



Catatan Mekanika Kuantum 2
Teori Perturbasi Bergantung Waktu
Acuan Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 15

Perturbasi merupakan gangguan kecil, sehingga tidak merubah sistem secara mendasar, melainkan membuat beberapa sifat detil sistem menjadi berubah atau memunculkan beberapa sifat detil sistem yang sebelumnya tidak tampak atau membuat sistem bertransisi dari satu *eigenstate* ke *eigenstate* lain. Apabila gangguan bersifat stasioner (tak bergantung pada waktu secara eksplisit), perhitungan yang dilakukan menggunakan teori perturbasi tak bergantung waktu (Gasiorowicz Bab 11). Jika usikan bergantung pada waktu secara eksplisit, perhitungan menggunakan teori perturbasi bergantung waktu (Gasiorowicz Bab 15, isi catatan ini).

A. Formulasi umum

Ambil suatu sistem, yang mula-mula (sebelum diusik) digambarkan oleh persamaan Schrödinger berikut:

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle . \quad (1)$$

Persamaan (1) adalah persamaan Schrödinger tak bergantung waktu, yang menunjukkan sistem berada pada keadaan stasioner. Kebergantungan keadaan sistem pada waktu dapat dinyatakan dengan mudah, yaitu:

$$|\phi_n(t)\rangle = |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} . \quad (2)$$

Keadaan sembarang sistem $|\phi\rangle$ dan $|\phi(t)\rangle$ dinyatakan sebagai kombinasi linier $|\phi_n\rangle$:

$$|\phi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle \quad \text{dan} \quad |\phi(t)\rangle = \sum_n a_n |\phi_n(t)\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} . \quad (3)$$

Pada sistem diberikan usikan kecil yang bergantung secara eksplisit pada waktu $\lambda V(t)$, sehingga hamiltonian sistem menjadi $H(t) = H_0 + \lambda V(t)$. Evaluasi usikan dikerjakan sebagai suatu ekspansi dalam λ .

- Potensial / hamiltonian usikan $\lambda V(t)$ bergantung secara eksplisit pada waktu, sehingga keadaan sistem berubah menjadi tidak lagi stasioner, yaitu menjadi keadaan $|\psi(t)\rangle$. Untuk mengevaluasi keadaan sistem dipakai persamaan Schrödinger bergantung waktu:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle = (H_0 + \lambda V(t)) |\psi(t)\rangle . \quad (4)$$

- Anggaplah mula-mula sebelum diusik keadaan sistem adalah $|\psi(0)\rangle = |\phi_k\rangle$. Setelah diberi usikan kecil $\lambda V(t)$, keadaan sistem berubah menjadi:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_{nk}(t) |\phi_n(t)\rangle = \sum_n c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}, \quad (5)$$

dengan $c_{nk}(0) = \delta_{nk}$. Pada proses tertentu, seperti hamburan, keadaan awal ditentukan berada pada waktu lampau yang jauh $t \rightarrow -\infty$. Pada kasus tersebut berlaku $\lim_{t \rightarrow -\infty} c_{nk}(t) = \delta_{nk}$.

- Masukkan Eq. (5) ke Eq. (4), diperoleh:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} &= (H_0 + \lambda V(t)) \sum_n c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \\ &\rightarrow i\hbar \sum_n \left[\frac{d}{dt} c_{nk}(t) \right] |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} + \sum_n E_n^{(0)} c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \\ &= \sum_n (E_n^{(0)} + \lambda V(t)) c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \\ &\rightarrow i\hbar \sum_n \left[\frac{d}{dt} c_{nk}(t) \right] |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} = \sum_n \lambda V(t) c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}. \end{aligned} \quad (6)$$

- Proyeksikan Eq. (6) pada $|\phi_m\rangle$, diperoleh:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | i\hbar \sum_n \left[\frac{d}{dt} c_{nk}(t) \right] |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} &= \langle \phi_m | \sum_n \lambda V(t) c_{nk}(t) |\phi_n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \\ &\rightarrow i\hbar \sum_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \frac{d}{dt} c_{nk}(t) = \lambda \sum_n c_{nk}(t) e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \\ &\rightarrow i\hbar e^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} \frac{d}{dt} c_{mk}(t) = \lambda \sum_n c_{nk}(t) e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \\ &\rightarrow \frac{d}{dt} c_{mk}(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n c_{nk}(t) e^{i(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \end{aligned} \quad (7)$$

Persamaan (7) membentuk satu set persamaan yang harus diselesaikan secara bersamaan (simultan) untuk mendapatkan semua nilai $c_{mk}(t)$.

