Ders 12

Metindeki ilgili bölümler §2.1

Hamilton işlemcisi ve Schrödinger denklemi

Şimdi, t'den $t+\epsilon$'a zaman gelişimini düşünün.

$$U(t+\epsilon, t) = I + \epsilon\left(-\frac{i}{\hbar}H(t)\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

elde ederiz. Her zamanki gibi, U'nun üniterliği $H(t)$'nin Hermitesel olduğuna işaret eder, yani bir gözlenebiliri – Hamilton işlemcisini – temsil eder.

Bununla birlikte, uzaysal momentum ve Hamilton işlemcisi arasında önemli bir fark vardır. Uzaysal momentum ilk ve son kez kendi geometrik doğası ile tanımlanır (Schrödinger resminde). Hamilton işlemcisi, sistemin, içerisindeki ve çevresiyle olan etkileşimlerinin detaylarına bağlıdır. Buna göre, birçok kullanışlı Hamilton işlemcisi olabilir, mesela 3-d'de hareket eden bir parçacık için, ancak herzaman aynı momentum işlemcisini kullanırız (Schrödinger resminde).

Hamilton işlemcisini farklı bir yoldan çıkaralım. Elimizde

$$U(t+\epsilon, t_0) = U(t+\epsilon, t)U(t, t_0)$$

var. Yukarıda $U(t+\epsilon, t)$ için elde ettiğimiz sonucumuzu bu ifadede yerine koyunca her iki tarafı ϵ'a bölüp ve $\epsilon \to 0$ limitini alarak, U'nun türevini tanımlamış olursunuz.

$$i\hbar\frac{dU(t, t_0)}{dt} = H(t)U(t, t_0)$$

elde ederiz (alıştırma).

Haydi, bunun mantığının arkasından dolaşalım. Bir kendine eşlenik $H(t)$ Hamilton işlemcisini verildiğinde, yukarıdaki diferansiyel denklemle $U(t, t_0)$'ı tanımlayabileceğimizi kabul edelim.* Diferansiyel denklemi çözerken kendine mahsus bir çözüm elde etmek için bir başlangıç şartı belirtilmelidir. Bize lazım olan başlangıç koşulu

$$U(t_0, t_0) = I.$$

Böylelikle, bir Hamilton işlemcisi verildiğinde, sistemin zaman içindeki gelişiminin belirlendiğini söyleyebiliriz. Dikkatimizi U'dan ziyade H üzerine odaklarsak fiziksel sistemleri tarif etme kabiliyetimizde ciddi bir avantaj sağlarız. Gerçekten de, bir sistemin dinamiğini Hamilton işlemcisini belirleyerek herzaman tanımlayabiliriz. Bir dinamik sistemin enerjisi için bir formül

*Hamilton işlemcisi zamana bağlı olmadığında bu kabul kesin olarak ispatlanabilir. Daha genel bir halde ek hipotezler kullanmak zorunda kalınacaktır. Fakat biz bu teknik detaylar için kaygılanmayacağız.

vermenin, sistemin dinamik davranışını açıkça göstermekten çok daha kolay olduğunu not edin. Doğrusu istenirse, zamanla gelişim işlemcisini nadiren açıkça hesaplayabileceğiz.[†]

Zaman gelişimi işlemcisi ve Hamilton işlemcisi arasında şimdi türettiğimiz bağıntı Schrödinger denkleminin soyut bir biçimidir. Bunu görmek için, bu işlemci bağıntısının her iki tarafını, sistemin t_0 anındaki başlangıç durumunu temsil eden, keyfi bir durum vektörüne uygulayın. Buradan

$$i\hbar \frac{dU(t,t_0)}{dt}|\psi, t_0\rangle = H(t)U(t,t_0)|\psi, t_0\rangle$$

elde ederiz. Bu

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

Schrödinger denkleminin soyut vektörler cinsinden geleneksel formudur. Herhalde, Hamilton işlemcisinin bir parçacık için kinetik+potansiyel halinde olduğu koordinat dalga fonksiyonu formuna daha aşinasınızdır :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{X}).$$

Daha sonra

$$H\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x}|\frac{P^2}{2m} + V(\vec{X})|\psi\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x})$$

elde ederiz. Bunu görmek için,

$$\langle \vec{x}|P_i|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}\psi(\vec{x}), \qquad \langle \vec{x}|(P_i)^2|\psi\rangle = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial {x^i}^2}\psi(\vec{x})$$

olduğunu ve

$$V(\vec{X}) = \int d^3x\, V(\vec{x})|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$$

tanımını kullanarak

$$\langle \vec{x}|V(\vec{X})|\psi\rangle = V(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

olduğunu doğrulamalısınız. Ayrıca,

$$\langle \vec{x}|i\hbar\frac{d}{dt}|\psi, t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t)$$

elde ederiz. Bundan dolayı, (bileşenleri konum bazında aldıktan sonra) Schrödinger denklemi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t)$$

olur.

