şartı.}$$

olduğu zaman büyüktür



5.6. Zaman-bağımlı pertürbasyon teorisi

Dyson Serisi $\quad i\hbar \dot{C}_n(t) = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} C_m(t)$

$$\boxed{H = H_0 + V(t)}$$

Çoğu zaman $C_n(t)$'lerin elde edilmesi mümkün değildir.

$C_n(t) = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + \dots$ pert. açılımı

1. mertebe 2. mertebe ... genlikler

başlangıçta yalnız i durumu popüle ise RHS (5.5.17) $C_n^{(0)} = \delta_{ni}$ ye

yaklaştırırız. ve bunu $C_n^{(1)}$'in zaman türevi ile (LHS) ilişkilendiririz. Dif denk.'i $C_n^{(1)}$ i elde etmek için çözer ve bunu 5.5.17 de (LHS) yerleştiririz. $C_n^{(2)}$ için dif denk. elde ederiz v.s. ((1927, P.M. Dirac)

$C_n(t)$ yerine $U_I(t, t_0)$ zaman evrim op.'ünü kullanırız.

bir pert. açılım elde ederiz. ve sonunda U_I lar $C_n(t)$ lere bağlanır.

Etkileşme resminde zam. evrim op.'u

$$U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I = |\alpha, t_0; t\rangle_I$$

BS K

Etkileşim resmini durum keti için Diferansiyel denk.

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t,t_0) = V_I(t)\, U_I(t,t_0)$$

başlangıç şartı : $U_I(t,t_0)\Big|_{t=t_0} = \mathbb{1}$.

$$U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\, U_I(t',t_0)\, dt'$$

İterasyon ,

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\, dt' \left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'} V_I(t'')\, U_I(t'';t_0)\, dt'' \right]$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\, dt' + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'')$$

$$+ \cdots$$

$$+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \cdots \times \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)}\, V_I(t') \ldots V_I(t^{(n)})$$

$$+ \cdots$$

Dyson serisi

Geçiş Olasılığı

Bir kere $U_I(t,t_0)$ verilir ise, her durum ketinin zaman gelişimini öngörebiliriz. Örn, $t=0$ da başlangıç keti H_0'ın enerji özketlerinden biri olsun, o zaman daha sonraki bir zamanda başlangıç durum ketini elde etmek için, ihtiyacımız olan tek şey $U_I(t,0)$ ile çarpmaktır.

$$|i, t_0=0; t\rangle_I = U_I(t,0)|i\rangle$$

$$= \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n| U_I(t,0)|i\rangle}$$

— $c_n(t)$ den başka bir şey değil.

$U(t,t_0)$ ile $U_I(t,t_0)$ arasındaki ilişkiye bakalım.

SP

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar}|\alpha, t_0; t\rangle_S$$

$$= e^{iH_0 t/\hbar} U(t,t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_S$$

$$= e^{iH_0 t/\hbar} U(t,t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar}|\alpha, t_0; t\rangle_I$$

$$U_I(t,t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} U(t,t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar}$$

Bir H_0 ın enerji özdurumları arasındaki matris elemanına bakalım.

BS K

$$\underbrace{\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle}_{\text{ama bu değil!}} = e^{i(E_n t - E_i t_0)/\hbar} \underbrace{\langle n | U(t, t_0) | i \rangle}_{\text{(2.2) geçiş genliği}}$$

Bununla birlikte,

$$|\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle|^2 = |\langle n | U(t, t_0) | i \rangle|^2$$

U_I 'nun matris elemanları enerji özdurumları olarak değil de, örn. $[H_0, A] \neq 0$ olan A'nın $|a'\rangle$ ve $|b'\rangle$ özdurumları olarak alınırsa,

$$|\langle b' | U_I(t, t_0) | a' \rangle| \neq \langle b' | U(t, t_0) | a' \rangle$$

Ama, genelde, başlangıç ve son durumlar H_0'ın özdurumları olarak alınır. Diğer durumlarda yapmamız gereken yeni $|a'\rangle$, $|b'\rangle$ yi H_0'ın enerji özketleri cinsinden açmaktır.

$t = t_0$ da sistemin $|i\rangle$ durumunda olduğunu bilelim. SP. deki durum keti $|i, t_0; t\rangle$ $|i\rangle$ ye bir faz çarpanı ile eşittir. Etkileşim resminde $t = t_0$ da faz çarpanı

$$|i, t_0; t_0\rangle_S = e^{-iE_i t_0/\hbar} |i\rangle$$

şeklinde seçmek uygundur. Bu etkileşim resminde

$$|i, t_0; t\rangle_I = |i\rangle$$

[illegible] olduğu anlamına gelir.

