Ders 30

Metindeki ilgili bölümler §3.9, 5.1

Bell'in teoremi (devam)

Spin gözlenebilirlerini kesinlikle belirlemek için bir yerellik kabulü ile bağlaşık uygun gizli değişkenler varsayarak korelasyon fonksiyonlarının

$$|\langle A(\hat{n}_1)B(\hat{n}_2)\rangle - \langle A(\hat{n}_1)B(\hat{n}_3)\rangle| \leq 1 + \langle A(\hat{n}_2)B(\hat{n}_3)\rangle$$

eşitsizliğini sağlaması gerektiğini bulduk. Şimdi kuamtum mekaniğinin bu eşitsizlikle uyuşumlu olmadığını göstereceğiz. İki gözlemcinin ölçümlerinin çarpımının beklenen değerini ($\hbar/2$ biriminde) kuantum mekaniğini kullanarak hesaplarız :

$$\langle A(\hat{n}_1)B(\hat{n}_2)\rangle = \left(\frac{1}{\hbar/2}\right)^2 \langle S_1 S_2\rangle = \frac{4}{\hbar^2}\langle\psi|(\hat{n}_1\cdot\vec{S}_1)(\hat{n}_2\cdot\vec{S}_2)|\psi\rangle.$$

(Tekrar edersek, bu nicelik iki spinin *korelasyon fonksiyonu*dur.) z, $\hat{n}_1$ yönünde seçilirse, bu nicelik kolayca hesaplanır (alıştırma) :

$$\begin{aligned}\langle\psi|(\hat{n}_1\cdot\vec{S}_1)(\hat{n}_2\cdot\vec{S}_2)|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{4}(\langle +-| - \langle -+|)\hat{n}_2\cdot\vec{S}_2(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ &= -\frac{\hbar^2}{4}\cos\theta\end{aligned}$$

burada θ, $\hat{n}_1$ ve $\hat{n}_2$ arasındaki açıdır. Bu son eşitliği elde etmek için $\hat{n}_1$ ve $\hat{n}_2$'nin $x-z$ düzleminde ve $\hat{n}_1$'in z yönünde olduğunu varsayıyoruz. $\hat{n}_1$ ve $\hat{n}_2$ arasındaki açıyı belirtmek için θ'yı kullanarak,

$$(\langle +-|-\langle -+|)\hat{n}_2\cdot\vec{S}_2(|+-\rangle+|-+\rangle) = (\langle +-|-\langle -+|)[\cos\theta S_{2z}+\sin\theta S_{2x}](|+-\rangle+|-+\rangle) = -\cos\theta$$

buluruz. Tabii ki, bu sonuçlar geometriktir ve koordinat seçimlerine bağlı değildir.

Bundan dolayı, $\theta_{ij} = \hat{n}_i\cdot\hat{n}_j$ tanımı ile, Bell'in eşitsizliği – kuantum mekaniğine uygulandığında –

$$|\cos\theta_{13} - \cos\theta_{12}| \leq 1 - \cos\theta_{23}$$

olduğunu ifade eder, ki **bu doğru değildir.**† Buradan hareketle, kuantum mekaniği, bütün gözlenebilirlerin birtakım (bilinmeyen) "gizli değişkenler"e dayanan, belirlenmiş yerel değerlere sahip olması ile uyuşmaz. Diğer taraftan, eğer gerçeklik, ayrı ayrı herbir parçacığa ait tüm gözlenebilirlerin birbiriyle uyuşumlu ve yerel olarak tanımlı olması ise (Kuantum mekaniği ancak eksik bir istatistiksel açıklama veriyorsa), deneysel olarak konuşmak gerekirse bu eşitsizlik geçerli

†Bunu görmek için yalnızca, $\hat{n}_1$'in y yönünü göstermesine, $\hat{n}_3$'ün x yönünü göstermesine ve $\hat{n}_2$ de $x-y$ düzleminde x'den (veya y'den) 45° açı yapacak şekilde durmasına izin verin, böylece $\theta_{12} = \pi/4 = \theta_{23}$, $\theta_{13} = \pi/2$.

olmalıdır. (Tabii ki, doğru açıklamanın yukarıda tarif edildiği gibi birtakım λ gizli değişkenleri kullanılarak elde edildiğini kabul ederek)

Bell eşitsizliğini kontrol etmek için 1960'lardan beri deneyler yapıldı. Birçok kişi 1980'lerin başlarındaki "Aspect deneyi"ne son noktayı koyan olarak itibar ediyor. Bu, açık bir şekilde kuantum mekaniğinin tahminleri ile tutarlı olarak, Bell eşitsizliğinin ihlal edildiğini gösterdi. Deney aslında spin-1 parçacıkları (fotonlar) kullandı, fakat fikirler yukarıdaki tarifle aynıdır.