- Dari Eq. (5) kita pahami bahwa $c_{mk}(t)$ adalah proyeksi $|\psi(t)\rangle$ pada $|\phi_m(t)\rangle$:

$$c_{mk}(t) = \langle \phi_m(t) | \psi(t) \rangle. \quad (8)$$

Kuadrat dari $c_{mk}(t)$, sebut saja $P_{mk}(t) = |c_{mk}(t)|^2$, menyatakan peluang pada waktu t keadaan sistem bertransisi dari keadaan awal $|\phi_k\rangle$ ke keadaan $|\phi_m\rangle$ akibat usikan $\lambda V(t)$. Untuk menghitung $c_{mk}(t)$ kita harus menyelesaikan satu set Eq. (7), yang tentu saja tidak mudah. Namun, mengingat usikan $\lambda V(t)$ tidak besar, maka $c_{mk}(t)$ dapat dihitung dengan suatu pendekatan. Sebagai pendekatan paling sederhana, yaitu perturbasi orde 1, kita nyatakan di Eq. (7) $c_{nk}(t) = \delta_{nk}$. Ini ekuivalen dengan menganggap $|\psi(t)\rangle = |\phi_k(t)\rangle$ atau

nilai $c_{nk}(t)$, ($n \neq k$) sangat kecil, sehingga dapat diabaikan. Dengan demikian, untuk perturbasi orde 1 Eq. (7) menjadi:

$$\frac{d}{dt}c_{mk}(t) = \frac{\lambda}{i\hbar}e^{i(E_m^{(0)}-E_k^{(0)})t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_k \rangle, \quad (9)$$

sehingga $c_{mk}(t)$ dapat dihitung sebagai sebuah integral (Gasiorowicz Eq. (15-10)):

$$c_{mk}(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk}t'} \langle \phi_m | V(t') | \phi_k \rangle, \quad (10)$$

dengan $\omega_{mk} = (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})/\hbar$. Pada perturbasi orde 1 keadaan $|\psi(t)\rangle$ menjadi:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= |\phi_k(t)\rangle + \sum_{n \neq k} c_{nk}(t) |\phi_n(t)\rangle \\ &= |\phi_k(t)\rangle + \sum_{n \neq k} \left(\frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nk}t'} \langle \phi_n | V(t') | \phi_k \rangle \right) |\phi_n(t)\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

- Jika perturbasi orde 1 tidak memberikan hasil yang memadai, perhitungan dilakukan sampai orde berikutnya, yaitu orde 2. Pada perturbasi orde 2, $c_{nk}(t)$ yang diperoleh pada perturbasi orde 1 sesuai Eq. (10) dimasukkan ke Eq. (7):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}c_{mk}(t) &= \frac{\lambda}{i\hbar}e^{i\omega_{mk}t} \langle \phi_m | V(t) | \phi_k \rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_{n \neq k} c_{nk}(t) e^{i\omega_{mn}t} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar}e^{i\omega_{mk}t} \langle \phi_m | V(t) | \phi_k \rangle \\ &\quad + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_{n \neq k} e^{i\omega_{mn}t} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nk}t'} \langle \phi_n | V(t') | \phi_k \rangle, \end{aligned} \quad (12)$$

sehingga diperoleh:

$$\begin{aligned} c_{mk}(t) &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk}t'} \langle \phi_m | V(t') | \phi_k \rangle \\ &\quad + \left(\frac{\lambda}{i\hbar} \right)^2 \sum_{n \neq k} \int_0^t dt'' e^{i\omega_{mn}t''} \langle \phi_m | V(t'') | \phi_n \rangle \int_0^{t''} dt' e^{i\omega_{nk}t'} \langle \phi_n | V(t') | \phi_k \rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Perhitungan perturbasi bergantung waktu, dengan demikian, merupakan suatu iterasi.