Daha sonraki bir zamanda,

$$|i, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0)|i\rangle$$

bunu

$$|i, t_0; t\rangle_I = \sum_n C_n(t)|n\rangle$$

ile kıyaslayarak

$$C_n(t) = \langle n| U_I(t, t_0)|i\rangle$$

olduğunu görürüz. U_I için pert. açılımı,

$$C_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$$

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle n|V_I(t')|i\rangle\, dt'$$

$$= \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t')\, dt'$$

$$C_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, e^{i\omega_{nm}t'} V_{nm}(t')\, e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t'')$$

$$e^{i(E_n - E_i)t/\hbar} = e^{i\omega_{ni}t}$$

$$P(i\to n) = \left| C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \dots \right|^2$$

BS K

Sabit pertürbasyon

$$V(t) = \begin{cases} 0 & t<0 \\ V & t \geq 0 \end{cases}$$

$t=0$ da $|i\rangle$ var.

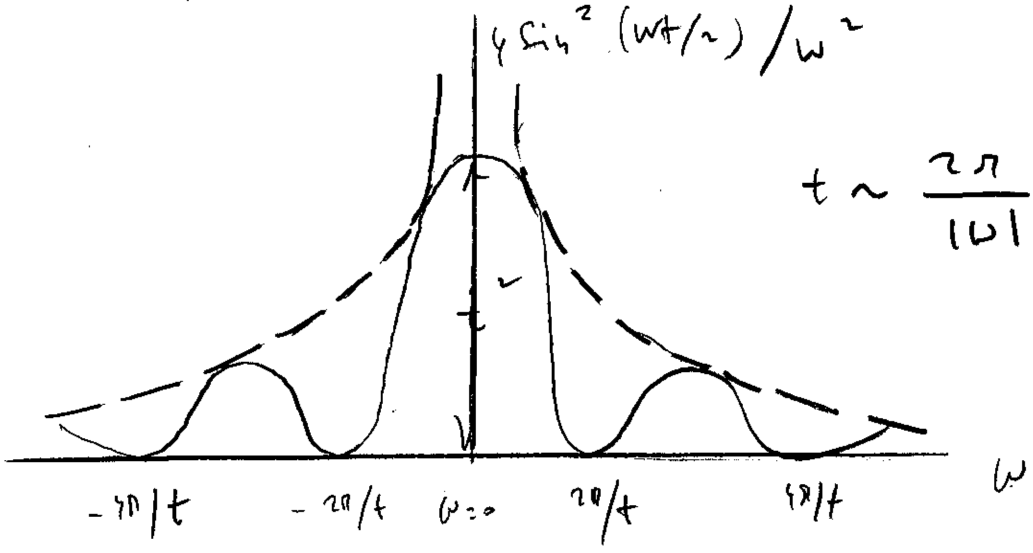
$$c_n^{(0)} = c_n^{(0)}(0) = \delta_{in}$$

$$c_n^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt' = \frac{V_{ni}}{E_n - E_i}\left(1 - e^{i\omega_{ni}t}\right)$$

$$|c_n^{(1)}|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2}\left(2 - 2\cos\omega_{ni}t\right)$$

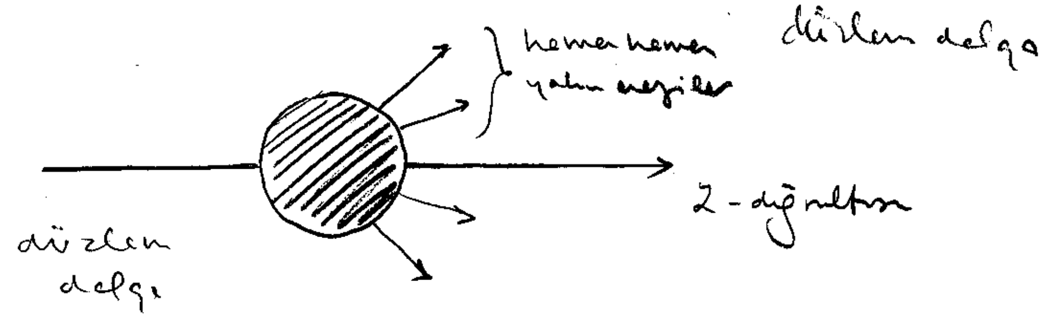
$$= \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2\left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar}\right)$$

