

Zamana bağlı pertürbasyon teorisi (devam)

Aşağıdaki denklemleri çözmek için bir yaklaşıklık şeması kuruyoruz

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

Sadelik adına başlangıç durumunun (sıklıkla hal bu olduğu üzere) H_0 'ın bir öz durumu olduğunu varsayıyoruz. $|\psi(0)\rangle = |i\rangle$ seçerek, yani, başlangıç durumunu *pertürbe edilmemiş* özvektörlerden birini alarak, sıfıncı 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 sıfıncı 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,

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

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 teorisini* 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 $|n\rangle$ öz durumunda bulunma olasılığının ne olduğunu hala sorabiliriz. Bu, $n \neq i$ olduğunu kabul ederek,

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

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

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

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

$i \rightarrow n$ için geiş olasılıđı yalnız, bařlangı ve son durumları “bađlayan” sıfırdan farklı bir V_{ni} matris elemanı varsa sıfırdan farklı olur. Aksi halde, geiřin “yasaklanmış” olduđunu syleriz. Tabii ki, o sadece, bařta gelen merteye yaklařıklıkta yasaklanmıştırd. Eđer belli bir $i \rightarrow n$ geiři bu bahsettiđimiz biimde yasaklanmış ise bu, fiziksel olarak bu geiřin yasak olmayan diđer geiřlere nazaran ok dřük bir ihtimalle gerekleřebileceđi anlamına gelir. Bu kk olasılıđı hesaplamak iin TDPT’de daha yksek mertebelere gidilmek zorunda kalınacaktır.

rnek : Zamandan bađımsız pertrbasyon

TDPT’de ilk uygulamamız olarak, V pertrbasyonunun gerekte zamana bađlı olmadıđında neler olacađını gz nne alalım. Bu, kuřkusuz ki, $H_0 + V$ asıl Hamiltonyen’in de (H_0 ’ı zamandan bađımsız kabul ettiđimiz iin) zamandan bađımsız olacađı anlamına gelir. Eđer $H_0 + V$ iin zdeđer problemini ozebilirsek, derhal Schrdinger denkleminin tam zmn yazabiliriz ve yaklařıklık metotları ile canımızı sıkmamıza gerek kalmaz. Ancak, tabii ki, problemin tam olarak zlemeyeceđini farz ediyoruz. Őimdi mevcut zamandan bađımsız pertrbasyon rneđinde, zamandan bađımsız pertrbasyon teorisinden yaklařık zdeđer ve zvektrleri Schrdinger denklemine yaklařık zmler bulmak iin kullanabiliriz. Bu, ařađıda zamana bađlı pertrbasyon teorisini kullanarak elde edeceđimiz sonularla birbirine eřit ıkar. Aslına bakarsak bunu ispatlamak ok hoř bir alıřtırmadır, fakat bunu dert etmeyeceđiz.

V ’nin zamandan bađımsız olduđunu kabul ederek, geiř olasılıđında ortaya ıkan integral kolayca hesaplanabilir ve

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

elde ederiz (alıřtırma). Bu V_{ni} matris elemanının yok olmadıđını kabul ederek, geiř olasılıđının zaman iinde salındıđını gryoruz. Pertrbasyonun geiř matris elemanının byklđnn bařlangı ve son durumlar arasındaki pertrbe edilmemiř enerji farkına kıyasla kk olması řartıyla bu salınımın genliđi kktrd. Bu sayı kk olsa iyi olur yoksa pertrbatif yaklařıklık geersiz olur.

Geiř olasılıđının enerjiye bađımlılıđını gz nne alalım. Geici olarak salınan geiř olasılıđının genliđi son durumun enerjisi bařlangı durumunun enerjisinden farklılařtıka hızlı bir řekilde azalır. Baskın geiř olasılıkları $E_n = E_i$, $i \neq n$ olduđunda gerekleřir. Bunun olması iin, elbette, $|n\rangle$ ve $|i\rangle$ dejenere veya nerdeyse dejenere olan bir zdeđere karřılık gelmelidir. $E_n \approx E_i$ iken

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

buluruz. Zaman iinde bymesinden dolayı, yaklařıklıđımız bu vaziyette sonunda bozuluyor. Ancak hala, geiř olasılıđının $E_n \approx E_i$ durumları iin t^2 ile orantılı tepe noktası yksekliliđiyle ve $1/t$ ile orantılı geniřlikle zirve yaptıđını grebilirsiniz. Bu yzden, zaman aralıđı yeterince byk

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 yapabilirsiniz öyle ki $\Delta t \Delta E \sim \hbar$, enerji korunumu ΔE miktarı kadar ihlal edilebilir” demek suretiyle bu vaziyet ifade edilir.

Tüm bu “enerji korunmaması” konuşmaları kuşkusuz ki tamamen semboliktir. $H_0 + V$ ile temsil edilen *gerçek* enerji, Hamiltonyen 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 yapabilirsiniz enerjinin korunumunu ihlal edebilirsiniz” gibi sloganların niçin ortaya çıktığını ve aslında ne anlama geldiğini görebilirsiniz. Böyle sloganların çok yanıltıcı olabileceğini de görebilirsiniz.