- Jika didefinisikan $c_{mk}^{(1)}(t)$ dan $c_{mk}^{(2)}(t)$ sebagai berikut:

$$c_{mk}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk}t'} \langle \phi_m | V(t') | \phi_k \rangle \quad (14)$$

$$c_{mk}^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \sum_{n \neq k} \int_0^t dt'' e^{i\omega_{mn}t''} \langle \phi_m | V(t'') | \phi_n \rangle \int_0^{t''} dt' e^{i\omega_{nk}t'} \langle \phi_n | V(t') | \phi_k \rangle, \quad (15)$$

maka $c_{mk}(t)$ di Eq. (13) dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$c_{mk}(t) = \lambda c_{mk}^{(1)}(t) + \lambda^2 c_{mk}^{(2)}(t). \quad (16)$$

Secara umum, $c_{mk}(t)$ merupakan sebuah deret pangkat dalam λ :

$$c_{mk}(t) = \lambda c_{mk}^{(1)}(t) + \lambda^2 c_{mk}^{(2)}(t) + \dots, \quad (17)$$

dengan $c_{mk}^{(r)}(t)$ dinyatakan sebagai berikut:

$$c_{mk}^{(r)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^r \sum_{n \neq k} \int_0^t dt''' e^{i\omega_{mn}t'''} \langle \phi_m | V(t''') | \phi_n \rangle \dots \int_0^{t''} dt' e^{i\omega_{lk}t'} \langle \phi_l | V(t') | \phi_k \rangle. \quad (18)$$

Contoh untuk $c_{mk}^{(3)}(t)$:

$$c_{mk}^{(3)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \sum_{n \neq k} \int_0^t dt''' e^{i\omega_{mn}t'''} \langle \phi_m | V(t''') | \phi_n \rangle \sum_{l \neq k} \int_0^{t'''} dt'' e^{i\omega_{nl}t''} \langle \phi_n | V(t'') | \phi_l \rangle \\ \times \int_0^{t''} dt' e^{i\omega_{lk}t'} \langle \phi_l | V(t') | \phi_k \rangle. \quad (19)$$

Dalam pembahasan berikutnya kita batasi hanya sampai perturbasi orde 1.

- Transisi dari keadaan awal $|\phi_k\rangle$ ke keadaan $|\phi_m\rangle$ menunjukkan adanya perubahan energi. Ingat kembali bahwa perubahan nilai suatu besaran fisika A dinyatakan sebagai (Gasiorowicz Sect. 5-5, Eq. (5-49)):

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \langle [H, \hat{A}] \rangle_t. \quad (20)$$

Untuk besaran fisika energi, operatornya adalah H . Jika H tidak bergantung pada waktu secara eksplisit, nilai energi tetap:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_t = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \langle [H, H] \rangle_t = 0. \quad (21)$$

Dalam topik kali ini, H bergantung pada waktu secara eksplisit melalui $V(t)$. Dengan demikian, nilai energi tidak tetap:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_t = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \langle [H, H] \rangle_t = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle_t = \lambda \left\langle \frac{\partial V(t)}{\partial t} \right\rangle_t. \quad (22)$$

B. Kasus potensial usikan periodik

Ambillah potensial usikan $\lambda V(t)$, yang berubah secara eksplisit dan periodik terhadap waktu. Contoh potensial seperti ini adalah gelombang elektromagnetik atau foton dengan frekuensi tertentu ω . Bentuk umum $\lambda V(t)$ adalah:

$$V(t) = M e^{\mp i\omega t}, \quad (23)$$

dengan M adalah suatu operator, yang tidak bergantung secara eksplisit terhadap waktu.

- Masukkan potensial usikan Eq. (23) ke Eq. (10), diperoleh:

$$\begin{aligned}
c_{mk}(t) &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk}t'} \langle \phi_m | M e^{\mp i\omega t'} | \phi_k \rangle \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk}t'} e^{\mp i\omega t'} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t'} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle .
\end{aligned} \tag{24}$$

Sampai di sini kita bandingkan Eq. (24) dan Eq. (10). Perhatikan faktor $\omega_{mk} \mp \omega$ di Eq. (24):

$$\omega_{mk} \mp \omega = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} \mp \omega = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \mp \hbar\omega}{\hbar} = \frac{E_m^{(0)} - (E_k^{(0)} \pm \hbar\omega)}{\hbar} . \tag{25}$$