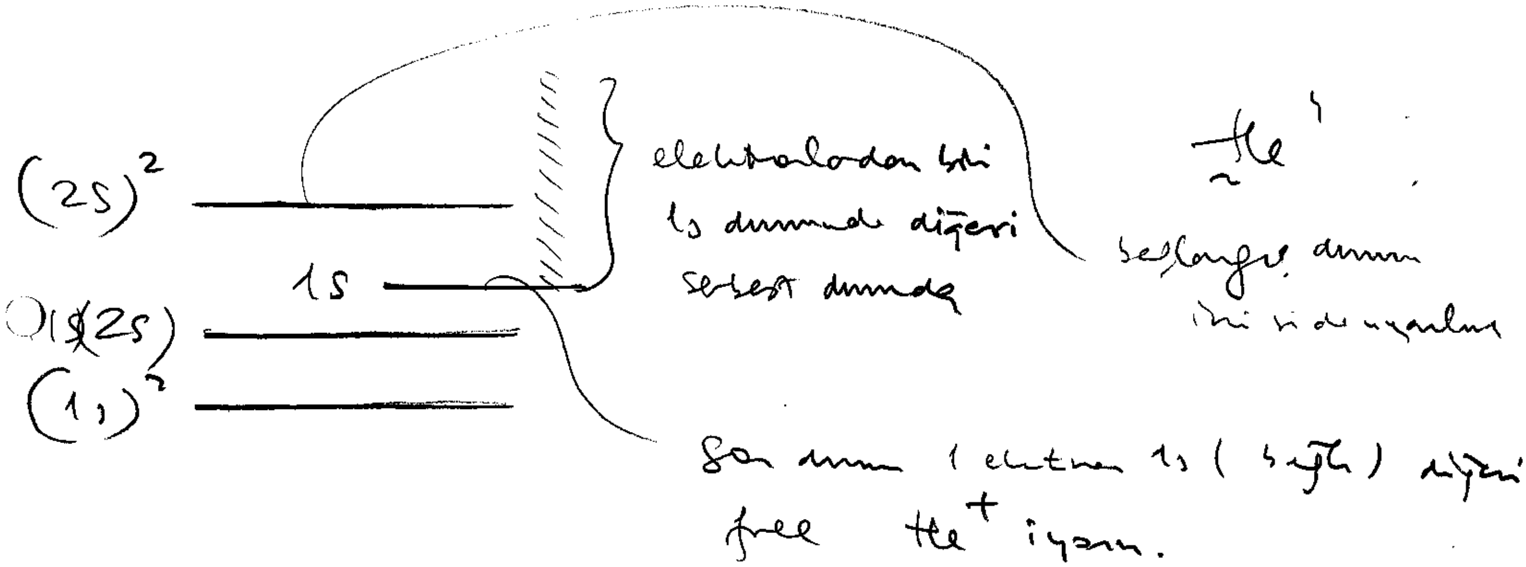
hem $|V_{ni}|^2$ 'ye ve hem de enerji farkına bağlı.



$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega|} = \frac{2\pi\hbar}{|E_n - E_i|}$$

BS K





bu gibi bir durumda, toplam olasılık

$$\sum_{n,\, E_n \simeq E_i} |C_n^{(1)}|^2$$

E — $E+dE$ aralığındaki durumların sayısı olarak, son durumların yoğunluğu

$$\rho(E)\,dE$$

$$\sum_{n,\, E_n \simeq E_i} |C_n^{(1)}|^2 \Rightarrow \int dE_n\, \rho(E_n)\, |C_n^{(1)}|^2$$

$$= 4 \int \sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right] \frac{|V_{ni}|^2}{(E_n-E_i)^2}\, \rho(E_n)\, dE_n$$

$t \to \infty$ iken,

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{|E_n - E_i|^2} \sin^2\left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar}\right] = \frac{\pi t}{2\hbar}\,\delta(E_n - E_i)$$

$$\lim_{\alpha\to\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x),$$ den.

$$\lim_{t\to\infty} \int dE_n\, \rho(E_n)\, |c_n^{(1)}(t)|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \overline{|V_{ni}|^2}\, \rho(E_n)\, t \Big|_{E_n \simeq E_i}$$

Geçiş oranı, yani birim zaman başına geçiş olasılığı

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_n |c_n^{(1)}|^2\right)$$

büyük t'ler için zamanda sbt. bunu $w_{i\to[n]}$ olarak adlandırıp,

$$w_{i\to[n]} = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \overline{|V_{ni}|^2}\, \rho(E_n)_{E_n \simeq E_i}$$

$$= \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) |V_{ni}|^2\, \delta(E_n - E_i)$$

Fermi'nin altın kuralı.