Yaklaşıklık yöntemleri

Şimdi kuantum mekaniğinde çeşitli yaklaşıklık yöntemlerini çalışmaya başlıyoruz. Yaklaşıklık metotlarının pratik ve kavramsal bir değeri vardır. Pratiklik tarafına bakacak olursak, biz böyle yöntemleri, dalga fonksiyonlarına, enerjilere, spektrumlara olduğu kadar geçiş olasılıklarına ve diğer dinamik niceliklere de faydalı ve kullanışlı yaklaşıklıklar elde etmek için kullanıyoruz. Kavramsal taraftan, enerji düzeyleri ve dinamik hakkında çok değer verdiğimiz bazı düşünce tarzlarımızın esas olarak yaklaşıklık metotlarından kaynaklandığını göreceğiz.

Yaklaşıklık metotlarına gereksinim, çalışılmak istenen hemen hemen bütün gerçekçi fiziksel sistemlerin, net analitik çözümler bulmak için aşırı derecede karışık olması basit gerçeğinden ortaya çıkar. (Bu, klasik mekanikte de aynen doğrudur.) Dolayısıyla, örneğin, hidrojen atomununun (Coulomb alanında yüklü bir parçacık olarak modellendiğinde) üstesinden gelebilirken, helyum veya daha karmaşık atomları – bu atomların elektromanyetik alanlarla etkileşimini içeren dinamik süreçleri bir tarafa bıraksak bile – aynı tarzda ele alamayız. Aslında, (spin-yörünge bağlaşımı, ince ayar etkileşimi, çekirdeğin sonlu büyüklüğü, vb. gibi şeyleri içeren) daha gerçekçi hidrojen atomu modelleri tam çözülebilir değildir. Bu nedenle, bu sistemleri anlayabilmemizin *yegane* yolu yaklaşıklık yöntemleri bulmaktır.

Birkaç olası yaklaşıklık tekniğinden ikisini çalışacağız. İlk önce, özdeğer problemlerine yaklaşık çözümler veren genellikle "zamandan bağımsız pertürbasyon (tedirginme) teorisi" (TIPT) olarak adlandırılana bakacağız. Ancak bu (genelde Hamilton işlemcisi için özdeğer problemi çalışıldığı için) "durağan durum perturbasyon teorisi" olarak da bilinir. Bundan sonra, Schrödinger denklemine yaklaşık çözümler vermek için tasarlanmış "zamana bağlı pertürbasyon (tedirginme) teorisi"ni (TDPT) çalışacağız.

Büyük bir kısımda, esasen türetmeden, teorinin sonuçlarını açıklayacağım. Sonra, bazı önemli uygulamalara bakacağız.

Zamandan bağımsız pertürbasyon teorisi

Bu yaklaşıklık metodu verilen bir gözlenebilirin özdeğer ve özvektörlerini yaklaşık olarak vermek üzere tasarlanmıştır. Bu gözlenebilir genelde Hamilton işlemcisidir (ki bundan dolayı alternatif adı "durağan durum pertürbasyon teorisi"), fakat teknik ve sonuçlar sadece Hamilton işlemcisine kısıtlı değildir; herhangi bir gözlenebilir de olabilir.

Ana fikir ilgilenilen gözlenebiliri bir bakıma daha basit, iyi bilinen bir gözlenebilire "yakın" olarak görmeye teşebbüs etmektir. Sonra, verilen gözlenebilirin özdeğer ve özvektörleri, basit gözlenebilirinkiler cinsinden yaklaşık olarak bulunur. Örneğin, bir kişi, bir anharmonik salınıcının enerjileri ile

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \beta X^4$$

Hamilton işlemcisi vasıtasıyla ilgilenebilir. Anharmonikliğin (β ile tanımlı) uygunca "küçük" olduğunu kabul ederek, H'ın özdeğer ve özvektörleri harmonik salınıcınınkiler cinsinden faydalı bir şekilde yaklaşık olarak bulunabilir. Şimdi, bunu daha açık yapalım.

İlgilenilen H gözlenebilirinin özdeğerler aldığını ve

$$H = H_0 + V$$

biçiminde ifade edilebileceğini farz ediyoruz, burada V, H_0'ın küçük bir "pertürbasyon"udur, yani, H_0'ın özvektörleri bazında onun matris elemanları H_0'ın özdeğerlerine nispeten küçüktür. Sadelik adına, H_0'ın kesikli spektruma sahip olduğunu kabul edelim. Mevzu bahis olan bütün işlemcilerin yeterince iyi davrandığını kabul ediyoruz, öyle ki, H'ın özdeğer ve özvektörleri 1-parametreli bir işlemci ailesi yoluyla H_0'dan başlanarak elde edilebiliyor.* :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V, \qquad H(0) = H_0, \qquad H(1) = H$$