Dengan demikian, kita dapat bayangkan, sebagai contoh, bahwa proses dengan potensial seperti di Eq. (23) merupakan transisi dari keadaan awal dengan energi $E_k^{(0)} \pm \hbar\omega$ ke keadaan dengan energi $E_m^{(0)}$. Dengan kata lain, transisi dari keadaan awal $|\phi_k\rangle$ ke keadaan $|\phi_m\rangle$ yang disertai absorpsi / emisi foton atau partikel dengan energi $\hbar\omega$:

$$\text{proses} : \begin{cases} \text{absorpsi} & : \omega_{mk} - \omega , \quad V(t) = M e^{-i\omega t} \\ \text{emisi} & : \omega_{mk} + \omega , \quad V(t) = M e^{i\omega t} \end{cases} . \tag{26}$$

Kita lanjutkan Eq. (24):

$$\begin{aligned}
c_{mk}(t) &= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t'} \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle \frac{1}{i(\omega_{mk} \mp \omega)} e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t'} \Big|_0^t \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle \frac{1}{i(\omega_{mk} \mp \omega)} \{ e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t} - 1 \} \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle \frac{e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t/2}}{i(\omega_{mk} \mp \omega)} \{ e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t/2} - e^{-i(\omega_{mk} \mp \omega)t/2} \} \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle \frac{e^{i(\omega_{mk} \mp \omega)t/2}}{(\omega_{mk} \mp \omega)} 2 \sin(\omega_{mk} \mp \omega)t/2 \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \langle \phi_m | M | \phi_k \rangle e^{i\frac{1}{2}(\omega_{mk} \mp \omega)t} \frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{mk} \mp \omega)t}{\frac{1}{2}(\omega_{mk} \mp \omega)} .
\end{aligned} \tag{27}$$

- Peluang transisi dari keadaan awal $|\phi_k\rangle$ ke keadaan $|\phi_m\rangle$ adalah:

$$P_{mk}(t) = |c_{mk}(t)|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle \phi_m | M | \phi_k \rangle|^2 \left(\frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{mk} \mp \omega)t}{\frac{1}{2}(\omega_{mk} \mp \omega)} \right)^2 . \tag{28}$$

- Selanjutnya, kita amati khusus proses absorpsi dan emisi partikel (termasuk foton). Setelah suatu sistem mengabsorpsi / mengemisi partikel, keadaan akhirnya tetap untuk waktu yang panjang. Contoh, sebuah inti X_Z^A ditumbuk sebuah neutron dan menangkap neutron itu (proses *neutron capture*), sehingga berubah menjadi inti Y_Z^{A+1} dan tetap menjadi inti

Y_Z^{A+1} dalam waktu yang lama. Contoh lain, sebuah atom hidrogen berada pada keadaan $n = 2$, kemudian meluruh ke keadaan $n = 1$ disertai dengan emisi foton dan seterusnya tetap berada pada keadaan $n = 1$. Jadi, kita harus bayangkan proses absorpsi dan emisi ini sebagai proses yang keadaan awal dan keadaan akhirnya terpisahkan oleh jarak waktu yang panjang: keadaan awal pada $t = 0$ dan keadaan akhir pada $t \rightarrow \infty$, keadaan awal pada $t \rightarrow -\infty$ dan keadaan akhir pada $t = 0$, keadaan awal pada $t \rightarrow -\infty$ dan keadaan akhir pada $t \rightarrow \infty$.

Kita lihat fungsi $G_t(\Delta)$ berikut, yang diambil dari Eq. (28):

$$G_t(\Delta) = \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta}{2} t = \left(\frac{\sin \frac{1}{2} (\omega_{mk} \mp \omega) t}{\frac{1}{2} (\omega_{mk} \mp \omega)} \right)^2, \quad (\Delta = \omega_{mk} \mp \omega). \quad (29)$$

Variabel t pada $G_t(\Delta)$ menjadi parameter dan kita akan lihat $G_t(\Delta)$ untuk $t \rightarrow \infty$. Fungsi $G_t(\Delta)$ berosilasi terhadap Δ . Untuk sembarang nilai t , $G_t(\Delta)$ bernilai maksimum pada $\Delta = 0$ (lihat Gasiorowicz Fig. 15-1 atau bandingkan $G_t(\Delta)$ dengan $j_0^2(\Delta)$). Jika $t \rightarrow 0$, $G_t(\Delta)$ berosilasi sangat lambat, sehingga relatif konstan \rightarrow kurva $G_t(\Delta)$ membentuk puncak yang sangat lebar di sekitar $\Delta = 0$. Sebaliknya, jika $t \rightarrow \infty$, $G_t(\Delta)$ berosilasi sangat cepat \rightarrow kurva $G_t(\Delta)$ membentuk puncak yang sangat sempit di sekitar $\Delta = 0$. Sifat $G_t(\Delta)$ pada $t \rightarrow \infty$ yang seperti ini mengingatkan kita pada fungsi delta Dirac. Dapatkah $G_t(\Delta)$ dinyatakan dalam fungsi delta Dirac?

