Ders 34

Metindeki ilgili bölümler §5.6

Zamana bağlı pertürbasyon teorisi (devam)

Aşağıdaki denklemleri çözmek için bir yaklaşıklık şeması kuruyoruz

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t}V_{nm}(t)c_m(t), \qquad V_{nm} = \langle n|V(t)|m\rangle.$$

Sadelik adına başlangıç durumunun (sıklıkla hal bu olduğu üzere) H_0'ın bir özdurumu olduğunu varsayıyoruz. $|\psi(0)\rangle = |i\rangle$ seçerek, yani, başlangıç durumunu *pertürbe edilmemiş* özvektörlerden birini alarak, sıfırıncı mertebeden yaklaşıklığımızı elde ederiz :

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

"Birinci mertebeden yaklaşıklık"ımız $c_n^{(1)}(t)$'i, diferansiyel denklemlerin sağ tarafına ait yaklaşıklığımızı birinci mertebede tam doğru olacak şekilde geliştirerek elde ederiz. Bunu, denklemin sağ tarafında sıfırıncı mertebeden yaklaşıklık çözümü $c_n^{(0)}$'ı kullanarak yaparız. Bu nedenle diferansiyel denklemi

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) \approx e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_i)t}V_{ni}(t)$$

biçiminde,

$$c_n(t) \approx c_n^{(0)} + c_n^{(1)} = \delta_{ni} + \frac{1}{\hbar i}\int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_i)t'}V_{ni}(t')$$

çözümüyle yaklaşık olarak elde ederiz. Bu süreci tekrarlayarak ardışık yaklaşıklıklar elde edilir. Biz yalnızca, aşikar olmayan ilk yaklaşıklık ile ilgileneceğiz ki bu, *birinci mertebeden pertürbasyon teorisi*ni tanımlar.

Sistemin H_0 tarafından tanımlanan (eskiden, durağan) $|i\rangle$ durumundan harekete başladığını kabul ettik. Tabii ki, pertürbasyon, genellikle $|i\rangle$, H'ın bir durağan durumu olmayacağı şekildedir, böylece $t > 0$ zamanlarında durum vektörü değişecektir. Sistemin, H_0'ın $|n\rangle$ özdurumunda bulunma olasılığının ne olduğunu hala sorabiliriz. Bu, $n \neq i$ olduğunu kabul ederek,

$$P(i \to n, i \neq n) = |\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_i)t'}V_{ni}(t')|^2$$

olur. Bu, TDPT'de birinci mertebeden *geçiş olasılığı*dır. Bu yaklaşıklıkta, hiçbir geçiş olmama olasılığı

$$P(i \to i) = 1 - \sum_{n\neq i} P(i \to n, i \neq n).$$

Tüm geçiş olasılıkları birden çok küçük olduğu sürece TDPT geçerlidir. Aksi taktirde yaklaşıklığımız başarısız olmaya başlar.

$i \to n$ için geçiş olasılığı yalnız, başlangıç ve son durumları "bağlayan" sıfırdan farklı bir V_{ni} matris elemanı varsa sıfırdan farklı olur. Aksi halde, geçişin "yasaklanmış" olduğunu söyleriz. Tabii ki, o sadece, başta gelen mertebe yaklaşıklıkta yasaklanmıştır. Eğer belli bir $i \to n$ geçişi bu bahsettiğimiz biçimde yasaklanmış ise bu, fiziksel olarak bu geçişin yasak olmayan diğer geçişlere nazaran çok düşük bir ihtimalle gerçekleşebileceği anlamına gelir. Bu küçük olasılığı hesaplamak için TDPT'de daha yüksek mertebelere gidilmek zorunda kalınacaktır.

Örnek : Zamandan bağımsız pertürbasyon

TDPT'de ilk uygulamamız olarak, V pertürbasyonunun gerçekte zamana bağlı olmadığında neler olacağını göz önüne alalım. Bu, kuşkusuz ki, H_0+V asıl Hamilton işlemcisinin de (H_0'ı zamandan bağımsız kabul ettiğimiz için) zamandan bağımsız olacağı anlamına gelir. Eğer H_0+V için özdeğer problemini çözebilirsek, derhal Schrödinger denkleminin tam çözümünü yazabiliriz ve yaklaşıklık metotları ile canımızı sıkmamıza gerek kalmaz. Ancak, tabii ki, problemin tam olarak çözülemeyeceğini farz ediyoruz. Şimdi mevcut zamandan bağımsız pertürbasyon örneğinde, zamandan bağımsız pertürbasyon teorisinden yaklaşık özdeğer ve özvektörleri Schrödinger denklemine yaklaşık çözümler bulmak için kullanabilirdik. Bu, aşağıda zamana bağlı pertürbasyon teorisi kullanarak elde edeceğimiz sonuçlarla birbirine eşit çıkar. Aslına bakarsak bunu ispatlamak çok hoş bir alıştırmadır, fakat bunu dert etmeyeceğiz.