BS K

Harmonik pertürbasyon,

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

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \left(V_{ni}\, e^{i\omega t'} + V_{ni}^{\dagger}\, e^{-i\omega t'} \right) e^{i\omega_{ni} t'}\, dt'$$

$$= \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{1 - e^{i(\omega+\omega_{ni})t}}{\omega+\omega_{ni}}\, V_{ni} + \frac{1 - e^{+i(\omega_{ni}-\omega)t}}{-\omega+\omega_{ni}}\, V_{ni}^{\dagger} \right\}$$

bu sbt pert. durumundakine benzer, tek değişim,

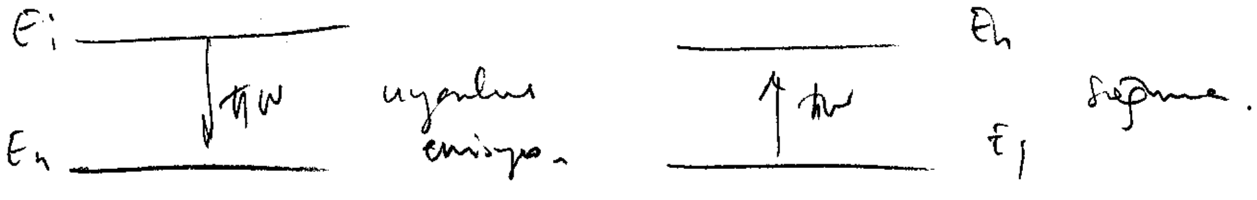
$$\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar} \rightarrow \omega_{ni} \pm \omega \quad \text{alınmalıdır.}$$

$t \to \infty$ iken $|C_n^{(1)}|^2$

$$\omega_{ni} + \omega \simeq 0 \quad \text{ya da} \quad E_n \simeq E_i - \hbar\omega$$

$$\omega_{ni} - \omega \simeq 0 \quad \text{"} \quad E_n \simeq E_i + \hbar\omega$$

durumlarında dikkate değer değer alır.



BS K

5.7. Klasik Işınım Alanı ile Etkileşmelere Örnekler

Soğurma ve Uyarılmış Emisyon

$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m_e} + e\phi(\vec{x}) - \frac{e}{m_e c}\vec{A}\cdot\vec{p} \qquad \left(|\vec{A}|^2 \text{ ihmal}\right)$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$$

$$\vec{A} = 2A_0\,\hat{\varepsilon}\,\cos\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\vec{x} - \omega t\right)$$

polarizasyon yayılım doğrultusundaki birim vektör.

$$\cos\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\vec{x} - \omega t\right) = \frac{1}{2}\left[e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x} - i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x} + i\omega t}\right]$$

$\frac{e}{m_e c}\vec{A}\cdot\vec{p}$ zaman bağımlı pertürbasyon.

$$= -\frac{e}{m_e c}A_0\,\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}\,\left[\qquad\right]$$

$$V^{\dagger}_{ni} = -\frac{eA_0}{m_e c}\left[e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})}\hat{\varepsilon}\cdot\hat{p}\right]_{ni}$$

$$w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m_e^2 c^2}|A_0|^2\left|\langle n|\,e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})}\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}\,|i\rangle\right|^2 \times \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

BS K

$$\delta(\omega-\omega_{ni}) = \lim_{\gamma\to 0}\left(\frac{\gamma}{2\pi}\right)\frac{1}{\left[(\omega-\omega_{ni})^2+\gamma^2/4\right]}$$

soğurulma tesir kesiti;

$$\frac{(\text{Enerji/birim zaman})\ \text{atom tarafından soğurulan}\ (i\to n)}{\text{Işınım demeti enerji akısı}}$$

Birim zaman yüzeyden başına enerji (Enerji akısı) için, KEMT

$$c\,\mathcal{U} = \frac{1}{2\pi}\frac{\omega^2}{c^2}|A_0|^2$$

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2}\left(\frac{E_{max}^2}{8\pi}+\frac{B_{max}^2}{8\pi}\right)$$

birim hacim başına enerji (Enerji yoğunluğu) için

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \qquad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

$$\sigma_{abs} = \frac{\hbar\omega\,(2\pi/\hbar)(e^2/m_e^2c^2)|A_0|^2|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})}\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle|^2\delta(E_n-E_i-\hbar\omega)}{(1/2\pi)(\omega^2/c^2)\,|A_0|^2}$$

$$= \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)|\langle n|e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x}}\hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle|^2\delta(E_n-E_i-\hbar\omega)$$

BS K

Elektrik Dipol Yaklaşımı

$$e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x}} = 1 + i\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\vec{x} + \dots$$

Hafif bir atom için; 1 e yaklaştırılabilir.