Ambillah sembarang fungsi $f(\Delta)$, yang *smooth* (tak banyak berubah) terhadap Δ , lalu evaluasi integral berikut untuk $t \rightarrow \infty$ ($G_t(\Delta)$ berupa puncak sempit di sekitar $\Delta = 0$):

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta f(\Delta) G_t(\Delta) &\approx f(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta G_t(\Delta), \\ &\approx f(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta}{2} t \\ &\approx 2t f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{y^2} \sin^2 y, \quad \left(y = \frac{\Delta}{2} t \right) \\ &\approx 2t f(0) \left(-\frac{1}{y} \sin^2 y \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{y} 2 \sin y \cos y \right) \\ &\approx 2t f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{y} \sin 2y \\ &\approx 2t f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x} \sin x, \quad (x = 2y) \\ &\approx 2t f(0) \pi, \quad (\text{lihat, contoh, Boas hlm. 690 - 692}) \\ &\approx 2\pi t \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta f(\Delta) \delta(\Delta). \end{aligned} \quad (30)$$

Dengan demikian, $G_t(\Delta)$ pada $t \rightarrow \infty$ dapat dinyatakan dalam fungsi delta Dirac:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} G_t(\Delta) &\simeq 2\pi t \delta(\Delta) \\ &\simeq 2\pi t \delta(\omega_{mk} \mp \omega) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\simeq 2\pi t \delta \left(\frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \mp \hbar\omega}{\hbar} \right) \\
&\simeq 2\pi \hbar t \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \mp \hbar\omega \right).
\end{aligned} \tag{31}$$

Peluang absorpsi / emisi menjadi:

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow \infty} P_{mk}(t) &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle \phi_m | M | \phi_k \rangle|^2 \lim_{t \rightarrow \infty} G_t(\Delta) \\
&= \frac{2\pi t}{\hbar} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \mp \hbar\omega \right)
\end{aligned} \tag{32}$$

dan laju peluang absorpsi / emisi (*absorption / emission probability rate*) diperoleh sebagai:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dP_{mk}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \mp \hbar\omega \right). \tag{33}$$

Fungsi delta Dirac pada Eq. (33) menjamin bahwa proses transisi (absorpsi / emisi) tidak melanggar hukum kekekalan energi.

C. Phase space

Kita bahas khusus proses emisi partikel. Anggap suatu sistem mengemisi sebuah partikel bermassa m atau foton dengan energi E . Laju peluang emisi (*emission probability rate*) dinyatakan sebagai:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E \right). \tag{34}$$

- Partikel yang diemisikan bergerak bebas dengan momentum linier \mathbf{p} . Keadaan bebas lebih mudah dibahas dengan membayangkan keadaan bebas dalam kotak berukuran $L \times L \times L$, namun $L \rightarrow \infty$. Dalam ruang posisi \mathbf{r} , keadaan bebas dengan momentum \mathbf{p} dinyatakan sebagai:¹

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar}. \tag{39}$$

¹Ambillah kotak satu dimensi $0 < x < L$. Keadaan bebas stasioner di dalam kotak itu dinyatakan sebagai:

$$\psi(x) = N e^{ip_x x/\hbar} = N e^{ip_x(x+L)/\hbar} \rightarrow p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \quad n = \text{integer} \rightarrow \psi(x) = N e^{2\pi i n x/L}. \tag{35}$$

Relasi ortonormal $\psi(x)$ adalah:

$$|N|^2 \int_0^L dx e^{-i(p'_x - p_x)x/\hbar} = \delta(p'_x - p_x) = |N|^2 \int_0^L dx e^{-2\pi i(n' - n)x/L} = \delta_{n'n} \rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{L}}, \tag{36}$$

Untuk sembarang waktu, keadaan $\psi(x, t)$ adalah:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(p_x x - Et)/\hbar}. \tag{37}$$

Untuk kotak tiga dimensi berukuran $L \times L \times L$ keadaan $\psi(\mathbf{r}, t)$ adalah:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar}, \tag{38}$$