[†] Bu, U yok demek değildir, elbette, ama daha ziyade sistemin dinamik evrilmesininin basit bir formülle tasvir edilemeyecek kadar karmaşık olduğu anlamına gelir.

Herhangi bir başlangıç durum vektörü verildiğinde Schrödinger denklemini, t anındaki durum vektörünü bulmak için çözmek, zamanla gelişim işlemcisini belirlemeye eşittir. Hamilton işlemcisinin zaman gelişiminin üreteci olduğu gerçeğini, Schrödinger denkleminin açık bir şekilde yakaladığını görüyorsunuz. Zaman evriminin aslında ne olduğunu görmek için, Schrödinger denkleminin çözümleri hakkında bilgi elde etmek gerekir. Fakat, buradaki kilit gözlem, çözümlerin sonuçta Hamilton işlemcisinin seçimine bağlı olarak belirleneceğidir. Bir fiziksel sistemin modelini yapmak için en önemli adım Hamilton işlemcisini belirlemektir.

Schrödinger denkleminin formal çözümleri

Zaman gelişimi işlemcisi için uzaysal öteleme işlemcisinin üstel formunu andıran formüller vermek mümkündür. Burada düşünülecek 3 hal vardır. İlk olarak, H'nın zamana bağlı olmadığını kabul edin. O zaman, matematiksel olarak konuşursak, uzaysal ötelemelerle özdeş bir zemindeyiz. Elimizde

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$$

var. Bu işlemcinin, başlangıç koşulunu içeren Schrödinger denkleminin işlemci formunu sağladığını kolayca kontrol edebilirsiniz.

İkincisi, $H = H(t)$ olduğunu ama herhangi t, t' zamanları için elimizde

$$[H(t), H(t')] = 0$$

olduğunu kabul edin. O zaman,

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')}$$

olduğunu kontrol etmek zor olmasa gerek.

Bu formülün daha önceki sonucu özel bir hal olarak içerdiğini not edin. Bu sonucu kontrol etmek için sadece, farklı $H(t)$ işlemcileri birbirleri ile sıradeğişmeli olduğundan bunlarla sanki sıradan fonksiyonlarmış gibi oynanabileceğini not edin.

Son olarak, $H = H(t)$ olduğunu ama farklı zamanlardaki işlemcilerin sıradeğişmeli olmadığını kabul edin. Bu hal biraz daha zor ve çok daha sonra buna girişimde bulunacağız. Bütünlük açısından, sadece, sonuçta elde edilecek işlemcinin "zaman sıralı üstel" cinsinden verildiğini söyleyeyim,

$$U(t, t_0) = \mathrm{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')}.$$

Formül için kitabınıza bakın. Bu son hali bir müddet için kullanmayacağız, dolayısıyla bunun tartışmasını erteliyoruz.

$\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ iken durum vektörü evrilmesi

Bundan sonra, $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ yaygın hali üzerinde odaklanalım. Bu halde $U(t, t_0)$'ı nasıl kuracağımızı gördük. Durum vektörlerinin zaman içinde (Schrödinger resminde) nasıl evrileceğine bir göz atalım. Verilen bir H için, enerji özvektörlerinin ortonormal bazını $|E_i\rangle$ ile gösterelim. Herhangi bir durum bu bazda açılabilir, özellikle başlangıç durumu :

$$|\psi, t_0\rangle = \sum_j \langle E_j|\psi, t_0\rangle |E_j\rangle.$$

t anında durum

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} \sum_j \langle E_j|\psi, t_0\rangle |E_j\rangle \\ &= \sum_j \langle E_j|\psi, t_0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_j} |E_j\rangle \end{aligned}$$

ile verilir. İyi bir alıştırma olarak, bu formülün, $|\psi, t_0\rangle$ başlangıç durumuna ait Schrödinger denklemi çözümü olduğunu doğrudan kontrol etmelisiniz. Dolayısıyla, zamanla gelişimin etkisi, enerji bazında bileşenlerin bir dönüşümü olarak görülebilir :

$$\langle E_j|\psi, t_0\rangle \longrightarrow \langle E_j|\psi, t_0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_j}$$

Bu çok önemli bir sonuçtur. Başlangıç durum vektörü verildiğinde (Schrödinger resminde) t anındaki durum vektörünü bulmak isterseniz aşağıdaki hesaplamaları gerçekleştirmeniz gerekir.

(1) Enerji özvektörlerini ve özdeğerlerini bulun.

(2) Başlangıç durum vektörünü enerji bazında açın.

(3) t anındaki durum vektörünün enerji bazında bileşenleri, orijinal bileşenlerin $e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)}$ fazı ile çarpımına eşittir.

Enerji özvektörlerinin neden bu kadar önemli olduğunu şimdi görebilirsiniz. Onları bulmak zaman evrilmesini anlamada anahtardır.