V'nin zamandan bağımsız olduğunu kabul ederek, geçiş olasılığında ortaya çıkan integral kolayca hesaplanabilir ve

$$P(i \to n, i \neq n) = \frac{4|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \sin^2 \left\{ \frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right\}$$

elde ederiz (alıştırma). Bu V_{ni} matris elemanının yok olmadığını kabul ederek, geçiş olasılığının zaman içinde salındığını görüyoruz. Pertürbasyonun geçiş matris elemanının büyüklüğünün başlangıç ve son durumlar arasındaki pertürbe edilmemiş enerji farkına kıyasla küçük olması şartıyla bu salınımın genliği küçüktür. Bu sayı küçük olsa iyi olur yoksa pertürbatif yaklaşıklık geçersiz olur.

Geçiş olasılığının enerjiye bağımlılığını göz önüne alalım. Geçici olarak salınan geçiş olasılığının genliği son durumun enerjisi başlangıç durumunun enerjisinden faklılaştıkça hızlı bir şekilde azalır. Baskın geçiş olasılıkları $E_n = E_i$, $i \neq n$ olduğunda gerçekleşir. Bunun olması için, elbette, $|n\rangle$ ve $|i\rangle$ dejenere veya nerdeyse dejenere olan bir özdeğere karşılık gelmelidir. $E_n \approx E_i$ iken

$$P(i \to n, i \neq n, E_n = E_i) = \frac{1}{\hbar^2}|V_{ni}|^2 t^2$$

buluruz. Zaman içinde büyümesinden dolayı, yaklaşıklığımız bu vaziyette sonunda bozuluyor. Ancak hala, geçiş olasılığının $E_n \approx E_i$ durumları için t^2 ile orantılı tepe noktası yüksekliğiyle ve $1/t$ ile orantılı genişlikle zirve yaptığını görebilirsiniz. Bu yüzden, zaman aralığı yeterince büyük olduğunda başlıca olasılık "enerji koruyan tipte", $E_n \approx E_i$ geçişler içindir. Daha kısa zamanlar için "enejiyi korumayan tipte" geçişlere ait olasılıklar daha az ihmal edilebilirdir. Hakikaten, t zamanında bir ΔE enerji farkı ile bir geçiş için olasılık, geçiş olasılığını gözden geçirerek göreceğiniz gibi geçen süre

$$t \sim \frac{\pi\hbar}{\Delta E}$$

sağladığı anda, dikkate değerdir. Bu, zaman-enerji belirsizlik ilkesinin pertürbe edilmemiş durumlar cinsinden ifade edilmiş bir biçiminden başka birşey değildir. Bazen "eğer bir Δt zaman aralığında yapabilirseniz öyle ki $\Delta t \Delta E \sim \hbar$, enerji korunumu ΔE miktarı kadar ihlal edilebilir" denmek suretiyle bu vaziyet ifade edilir.

Tüm bu "enerji korunmaması" konuşmaları kuşkusuz ki tamamen semboliktir. $H_0 + V$ ile temsil edilen *gerçek* enerji, Hamilton işlemcisi zamandan bağımsızken kuantum mekaniğinde her zaman olduğu gibi korunur. Bu sadece, dinamiği, H_0 tarafından tanımlanan pertürbe edilmemiş "enerji"yi kullanarak pertürbe edilmemiş sistem cinsinden düşündüğümüz için, yani enerjinin korunmamasını pertürbe edilmemiş bir bakış açısıyla konuşabildiğimiz için oluyor. Bununla beraber, "yeterince kısa bir zamanda yapabilirseniz enerjinin korunumunu ihlal edebilirsiniz" gibi sloganların niçin ortaya çıktığını ve aslında ne anlama geldiğini görebilirsiniz. Böyle sloganların çok yanıltıcı olabileceğini de görebilirsiniz.