Komponen-komponen momentum p_x, p_y, p_z mengikuti:

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_1, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_2, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L}n_3, \quad (40)$$

dengan $n_1, n_2, n_3 = \text{integer}$ dan menentukan secara unik keadaan bebas $\psi(\mathbf{r}, t)$. Energi E dinyatakan dalam n_1, n_2, n_3 sebagai berikut:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{2\pi\hbar}{L} \right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (41)$$

- Menurut Eq. (41), nilai energi E tidak menunjukkan keadaan bebas secara unik, ada *degeneracy*. Laju peluang emisi di Eq. (34), dengan demikian, juga tidak secara unik menyatakan transisi ke keadaan akhir tertentu (laju peluang emisi tersebut unik berkaitan dengan keadaan $|\phi_k\rangle$ dan $|\phi_m\rangle$, namun tidak unik berkaitan dengan keadaan bebas dengan energi E). Laju peluang emisi yang unik adalah yang untuk keadaan dengan nilai n_1, n_2, n_3 tertentu, yaitu dari n_1, n_2, n_3 sampai $n_1 + dn_1, n_2 + dn_2, n_3 + dn_3$:²

$$\Gamma_{k \rightarrow m} dn_1 dn_2 dn_3 = \Gamma_{k \rightarrow m} d^3n. \quad (42)$$

Dari Eq. (40) diperoleh:

$$d^3n = dn_1 dn_2 dn_3 = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 dp_x dp_y dp_z = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}, \quad (43)$$

sehingga:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} d^3n = \Gamma_{k \rightarrow m} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}. \quad (44)$$

Untuk mendapatkan nilai total laju peluang emisi untuk semua keadaan bebas akhir yang mungkin, Eq. (44) diintegrasikan untuk seluruh ruang fase (*phase space*):³

$$\begin{aligned} \Gamma_{mk} &= \int d^3n \Gamma_{k \rightarrow m} \\ &= \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p} \Gamma_{k \rightarrow m} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E). \end{aligned} \quad (45)$$

Kita lihat Γ_{mk} di Eq. (45) terdiri dari faktor elemen matriks transisi $|\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2$ dan faktor-faktor lain. Faktor-faktor lain tersebut secara bersama dikenal dengan faktor

² n_1, n_2, n_3 adalah integer, sehingga perubahan terkecilnya, contoh $\Delta n_1 = 1$. Namun, rentang nilai n_1, n_2, n_3 sangat lebar (∞). Dengan kata lain, n_1, n_2, n_3 membentuk suatu ruang (ruang fase / *phase space*) tiga dimensi yang sangat luas dan berisi sangat banyak titik, yang tiap titik dinyatakan secara unik oleh n_1, n_2, n_3 dan merepresentasikan satu keadaan. Dengan demikian, untuk n_1, n_2, n_3 dapat diterapkan perubahan infinitesimal $\Delta n_1 \rightarrow dn_1, \Delta n_2 \rightarrow dn_2, \Delta n_3 \rightarrow dn_3$.

³Ruang fase (*phase space*) adalah ruang tempat semua keadaan yang mungkin bagi suatu sistem. Tiap titik di ruang itu merepresentasikan keadaan sistem tersebut. Dalam bahasan ini, *phase space* adalah ruang \mathbf{n} yang berisi semua titik n_1, n_2, n_3 .

ruang fase (*phase space factor*). Dengan kata lain, Eq. (45) tanpa faktor elemen matriks menyatakan faktor ruang fase untuk proses emisi tersebut:

$$\text{faktor ruang fase} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p} \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E \right). \quad (46)$$

- Kita evaluasi Γ_{mk} di Eq. (45).

$$d\mathbf{p} = dp p^2 d\hat{\mathbf{p}} = dp p^2 d\Omega_p \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \text{foton} & : E = pc, \quad dE = c dp, \quad p^2 dp = \frac{E^2}{c^3} dE \\ \text{partikel} & : E = \frac{p^2}{2m}, \quad dE = \frac{p}{m} dp = \sqrt{\frac{2E}{m}} dp, \quad p^2 dp = m\sqrt{2mE} dE \end{aligned} \quad (48)$$

Faktor $p^2 dp/dE$ dalam faktor ruang fase diperoleh sebagai berikut (Gasiorowicz Eqs. (15-26) & (15-27)):

$$\frac{p^2 dp}{dE} = \begin{cases} c^{-3} E^2 & (\text{foton}) \\ m\sqrt{2mE} & (\text{partikel}) \end{cases}. \quad (49)$$