1°)

$\hbar\omega$ atomik düzey aralığı mertebesinde olmalı;

$$\hbar\omega \sim \frac{Ze^2}{(a_0/Z)} \simeq \frac{Ze^2}{R_{atom}}$$

$$\Rightarrow \frac{c}{\omega} = \bar{\lambda} \sim \frac{c\hbar R_{atom}}{Ze^2} \simeq \frac{137\, R_{atom}}{Z}$$

$$\frac{1}{\bar{\lambda}} R_{atom} \sim \frac{Z}{137} \ll 1$$

x 'in matris elemanı R_{atom}
x^2 ninki R_{atom}^2 } mertebesinde olduğundan iyi bir yaklaşım.

$$\langle n| e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})}\, \hat{\varepsilon}\cdot\vec{p}\,|i\rangle \to \hat{\varepsilon}\cdot\langle n|\vec{p}|i\rangle$$

$\hat{\varepsilon} \parallel \hat{x}$ $\qquad \langle n|p_x|i\rangle$

$$[x, H_0] = \frac{i\hbar p_x}{m}$$

Elektrik dipol yaklaşımı

$$\langle n|p_x|i\rangle = \frac{m}{i\hbar}\langle n|[x,H_0]|i\rangle = i m \omega_{ni}\langle n|x|i\rangle$$

BS K

$\vec{X}$: $q = \pm 1$ ile rank 1 olan bir küresel tensör,

$m' - m = \pm 1$ $\quad |j' - j| = 0, 1$ $\quad 0 \to 0$ geçişi yok!

$$\sigma_{abs} = 4\pi^2 \alpha \omega_{ni} \, |\langle n | x | i \rangle|^2 \, \delta(\omega - \omega_{ni})$$

$$\int \sigma_{abs}(\omega) \, d\omega = \sum_n 4\pi^2 \alpha \, \omega_{ni} \, |\langle n | x | i \rangle|^2$$

$$f_{ni} \equiv \frac{2m\omega_{ni}}{\hbar} |\langle n | x | i \rangle|^2$$ osilatör şiddeti

$$\sum_n f_{ni} = 1$$ Thomas – Reiche – Kuhn toplam kuralı.

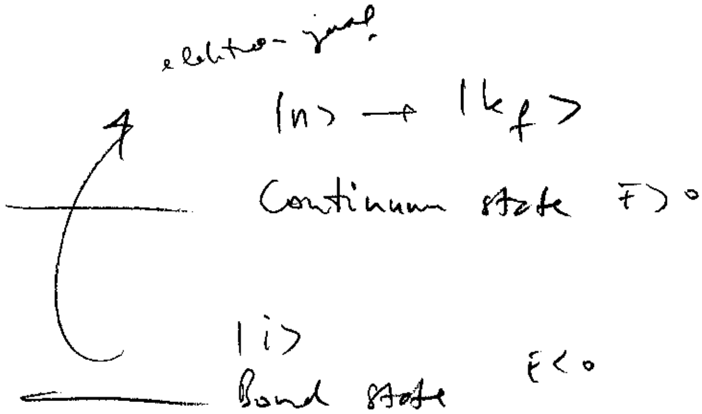
$$\int \sigma_{abs}(\omega) \, d\omega = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar}{2m_e} = 2\pi^2 c \left(\frac{e^2}{m_e c^2} \right)$$ EMT

$\hbar$ yok!

BS K

Fotoelektrik Olay.

Işınım alanına yerleştirilmiş bir atomdan elektron çıkarılması.



σ_{abs} kullanılabilir

Temel görevimiz birim enerji aralığı başına son durumların sayısını hesaplamak.

— düzlem dalgalar için kutu normalizasyonu kullanılacak.

$$\langle \vec{x} | k_f \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k}_f \cdot \vec{x}}$$

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \ldots$$

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

$L \to \infty$ iken $n \to$ sürekli bir değişken almak iyi bir yaklaşım

$$n \;\_\_\_\; n+dn \qquad E = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{n^2 (2\pi)^2}{L^2}$$

BS K

Örgü uzayındaki radyal vektörün doğrultusu sadece son durumun mom. doğrultusudur. öyleki $E - E+dE$ arasındaki artıktaki durumların sayısı

$$n^2 d\Omega \frac{dn}{dE} dE = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(k_f^2\right) \frac{dk_f}{dE} d\Omega dE$$

$$dE = \left(\hbar^2 k_f / m_e\right) dk_f$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k_f \, dE \, d\Omega$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar}{m_e^2 \omega} \left| \langle \vec{k}_f | e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x}} \hat{\varepsilon}\cdot\vec{p} | i \rangle \right|^2 \frac{m_e k_f L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3}$$

K tabakası $\langle k_f | e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x}} \hat{\varepsilon}\cdot\vec{p} | i \rangle$

$$= \hat{\varepsilon} \cdot \int d^3x \, \frac{e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{x}}}{L^{3/2}} e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\vec{x}}$$

$$\times \left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\left[e^{-Zr/a_0} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \right]$$

kısmi integrasyon

$$\hat{\varepsilon} \cdot \left[\vec{\nabla} e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\vec{x})} \right] = 0 \qquad \hat{\varepsilon} \perp \hat{n}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32 Z e^2 k_f \frac{(\hat{\varepsilon}\cdot\vec{k}_f)^2}{m c \omega} \frac{Z^5}{a_0^5} \frac{1}{\left[(Z^2/a_0^2)+q^2\right]^4}$$