Durağan durumlar

Hamilton işlemcisinin zamana bağlı olmadığını kabul edin. Eğer bir sistemin başlangıç durum vektörü bir enerji özvektörü ise,

$$H|E_k\rangle = E_k|E_k\rangle$$

(böylece $t = t_0$ anında enerji kesinlik derecesinde biliniyor) zaman ilerledikçe bu durum vektörü önemsiz bir şekilde değişir. İlk olarak, basitçe zamanla gelişim işlemcisini uygulayın :

$$U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}|E_k\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_k}|E_k\rangle.$$

Ayrıca yukarıda tarif edilen 3 adımlı işlemi kullanarak bu sonucu kontrol edebilirsiniz (alıştırma). Enerji özvektörleri sadece bir faz çarpanı kadar değişir, bu yüzden *tüm fiziksel tahminler (olasılık dağılımları) zaman içinde değişmeyecektir.* Bundan dolayı, enerji özvektörleri sistemin "durağan" davranış gösterdiği durumlardır. Doğal olarak böyle durumlara "durağan durumlar" denir. Durağan durumda asla hiçbirşey olmaz.

Çoğu zaman, başlangıç durumunu, bir (veya daha fazla sıradeğişmeli) gözlenebilirin ölçümüne dayanan bir filtreleme işlemi yoluyla hazırlarız. Eğer bu gözlenebilirler Hamilton işlemcisi ile sıradeğişmeli ise hazırlanan/filtrelenen durumlar enerji özvektörleri, dolayısıyla durağan durumlar, olarak ayarlanabilir.

Burada, bir paradoksa dikkat çekmeliyim. Muhakkak, "kendiliğinden yayım" olarak anılan bir süreçten haberiniz vardır. Biliyorsunuz, bir atomik elektronu uyarılmış bir duruma koyduğunuzda hiçbirşey yapmasanız bile o daha düşük bir enerji durumuna bozunacaktır. Ve, kuantum mekaniği ile ilgili daha önceki bir derste atomların enerji seviyelerini öğrendiğinizi biliyorum. Enerji düzeyleri, atoma ait Hamilton işlemcisinin özvektörleri, yani durağan durumlarıdır. Şimdi paradoks göründü : eğer durağan durumda hiçbirzaman hiçbirşey olmuyorsa, atomun uyarılmış durumu – bir durağan durum – nasıl herhangi birşeye bozunuyor? Bu konuda düşünün!

Enerjinin korunumu

Durum vektörünün enerji özvektörlerinin bazı doğrultusundaki bileşenleri bu durumdaki enerjinin olasılık dağılımını belirler. Zaman evrimi bu katsayıların faz faktörleri ile çarpılması anlamına gelir. Bu, genellikle, vektörü aşikar olmayan bir şekilde değiştirir; bu da, çeşitli gözlenebilirlerin olasılık dağılımlarının zamanla değişmesine sebep olur. Ancak, enerji için olasılıklar bileşenlerin mutlak değerleri yoluyla ortaya çıktığı için enerjinin olasılık dağılımının zaman içinde değiş*me*diğini kolayca görebilirsiniz (hala Hamilton işlemcisinin zamandan bağımsız olduğunu kabul ederek). Kuantum mekaniğinde enerji bu şekilde korunur.

Kuşkusuz, klasik mekanikte genellikle enerji korunumunun (i) enerjiyi başlangıçta ölç, (2) daha sonraki bir zamanda enerjiyi ölç, (3) eğer bu değerler aynı ise enerji korunur, ile nitelendirildiğini düşünürüz. Bunları burada da yapabiliriz, fakat enerjiyi başlangıçta ölçerseniz sistemi bir enerji özvektörü olarak hazırlamış/filtrelemiş olacaksınız. Ondan sonra, elbette, olasılık yoğunluğu çok kolaydır! Gözdüğümüz gibi, eğer sistem bir kere enerji özvektörlerinden birinde ise tüm zamanlar için öyle kalır. Böylece, enerjinin daha sonraki herhangi bir ölçümünde hep aynı sonucu alacaksınız. Bu, enerji korunumunu klasik bakış açısıyla görmeye kesinlikle çok benziyor. Bununla birlikte, görmüş olduğumuz gibi, bir durağan durumda *bütün* olasılık dağılımları zamandan bağımsızdır. Dinamik evrilmenin apaçık olmadığı durağan olmayan durumlarda, istatistiksel kesinlikle – basit olmayan bir olasılık dağılımına sahip – başlangıçtaki enerjinin ne olduğu söylenemez. Birinin söyleye*bile*ceği şey, (enerjiyle uyuşumlu gözlenebilirler haricinde) diğer olasılık dağılımları, genellikle zamanla değişirken, enerji olasılık dağılımının değişmeyeceğidir. Kuantum mekaniğinde enerji korunumu işte bu anlama gelir.