Kita dapatkan Γ_{mk} :

$$\begin{aligned} \Gamma_{mk} &= \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\hat{\mathbf{p}} \frac{p^2 dp}{dE} dE |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E \right) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\hat{\mathbf{p}} dE \left\{ \begin{array}{l} c^{-3} E^2 \\ m\sqrt{2mE} \end{array} \right\} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E \right) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\hat{\mathbf{p}} \left\{ \begin{array}{l} c^{-3} E^2 \\ m\sqrt{2mE} \end{array} \right\} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \Big|_{E=E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \quad (50)$$

Laju peluang emisi untuk arah tertentu per sudut ruang diperoleh sebagai:

$$\frac{d\Gamma_{mk}}{d\hat{\mathbf{p}}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ \begin{array}{l} c^{-3} E^2 \\ m\sqrt{2mE} \end{array} \right\} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \Big|_{E=E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (51)$$

- Jumlah keadaan dalam rentang energi E sampai $E + dE$ menentukan rapat keadaan (*density of states*) $\rho(E)$:

$$\rho(E) = \frac{d^3 n}{dE} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{p}}{dE} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\hat{\mathbf{p}} \frac{p^2 dp}{dE} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\hat{\mathbf{p}} \left\{ \begin{array}{l} c^{-3} E^2 & (\text{foton}) \\ m\sqrt{2mE} & (\text{partikel}) \end{array} \right\} \quad (52)$$

Laju peluang emisi di Eq. (45) dapat dinyatakan dalam *density of states* sebagai berikut:

$$\Gamma_{mk} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE \rho(E) |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + E \right). \quad (53)$$

Integral pada Eq. (53) mudah dikerjakan, diperoleh:

$$\Gamma_{mk} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2, \quad (54)$$

dengan $E = E_k^{(0)} - E_m^{(0)}$.

- Jika pada keadaan akhir terdapat beberapa partikel bebas, Eq. (45) atau secara umum laju peluang transisi dari keadaan awal (i , *initial*) ke keadaan akhir (f , *final*) diperoleh sebagai:

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \prod_k \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}_k \right) |\langle \phi_f | \lambda M | \phi_i \rangle|^2 \delta \left(E_f^{(0)} + \sum_k E_k - E_i^{(0)} \right) \delta \left(\mathbf{p}_f + \sum_k \mathbf{p}_k - \mathbf{p}_i \right). \quad (55)$$

Fungsi delta Dirac untuk momentum menjamin dipenuhinya hukum kekekalan momentum linier. Dengan demikian, tidak semua momentum \mathbf{p}_k bersifat bebas (*independent*). Contoh, jika pada keadaan akhir terdapat 3 partikel, maka salah satu momentum ditentukan oleh 2 momentum yang lain. Jika integral terhadap salah satu \mathbf{p}_k dikerjakan, Eq. (55) menjadi:

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \prod_{k \text{ bebas}} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}_k \right) |\langle \phi_f | \lambda M | \phi_i \rangle|^2 \delta \left(E_f^{(0)} + \sum_k E_k - E_i^{(0)} \right). \quad (56)$$

- Laju peluang transisi dari keadaan awal ke keadaan akhir untuk waktu yang sangat panjang adalah Γ_{fi} di Eq. (55). Peluang transisi dari keadaan awal ke keadaan akhir untuk waktu yang sangat panjang, dengan demikian, adalah (perhatikan hubungan Eqs. (32) dan (33)):

$$P_{fi}(t) = t\Gamma_{fi}. \quad (57)$$

Nilai total peluang adalah 1. Dengan demikian, peluang keadaan awal tetap adalah:

$$P_i(t) = 1 - \sum_{f \neq i} P_{fi}(t) = 1 - t \sum_{f \neq i} \Gamma_{fi}, \quad (58)$$

dengan f menyatakan semua keadaan akhir yang mungkin, yang diijinkan oleh hukum-hukum fisika dan juga aturan seleksi. Persamaan (58) tampak bermasalah, karena dapat bernilai tak berhingga. Namun, sesungguhnya Eq. (58) hanyalah dua suku pertama dari fungsi eksponensial. Jadi:

$$P_i(t) = 1 - t \sum_{f \neq i} \Gamma_{fi} + \dots \rightarrow P_i(t) = e^{-\Gamma t}, \quad \left(\Gamma = \sum_{f \neq i} \Gamma_{fi} \right). \quad (59)$$