BS K

5.1.) $\lambda H_1 = bx$ (a) $\langle 0|bx|0\rangle = 0$

$$\Delta E = -\sum_{n\neq 0} \frac{|\langle n|bx|0\rangle|^2}{E_n - E_0} = -b^2 \sum_n \frac{|\langle n|\sqrt{\hbar/2m\omega}(a+a^\dagger)|0\rangle|^2}{(n+\cancel{\tfrac{1}{2}})\hbar\omega - \cancel{\tfrac{\hbar\omega}{2}}}$$

$$= -b^2 \sum_{n\neq 0} \frac{(\hbar/2m\omega)\,|\delta_{n1}|^2}{n\hbar\omega} = -b^2 \frac{\cancel{\hbar}}{2m\omega}\frac{1}{\cancel{\hbar}\omega}$$

$$E_0^{(0)} = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{b^2}{2m\omega^2}$$

(b) $\mathcal{H} = \dfrac{P^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 + bx \qquad \mathcal{H}\psi_n = E_n\psi_n$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\Big(\underbrace{x^2 + \frac{2b}{m\omega^2}x}_{x^2 + 2\frac{b}{m\omega^2}x \pm \left(\frac{b}{m\omega^2}\right)^2}\Big)$$

$$= -\frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{b}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \frac{b}{m\omega^2}\right)^2$$

$$x' = x + \frac{b}{m\omega^2}$$

$$\mathcal{H} - \mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2$$

$$(\mathcal{H} - \mathcal{H}_0)\psi_n' = E_n'\psi_n' \Rightarrow$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}\cancel{m\omega^2}\frac{b^2}{m^2\cancel{\omega^4}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{b^2}{2m\omega^2}$$

BS K

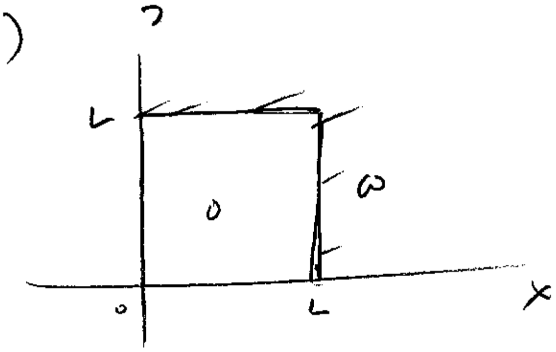
5.2.) $|k\rangle$: perturbed, $|k^{(0)}\rangle$: unperturbed $\Rightarrow \dfrac{|\langle k|k^{0}\rangle|^2}{|\langle k|k\rangle|^2} = ?$

$$|k\rangle = |k^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{n\neq k} \frac{|n^{(0)}\rangle V_{nk}}{E_k^{0} - E_n^{0}} + \cdots$$

$$\langle k|k\rangle = 1 + \lambda^2 \sum_{n\neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k^{0} - E_n^{0})^2} + \cdots$$

$$\frac{|\langle k|k^{0}\rangle|^2}{|\langle k|k\rangle|^2} = 1 - \lambda^2 \sum_{n\neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k^{0} - E_n^{0})^2} + \cdots$$

5.3.)



$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$\Rightarrow \psi_{00} = \frac{2}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{\pi y}{L} = |1\rangle$$

$$\psi_{01} = \frac{2}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi y}{L} = |2\rangle$$

$$\langle 1|\lambda xy|1\rangle = \int_0^L\!\!\int \frac{4}{L^2} \lambda xy \sin^2 \frac{\pi x}{L} \sin^2 \frac{\pi y}{L}\, dx\, dy$$

$$= \frac{\lambda L^2}{4}$$

$|2\rangle$ için dejenerasyon var.

BS K

5.10.) $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2)$ $\psi_n(x,y) = \frac{2}{a}\sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{a}$

(a)