Herbir λ değeri için

$$H(\lambda)|E(\lambda)\rangle = E(\lambda)|E(\lambda)\rangle$$

buluruz. Fikir, eğer V'nin etkisi H_0'a kıyasla küçükse, H'ın özdeğer ve özvektörlerinin λ'nın bir kuvvet serisine açılıp yalnız bir veya daha fazla terim tutularak ve sonra $\lambda = 1$ de hesaplanarak yaklaşık olarak bulunabileceğidir. Bu, özdeğer ve özvektörlerin, potansiyelin matris elemanlarının (ki bunlar λV olarak alınabilir) bir kuvvet serisini kullanarak yaklaşık olarak bulunmasına eşdeğerdir. Bu sebeple,

$$\begin{aligned} E_n(\lambda) &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots, \\ |E_n(\lambda)\rangle &= |E_n\rangle^{(0)} + \lambda|E_n\rangle^{(1)} + \lambda^2|E_n\rangle^{(2)} + \ldots \end{aligned}$$

olduğunu kabul ediyoruz. Plan,

$$\begin{aligned} &(H_0+\lambda V)(|E_n\rangle^{(0)} + \lambda|E_n\rangle^{(1)} + \lambda^2|E_n\rangle^{(2)} + \ldots) \\ &\qquad = (E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots)(|E_n\rangle^{(0)} + \lambda|E_n\rangle^{(1)} + \lambda^2|E_n\rangle^{(2)} + \ldots) \end{aligned}$$

*λ parametresi birinci derece önemli değildir; göreceğiniz gibi hesabı düzenlemek için sadece elverişli bir vasıtadır.

denklemini λ'da derece derece, özdeğer ve özvektörlere gelen ilgili pertürbatif yaklaşıklıkları türetmek için çözmektir. Özvektörlerin ancak bir skalerle çarpımına kadar belirlendiğini dikkate alalım. Bu, tabii ki, bizim bunları boylandırmamıza ve durum vektörleri olarak görmemize izin verir. Dolayısıyla, *özdeğer problemini pertürbatif olarak çözsek bile, sonuçları yine de boylandırmamıza gerek vardır.*

Sıfırıncı derecede, gözle kontrol ederek ilgili denklemin

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

olduğu kolayca görülür, ki, bu net bir şekilde sıfırıncı vektör ve skalerin pertürbe edilmemiş özvektör ve özdeğer olduğunu söyler. Bu zaten sürpriz olmamalıdır. Yüksek mertebeden denklemler homojen olmayan, doğrusal bir "üçlü" denklem sistemi meydana getirir. Herbir denklem seti yalnızca daha düşük dereceden denklemlerin sonuçlarına bağlıdır. Bu nedenle, bu denklemler düşükten yüksek mertebeye doğru birbirinin ardı sıra çözülebilir. Sonunda, herhangi bir pertürbatif düzeltme pertürbe edilmemiş özdeğer ve özvektörler cinsinden tamamen ifade edilebilir. Tabii ki, fikir, yeterince küçük bir pertürbasyon için iyi bir yaklaşıklığın sadece nispeten düşük mertebelerde kalma ile elde edilebileceğidir. Çözüm sürecinin ayrıntıları (ki bu doğrusal cebir tekniklerinin güzel bir uygulamasını oluşturur) ders kitabınızda bulunabilir. Burada, yalnızca birinci mertebeden pertürbasyon teorisinin sonuçlarını ($\mathcal{O}(\lambda)$ düzeltmelerini) ifade edeceğim ve bunların nasıl kullanılacağını göstereceğim.

Ortaya çıktığı gibi, pertürbe edilmemiş ($\lambda = 0$) özdeğer dejenere değil iken birinci mertebeden denklemlerin çözümleri oldukça basittir. Bu durum ile başlıyoruz. *Eğer $E_n^{(0)}$ dejenere değil ise*, o zaman

$$E_n^{(1)} = V_{nn} \equiv {}^{(0)}\langle E_n|V|E_n\rangle^{(0)}$$

ve

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

elde ederiz, burada

$$V_{kn} = {}^{(0)}\langle E_k|V|E_n\rangle^{(0)}.$$

Böylece, enerji özdeğerine birinci mertebeden yaklaşıklık

$$E_n \approx E_n^{(0)} + V_{nn}.$$

Birinci dereceden *boylandırılmamış* özvektör,

$$|E_n\rangle \approx |E_n\rangle^{(0)} + \sum_{k\neq n} |E_k\rangle^{(0)} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

Buna göre, doğru özvektör, bir baz oluşturan eski özvektörlerin bir üstüste gelmesidir.

Eğer sistemin durumunu bu vektörü kullanarak yaklaşık olarak bulmak arzusunda isek bunu boylandırmamız gerekir. Bu, bunu görmek için birinci mertebeden pertürbasyon teorisinde dolambaçsız bir alıştırmadır,

$$|E_n\rangle_{\text{boylandırılmış}} = \sqrt{Z_n}|E_n\rangle$$

burada

$$Z = 1 - \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}.$$

Z_n'nin, H'nin kesinlikle E_n değerini aldığı bilinen durumda iken H_0 ölçümü yapıldığında $E_n^{(0)}$ bulma olasılığı olarak yorumlanabileceğini kolayca görebilirsiniz. Başka bir deyişle, Z_n'nin, sistem $|E_n\rangle$ durumundayken $|E_n\rangle^{(0)}$ durumunu bulma olasılığı olduğunu söyleyebiliriz. Genel olarak, en az bir $V_{kn} \neq 0$ olduğunu kabul edersek $Z_n < 1$ buluruz.