Melihat Eq. (59), orang dapat definisikan “waktu hidup” τ untuk keadaan awal:

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}. \quad (60)$$

Mengingat ketidakpastian Heisenberg, waktu hidup τ menyatakan bahwa energi keadaan awal tidak bernilai pasti, melainkan mengandung ketidakpastian:

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau}. \quad (61)$$

Pada kenyataannya, garis-garis spektrum emisi foton yang diamati pada transisi atom memang menunjukkan ketidakpastian tersebut, yaitu garis-garis tersebut tidak tajam pada

suatu nilai frekuensi, sebut saja ω_0 . Intensitas foton yang diemisikan dapat dinyatakan dalam bentuk Lorentzian berikut:

$$I(\omega) = \frac{\Gamma/2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (62)$$

Lebar garius spektrum itu Γ , yang menunjukkan besarnya ketidakpastian energi. Jika $\eta = \Gamma/2$ dan $\Gamma \rightarrow 0$, yang berarti juga $\eta \rightarrow 0$, diperoleh:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{(\omega - \omega_0)^2 + \eta^2} = \pi \delta(\omega - \omega_0), \quad (63)$$

sesuai dengan salah satu definisi fungsi delta Dirac. Jadi, jika tidak ada ketidakpastian energi, $\Gamma \rightarrow 0$, garis spektrum transisi atom sangat tajam, sebagaimana direpresentasikan oleh fungsi delta Dirac $\delta(\omega - \omega_0)$.

D. Fermi's Golden Rule

Kita lihat kembali laju peluang absorpsi / transmisi di Eq. (33), yang dapat kita tulis sebagai berikut:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dP_{mk}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta(E_{akhir} - E_k^{(0)}), \quad (64)$$

dengan $E_{akhir} = E_m^{(0)} \mp \hbar\omega$. Kita sebut kini $\Gamma_{k \rightarrow m}$ sebagai laju peluang transisi sistem dari keadaan k ke keadaan akhir dan E_{akhir} adalah energi sistem pada keadaan akhir, setelah terjadi transisi (untuk kasus emisi, pada keadaan akhir sistem terdiri dari dua benda, salah satunya adalah partikel / foton yang diemisikan). Secara umum, dapat kita sertakan juga transisi akibat potensial yang tidak bergantung waktu, dengan mengambil potensial di Eq. (23), namun untuk $\omega = 0$.⁴ Dengan demikian,

$$E_{akhir} = \begin{cases} E_m^{(0)} \\ E_m^{(0)} - \hbar\omega \\ E_m^{(0)} + \hbar\omega \end{cases}. \quad (65)$$

Jika $\rho(E_{akhir})$ adalah *density of states* untuk keadaan akhir, maka jumlah keadaan akhir untuk rentang energi akhir E_{akhir} sampai $E_{akhir} + dE_{akhir}$ adalah $\rho(E_{akhir})dE_{akhir}$. Dengan demikian, laju peluang transisi untuk semua keadaan akhir yang mungkin (untuk kasus emisi, keadaan akhir sistem meliputi keadaan $|\phi_m\rangle$ dan keadaan partikel / foton yang diemisikan) adalah (serupa dengan Eq. (53)):

$$\Gamma_{mk} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE_{akhir} \rho(E_{akhir}) |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2 \delta(E_{akhir} - E_k^{(0)}) \quad (66)$$

dan diperoleh sebagai:

$$\Gamma_{mk} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_{akhir}) |\langle \phi_m | \lambda M | \phi_k \rangle|^2, \quad (67)$$

dengan $E_{akhir} = E_k^{(0)}$ dan E_{akhir} seperti yang diberikan di Eq. (65). Persamaan (67) dikenal sebagai *Fermi's Golden Rule*, yang menunjukkan laju peluang transisi akibat suatu usikan /

⁴Anggap pada $t < 0$ potensial belum ada (*off*) dan pada saat $t = 0$ potensial diberikan / ada (*on*) dan berlaku tetap seterusnya untuk $t > 0$.

interaksi dari keadaan awal tertentu ke semua keadaan akhir yang mungkin menurut hukum kekekalan energi, dengan waktu transisi yang sangat panjang ($t \rightarrow \infty$).