$n_x = n_y = 1$

$n_x = 2 \quad n_y = 1$

$n_x = 1 \quad n_y = 2$

$\psi_{11}, \psi_{12}, \psi_{21}$

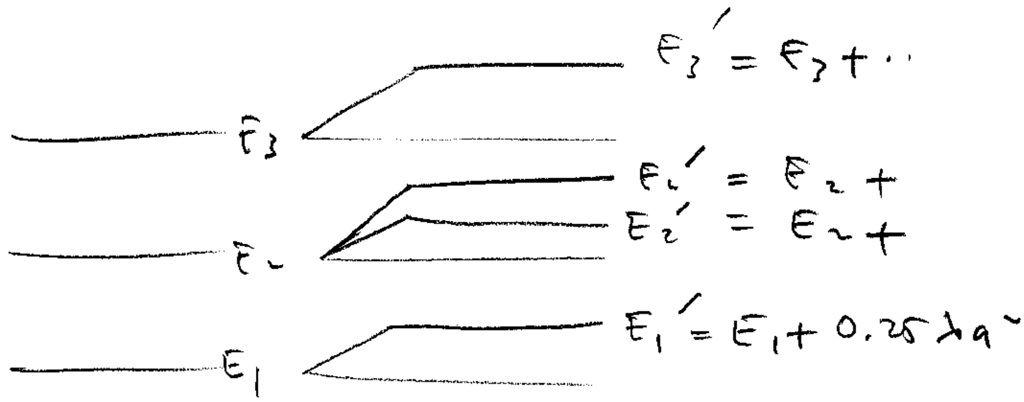
2 both degenerate

(b) 1st order: (i) $\Delta E_n = \langle n | \lambda xy | n \rangle = \lambda$ ~ λ 'da de linear.

(ii) $\Delta E_1 = \lambda a^2/4 = 0.25\,\lambda a^2$

$$\Delta E_2 = \left(\frac{2}{a}\right)^2 \iint_0^a \sin^2\frac{\pi x}{a}\sin^2\frac{2\pi y}{a}\,\lambda xy = \cdots$$

$$\Delta E_3 = \left(\frac{2}{a}\right)^2 \iint_0^a \sin^2\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\,\lambda xy = \cdots$$



BS K

5.11.) (a) $\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1^\circ & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^\circ \end{pmatrix}$

$$\begin{vmatrix} E_1^\circ - E & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^\circ - E \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E_{1,2} = \frac{E_1^\circ + E_2^\circ}{2} \pm \left[\left(\frac{E_1^\circ - E_2^\circ}{2}\right)^2 + \lambda^2\Delta^2 \right]^{1/2}$$

$$\psi_{1,2} = \begin{pmatrix} a_{1,2} \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathcal{H}\psi_{1,2} = E\psi_{1,2} \,; \quad E_1^\circ a_{1,2} + \lambda\Delta = E_{1,2} a_{1,2}$$

$$\psi_{1,2} = \begin{pmatrix} \lambda\Delta/(E_{1,2} - E_1^\circ) \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{prb. 1.11.}$$

(b) $$\mathcal{H} = \underbrace{\begin{pmatrix} E_1^\circ & 0 \\ 0 & E_2^\circ \end{pmatrix}}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\lambda\Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{V}$$

$V_{11} = V_{22} = 0$

$V_{12} = V_{21} = 1$

1\. mert. hatlu sıfır

2\. mert.

$$\Delta_1^{(2)} = \frac{|V_{12}|^2}{E_1^\circ - E_2^\circ} = \frac{\lambda^2\Delta^2}{E_1^\circ - E_2^\circ} \qquad \lambda|\Delta| \ll |E_1^\circ - E_2^\circ|$$

$$\Delta_2^{(2)} = \frac{|V_{21}|^2}{E_2^\circ - E_1^\circ} = \frac{\lambda^2\Delta^2}{E_2^\circ - E_1^\circ} \qquad \Downarrow \quad E_{1,2} \simeq \begin{cases} E_1^\circ + \lambda^2\Delta^2/(E_1^\circ - E_2^\circ) \\ E_2^\circ - \lambda^2\Delta^2/(E_1^\circ - E_2^\circ) \end{cases}$$

BS K

5.18.) $\dfrac{e^2\vec{A}^2}{2mc^2} = \dfrac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2) \qquad \vec{A} \equiv \left(-\dfrac{By}{2}, \dfrac{Bx}{2}, 0\right)$

$\langle x^2+y^2\rangle = \dfrac{2}{3}\langle r^2\rangle \Leftarrow \langle x^2\rangle = \langle y^2\rangle = \langle z^2\rangle$

$\langle r^2\rangle = \langle x^2+y^2+z^2\rangle$

$\ni \; 4\cancel{\pi}\dfrac{1}{\cancel{\pi}a_0^3}\displaystyle\int_0^\infty e^{-2r/a_0} r^4\,dr = \dfrac{4}{a_0^3}\left(\dfrac{a_0}{2}\right)^5 4!$

$\circ\; \Delta = \dfrac{e^2B^2a_0^2}{mc^2}\dfrac{2}{3}\langle x^2+y^2\rangle$

5.20.) $\langle x|\tilde{0}\rangle = e^{-\beta|x|}$

$$\bar{H} = \frac{\left(-\hbar^2/2m\right)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\beta|x|}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\beta|x|}dx + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta|x|}(m\omega^2x^2/2)\,dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta|x|}dx}$$

$\circ$

$$= \frac{1}{2\int_0^\infty e^{-2\beta x}dx}\left\{-\frac{2\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \beta^2 e^{-2\beta x}dx - \frac{\hbar^2}{2m}(-2\beta) + 2\frac{m\omega^2}{2}\int_0^\infty dx\,x^2 e^{-2\beta x}\right\}$$

$= \dfrac{\hbar^2\beta^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{4\beta^2} \ni \partial\bar{H}/\partial\beta = 0 \quad \beta^2 = m\omega/\sqrt{2}\hbar$

$\bar{H}_{min} = \dfrac{\hbar\omega\sqrt{2}}{2} \sim \underline{\sqrt{2}\,h\omega/1.}$

BS K

J.21.) $\psi'' + (\lambda - |x|)\psi = 0$

$-\psi'' + |x|\psi = \lambda\psi \quad H\psi = \lambda\psi$ gibi $\quad \hbar^2/2m = 1$

$$\psi' = \begin{cases} -1 & 0 < x < \alpha \\ +1 & 0 > x > -\alpha \end{cases} \qquad c = 1$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2}\,dx = \psi'\Big|_{\epsilon} - \psi'\Big|_{-\epsilon}$$

$$\psi'' = -2\delta(x) \Rightarrow \langle\psi|H|\psi\rangle = 2\psi(0) + 2\int_0^{\alpha} x(\alpha - x)^2\,dx$$

$$= 2\alpha + \frac{\alpha^4}{12}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 2\int_0^{\alpha} (\alpha - x)^2\,dx = \frac{2}{3}\alpha^3$$

$$\lambda \leq \frac{\langle H\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{2\alpha + \frac{\alpha^4}{12}}{\frac{2}{3}\alpha^3} \qquad \frac{d\lambda}{d\alpha} = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = 24^{1/3}$$

$\Rightarrow \lambda \leq 1.081$

BS K

5.22.) $C_0(t)=1$ $\qquad \omega_{10}=(E_1-E_0)/\hbar \equiv \omega_0$

$$C_1(t) = -\frac{i}{\hbar}\frac{F_0}{2}\int_0^t \langle 1|x|0\rangle e^{i\omega_{10}t'}\left(e^{i\omega t'}+e^{-i\omega t'}\right)dt'$$

$$= -\frac{F_0}{2\hbar}\langle 1|x|0\rangle\left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\omega_0+\omega}+\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega}\right]$$

$$\langle x\rangle_S = \left[\langle 0|e^{i\omega_0 t/2}+C_1^*\langle 1|e^{3i\omega_0 t/2}\right]x\left[|0\rangle e^{-i\omega_0 t/2}+C_1 e^{-3i\omega_0 t/2}|1\rangle\right]$$

$$= -\frac{F_0}{2\hbar}|\langle 1|x|0\rangle|^2\left\{\frac{e^{-i(\omega_0+\omega)t}e^{i\omega_0 t}-e^{i\omega_0 t}}{\omega_0+\omega}+\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}e^{-i\omega_0 t}-e^{-i\omega_0 t}}{\omega_0-\omega}\right\}$$

+ Comp. conjugate.

$$\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$$

$$= \frac{-F_0}{m}\left(\frac{\cos\omega t-\cos\omega_0 t}{\omega_0^2-\omega^2}\right)$$

BS K

5.24.) $C_n^{(0)}(t) = \delta_{n0}$

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar}\int_0^t e^{-i(E_0-E_n)t'/\hbar} \underbrace{\langle n|H'(x,t')|0\rangle}_{A e^{-t/\tau}\,\underbrace{\langle n|x^2|0\rangle}_{\frac{\hbar}{2m\omega}(\delta_{n0}+\sqrt{2}\,\delta_{n2})}} dt'$$

$$= 0 \begin{cases} n \neq 0 \\ n \neq 2 \end{cases}$$

$C_0^{(0)}(t) = 1$

$C_2^{(0)}(t) = 0 \qquad C_0^{(1)} = \dfrac{iA}{2m\omega}\left(e^{-t/\tau} - 1\right)$

$$C_2^{(1)} = \frac{-i\sqrt{2}A}{2m\omega}\left(1/\tau - 2i\omega\right)$$

$$|\psi\rangle = \left(1 - i\frac{A\tau}{2m\omega}\right)e^{-i\omega t/2}|0\rangle - \frac{i\sqrt{2}A}{2m\omega(1/\tau - 2i\omega)} e^{-5i\omega t/2}|2\rangle$$

$$P_2 = \frac{|A|^2}{2m^2\omega^2(1/\tau^2+4\omega^2)} \Big/ \left\{1 + \frac{|A|^2\tau^2}{4m^2\omega^2} + \frac{1}{2}\frac{|A|^2}{m^2\omega^2(1/\tau^2+4\omega^2)}\right\}$$

BS K